

111 晶向冲击加载下单晶铜中纳米孔洞增长的早期动力学行为^{*}

邓小良¹⁾²⁾ 祝文军^{1)2)†} 贺红亮¹⁾ 伍登学²⁾ 经福谦¹⁾²⁾

1) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 绵阳 621900)

2) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2006 年 1 月 22 日收到, 2006 年 3 月 10 日收到修改稿)

利用分子动力学方法模拟计算了单晶铜中纳米孔洞在沿 111 晶向冲击加载下增长的早期过程. 测量发现不同加载强度下等效孔洞半径随时间近似成线性变化. 观测到单孔洞增长的两种位错生长机理: 加载强度较低时, 只在沿着冲击加载方向的孔洞顶点附近区域有位错的成核和运动; 而随着加载强度超过一定阈值, 在沿冲击加载和其垂直方向的孔洞顶点区域都观察到位错的成核和运动. 在前一种机理作用下, 孔洞只沿加载方向增长; 在后一种机理作用下, 孔洞同时沿加载和垂直于加载方向增长. 分析孔洞表面原子的位移历史, 发现沿加载及与其垂直方向的孔洞顶点沿径向的速度基本恒定, 由此提出了一个孔洞生长模型, 可以解释孔洞增长的线性生长规律.

关键词: 纳米孔洞, 分子动力学, 冲击加载, 位错

PACC: 4630N, 7115Q, 6250, 6170Q

1. 引 言

延性金属在高应变率下的断裂过程包括微孔洞的成核、生长和相互贯通等微观过程^[1]. 基于连续介质力学, 人们从理论上对微孔洞在不同应力条件下的生长规律进行了广泛研究, 并提出了相应的生长模型^[2-6]. 这些模型为在连续统尺度上理解微孔洞的生长规律提供了理论框架. 然而在这些模型中含有一些待定参数, 确定参数的具体数值依赖于实验. 另外, 连续介质模型都无法考虑材料本身在微观尺度上不连续的结构特征, 上述问题使模型的应用性和适用范围受到一定限制. 因此要构建更加准确和科学的模型就有必要从微观尺度出发, 结合材料的具体结构对微观缺陷在拉伸应力作用下的生长规律进行细致研究, 同时从微观尺度上研究这几个过程对于深入理解材料的断裂问题有重要意义^[2].

通常认为微观缺陷一旦在材料中成核, 影响它们后续生长的因素有基体材料的性质、应力应变环境、应变率及温度等因素^[2]; 在不同的外部条件下, 一般认为延性材料中微孔洞的微观生长机理主要

有: 1) 扩散机理, 即材料中空位从微孔洞表面流进或流出, 从而使微孔洞生长或坍塌; 2) 塑性流或粘性流机理, 即微孔洞周围在应力作用下出现塑性流或黏性流, 它们后续的运动使微孔洞形貌发生变化.

分子动力学方法由于其时间和空间分辨率上的优势自然成为研究这类问题的有力工具. 最近几年, 伴随着计算机技术和并行算法的发展, 分子动力学方法应用范围越来越宽广, 已被人们应用到冲击过程^[7], 金属熔体黏度^[8]等问题的研究中, 目前人们能够模拟计算的体系尺度越来越大, 逐步出现了在微观尺度上对这些过程进行详细研究的报道^[9-14]. 如 Belak 等人对延性材料动态断裂过程中微孔洞贯通这一现象进行了研究^[10,11], 他们的分子动力学模拟结果表明, 当两个孔洞相距大约为一个孔洞半径时, 贯通过程开始出现. 其他的研究结果显示延性金属中微孔洞在受到拉伸和压缩作用时, 均会在孔洞表面附近区域出现位错成核和运动, 位错环可能有剪切型和棱型两种形式^[9]. 这些位错环在拉伸或压缩应力的作用下开始运动, 从而使微孔洞长大或坍塌. 值得注意的是, 以上得到的孔洞增长规律大部分是准静态加载条件下得到的, 没有考虑冲击加载下

^{*} 国家自然科学基金 NSAF 联合基金重点项目(批准号: 10476027)及中国工程物理研究院科学技术基金(批准号: 20050105)资助的课题.

[†] E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

的动力学效应,并且关于在原子尺度上单个孔洞生长的定量规律也未见报道。

本文用分子动力学方法模拟计算了单晶铜中的纳米孔洞在沿 111 晶向进行冲击加载下的演化过程,着重研究了纳米孔洞在拉伸应力作用下的生长规律,同时也观察了孔洞在生长过程中周围发生塑性变形的过程,通过在原子尺度观察孔洞生长的微观机理,并借助测量得到的微孔洞顶点处原子运动速度,提出了一个孔洞生长模型,这个模型能够较好地描述微孔洞在拉伸应力作用下的生长规律,从而对单个孔洞在动载荷下的早期生长过程有更深刻的认识。

2. 模拟方法

在我们的计算模拟中,采用 Mishin 等人^[15]的原子嵌入势(EAM)函数描述铜原子之间的相互作用,因为它不仅能准确地计算单晶铜的弹性性质、结合能、缺陷结合能等参数,而且还拟合了铜在高压下的 $P-V$ 关系,能够比较准确的描述铜原子之间在冲击加载下的相互作用。运用预测校正算法迭代求解经典牛顿运动方程^[16],时间步长为 1×10^{-15} s。模拟所用模型的 x, y, z 坐标分别是沿 $[\bar{1}\bar{1}1]$ $[110]$ $[\bar{1}\bar{1}2]$ 晶向,沿 x 方向进行冲击加载, x 方向为自由边界条件, y, z 方向分别为周期性边界条件,模拟体系共包含 382108 个原子,在模拟体系的中心预置了一个直径约 1.3 nm 的微孔洞(除去 86 个铜原子形成)。

冲击加载后产生动态拉伸应力用以下方法实现,固定最左侧($\bar{1}\bar{1}1$)表面两层原子作为活塞,以 x 方向恒定速度推动活塞在材料中产生冲击波,冲击波阵面后的粒子速度等于活塞速度,当冲击波传播到 x 方向另一个自由面后,撤掉活塞,使两个自由面同时返回一个稀疏波,稀疏波在中心相遇并相互作用,产生拉伸应力区,孔洞在此拉伸应力的作用下增长。在模拟中,不考虑初始温度的影响,模拟的初始温度设为 0 K,不考虑初始温度的影响。测量孔洞体积时,首先将模拟体系划分为大小相等的网格,每个网格的体积为 $\frac{a^3}{2}$ (a 为铜的晶格常数),如果相邻的两个网格内都没有原子,那么就认为这两个网格是孔洞的一部分,详细介绍见文献^[17]。

3. 计算结果和讨论

模拟中发现在所模拟的尺度内,当活塞速度低

于 $3.0 \text{ \AA}/\text{ps}$,孔洞受到弹性压缩和拉伸,但是孔洞体积没有发生大的变化,当活塞速度超过 $5.0 \text{ \AA}/\text{ps}$ 后,拉伸形成多个孔洞,结果将在今后另撰文报道。本文模拟的活塞速度范围从 $3.0-5.0 \text{ \AA}/\text{ps}$,只考虑单个孔洞的增长情况。

3.1. 孔洞增长的塑性特征

通过原子尺度上的图像分析可以看到,微孔洞在冲击压缩阶段开始坍塌,随着活塞速度的增大,微孔洞塌缩后所剩体积越小,同时微孔洞周围将失去晶体结构。我们观测到微孔洞长大的过程可以分成两个阶段:初始阶段由于孔洞塌缩原子处于短程无序状态,相互作用较弱,它们能够迅速在拉伸应力作用下运动,此时对应的微孔洞体积将迅速增加,并基本恢复到孔洞初始形状,第二阶段,当微孔洞体积在拉伸应力作用下继续增加时,需要破坏周围完整的晶体结构,给出新的表面积。由于第一阶段基本是微孔洞体积和形状的恢复,以及弹性拉伸过程,第二阶段微孔洞体积将发生比较大的变化,伴随着孔洞周围发生塑性变形,属于塑性阶段。塑性阶段的孔洞生长过程将在材料内部形成新的破坏,并对后续孔洞之间的相互贯通有重要影响,这对研究材料的动态断裂有重要意义,因此本文着重研究第二阶段的孔洞长大规律。在用准静态加载进行的分子动力学模拟结果中,也观察到微孔洞生长的这两个类似阶段^[11]。本文模拟孔洞所经历的拉伸时间受模拟体系尺寸的限制,在所模拟的加载强度下约为 2.5 ps ,因此得到的信息只反映单个孔洞增长早期的动力学行为特征。

由于微孔洞的长大伴随着位错在微孔洞周围区域成核和运动,即孔洞周围将发生塑性变形,fcc 结构晶体中全位错通常分解为部分位错运动,而部分位错扫过的区域将经历从 fcc 结构到 hcp 结构的转变。运用键对分析技术^[18]能够识别模型内部原子所处的三种结构,即 fcc 面心结构、hcp 六角密集结构、无序结构(非 fcc 和非 hcp 结构),微孔洞周围原子处于无序结构,因此通过保留模型中属于 hcp 结构的原子,可以观察到微孔洞周围塑性变形区域,通过保留模型中属于无序结构的原子,可以观察到微孔洞的外形轮廓。图 1 是采用上述方法去掉 fcc 结构原子后得到的原子形貌图。图中对应的时刻为第 6800 个时间步长,此时微孔洞已处于塑性增长阶段,从图中可以看到在活塞速度为 $4.0 \text{ \AA}/\text{ps}$ 时,只在沿冲击

方向的孔洞顶点附近观察到位错成核并分别在三族 {111} 滑移面上运动,而在垂直于冲击方向没有观察到位错运动,这说明在该方向上没有发生塑性变形.而在图 1(b)中看到活塞速度为 4.25Å/ps 时,在沿冲击加载的方向和图 1(a)类似,但在垂直于冲击加载方向上也看到有较大面积的位错运动痕迹,这说明

该区域也发生了塑性变形.

对活塞速度为 3.0, 3.5, 4.5, 5.0Å/ps 的计算模拟结果分析表明,当活塞速度小于 4.0Å/ps 时,具有和 4.0Å/ps 的活塞速度相类似的结果;当活塞速度大于 4.25Å/ps 时,具有和 4.25Å/ps 的活塞速度相类似的结果.

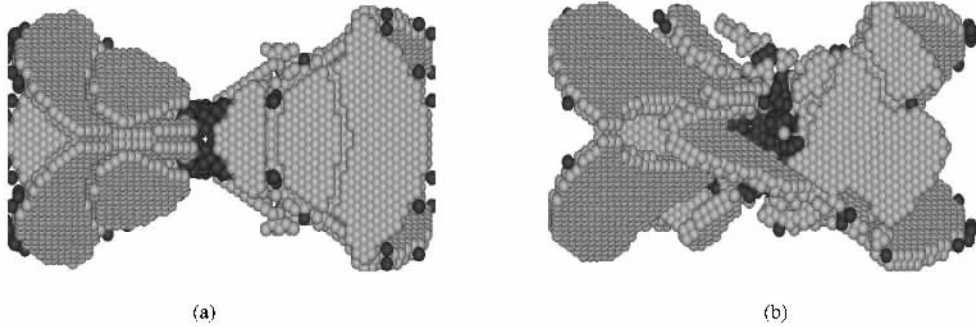


图 1 不同冲击强度(活塞速度)下 6800 个时间步长的原子结构图(深色代表该原子处于无序结构,浅灰色代表该原子处于 hcp 结构) (a) 活塞速度 4.0Å/ps (b) 活塞速度 4.25Å/ps

3.2. 孔洞增长速率

微孔洞的增长有两个基本特征,一个是微孔洞的形状,另一个是微孔洞的增长速率.已有的对冲击回收样品进行的显微观察分析表明^[1],微孔洞的形状复杂,为了方便起见,基于连续介质力学的微孔洞演化模型通常都假定微孔洞为球形,通过对应的等效半径增长速率来反映孔洞增长快慢^[19, 20].在此,我们也采用等效半径增长速率来描述孔洞的增长过程.首先通过测量得到不同时刻的孔洞体积,然后通

过计算得到拉伸阶段相应的等效孔洞半径随时间的变化关系,结果如图 2 所示.为了方便比较,我们将不同活塞速度时微孔洞开始生长的时刻都定为零时刻,从图 2 可以看出不同活塞速度下等效孔洞半径的增长规律都可以用下式描述:

$$r' = r'_0 + v'_r t, \tag{1}$$

其中 r' 为 t 时刻等效孔洞半径, r'_0 为拟合所得等效孔洞初始半径, v'_r 等效孔洞半径增长速率,它反映了孔洞增长快慢,具体数值见表 1.

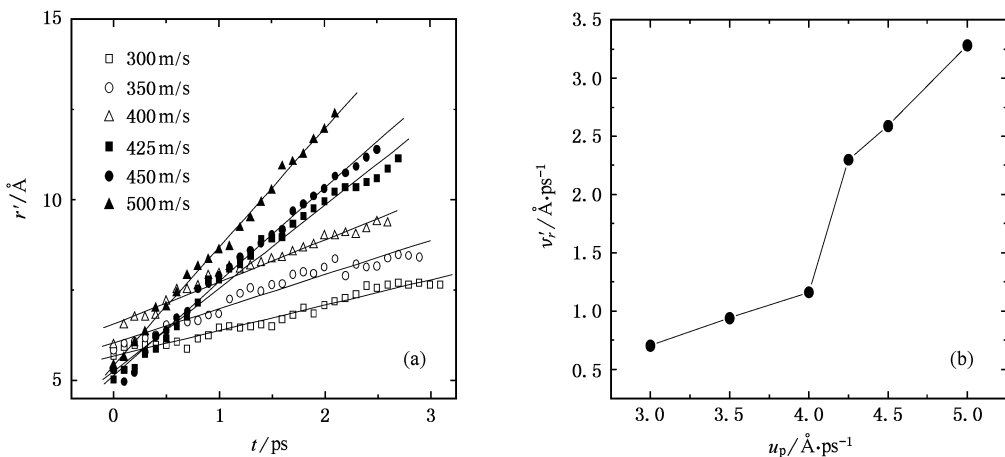


图 2 (a) 等效孔洞半径与时间的关系 (b) 等效孔洞半径增长速率与活塞速度的关系

表 1 不同活塞速度下 r'_0 , v'_r 的值, 其中 u_p 为活塞速度, r'_0 为拟合所得等效孔洞初始半径, v'_r 为等效孔洞半径增长速率.

u_p ($\text{\AA}/\text{ps}$)	3.00	3.50	4.00	4.25	4.50	5.00
$r'_0/\text{\AA}$	5.67	6.02	6.55	5.23	5.12	5.40
v'_r ($\text{\AA}/\text{ps}$)	0.70	0.94	1.16	2.30	2.59	3.28

从图 2 可以看到, 在固定的冲击强度下, 等效孔洞半径增长速率基本是常数, 不随半径的增加而增加. 这一点和过去 NAG 模型^[2]及 Rice 模型^[19]的单孔洞增长速率不同. 最近 Liu^[20]的工作指出, 孔洞的初始大小对孔洞增长速率有显著影响, 当孔洞初始体积很小时, 孔洞增长速率只与拉伸应力有关, 我们的结果支持了这种观点. 从图 2(b) 可以看到, 在活塞速度位于 4—4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$ 之间时, 等效孔洞半径的增长速率发生了显著变化, 这和前面观察到的位错机理发生变化的活塞速度区间相同. 显然, 孔洞增长塑性机制的变化, 造成了孔洞增长速率的突变.

3.3. 孔洞增长模型

由于微孔洞在任意时刻的体积取决于构成微孔洞表面原子的空间位置, 如果能够得到所有构成微孔洞表面原子的运动规律, 则就可能揭示微孔洞增长规律的微观机理. 但是如前所述, 在动载荷下, 微孔洞形状变化复杂, 要准确确定任意时刻构成微孔洞表面原子的空间位置是比较困难的. 但是, 根据空间的对称性, 可以通过测量孔洞表面特征点的位置随时间的变化关系, 进而得到孔洞表面其他位置的类似关系, 然后由此就能够得到等效孔洞半径, 与前面直接测量体积方法得到的等效孔洞半径相比较, 可以证明模型是否准确. 图 3 是微孔洞示意图, A, B 是位于沿加载方向的微孔洞上两个顶点, C, D 处于垂直于加载方向的大圆上的两个对称顶点.

分别计算不同加载强度下 A, B 两顶点位移差 (δX_{AB}) 及 C, D 两顶点径向位移差 (δX_{CD}) 随时间的变化关系, 发现当活塞速度小于 4.0 $\text{\AA}/\text{ps}$ 时, 具有和 4.0 $\text{\AA}/\text{ps}$ 的活塞速度相类似的结果; 当活塞速度大于 4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$ 时, 具有和 4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$ 的活塞速度相类似的结果. 图 4(a) 对应的活塞速度为 4.0 $\text{\AA}/\text{ps}$, 图 4(b) 对应的活塞速度为 4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$, 为了方便比较, 在做图时对每组数据均用它们在冲击加载前的数值进行了归一化处理. 从图 4(a) 可以看到, 在所考察区域之间的相对位移随时间的变化可以分成以下几个阶段: 首先, 随着冲击波传播到孔洞附近, 微孔洞开始受到压缩, 此时 δX_{AB} , δX_{CD} 及等效孔洞半径 R 均开始减

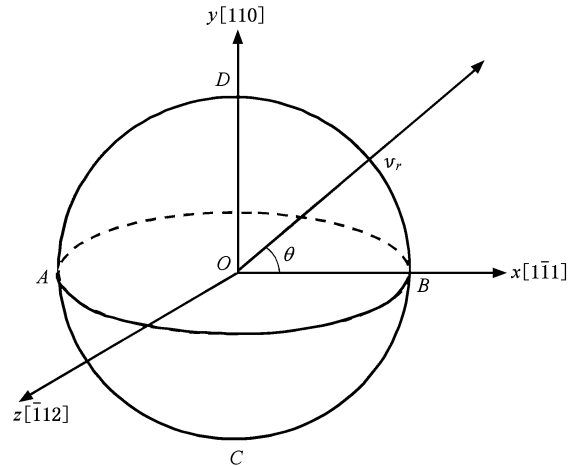


图 3 微孔洞示意图

小. 随着微孔洞附近开始形成拉伸应力区, δX_{AB} , δX_{CD} 及 R 均开始增大, 直到拉伸波达到自由面以后, 反射波返回结束拉伸应力状态. 从图中可以看到, 活塞速度为 4.0 $\text{\AA}/\text{ps}$ 时, 在微孔洞受到第二次压缩之前, δX_{CD} 在增加到一定程度后基本不会再增加. 在图 4(b) 中等效孔洞半径 R 与 δX_{AB} 的变化趋势和 (a) 图类似, 但可以明显看出与 (a) 图不一样的是, 在拉伸状态结束前 δX_{CD} 一直近似保持线性增加.

当活塞速度在 4.0 $\text{\AA}/\text{ps}$ 和 4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$ 之间, 和增长速率一样, δX_{CD} 出现突然变化. 同时结合图 1 可以看到, 这个阈值和 C, D 区域是否有位错的成核和运动的阈值相同. 关于不同活塞速度下 C, D 处原子不同的运动状态可以这样理解: 如果微孔洞要在 CD 方向上有比较显著的增长, 则必然要破坏该区域的晶体结构, 同时位错在该区域成核并向外运动; 由于位错的成核和运动需要一定的阈值应力, 而在模拟计算过程中, 体系内部的应力大小取决于冲击强度, 因此我们观察到存在一个临界活塞速度, 当活塞速度高于此临界值时, 在 CD 方向孔洞周围也有位错的成核和运动, 而活塞速度低于此临界值时, 在 CD 方向孔洞周围没有位错的成核和运动. 模拟结果显示在该尺度下此临界活塞速度值应该位于 4.0—4.25 $\text{\AA}/\text{ps}$ 之间.

由于 δX_{AB} , δX_{CD} 随时间基本呈线性变化, 据此可以得到图 3 中 B 和 D 顶点的径向速度 v_B 和 v_D . 有了 B, D 两顶点的径向速度, 同时假设速度在孔洞表面是连续变化, 则在表面上任一点处沿径向的速度为

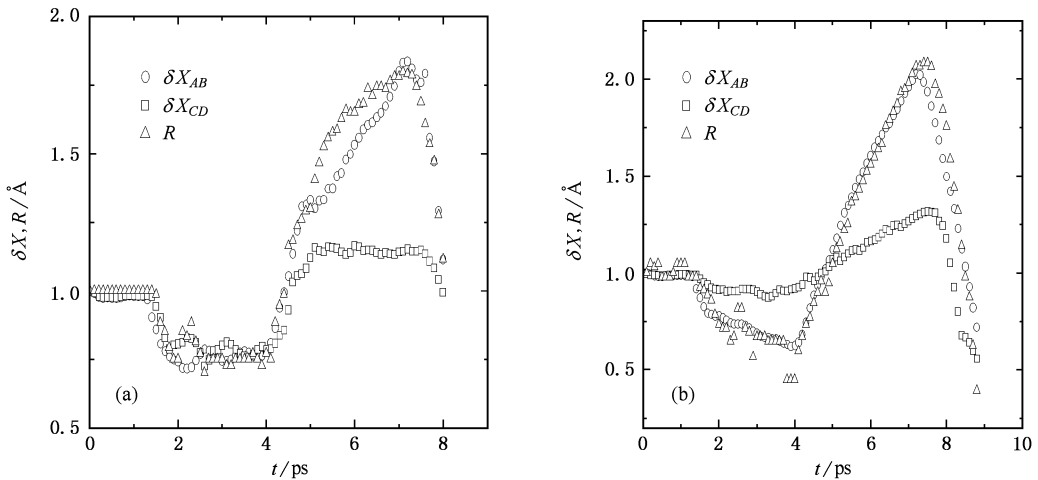


图4 不同活塞速度时等效孔洞半径、 δX_{AB} 及 δX_{CD} 随时间的变化关系(其中空心圆圈代表 δX_{AB} , 空心四边形代表 δX_{CD} , 空心三角形代表等效孔洞半径) (a) 对应活塞速度 4.0 \AA/ps (b) 对应活塞速度 4.25 \AA/ps

$$v_r = v_B \cos\theta + v_D \sin\theta. \quad (2)$$

在任一时刻 t 可以将孔洞体积微元写成

$$dV = \frac{1}{3} r^3 \sin\theta d\theta d\varphi, \theta \in (0, \pi), \varphi \in (0, 2\pi), \quad (3)$$

其中 r 为原点到面积微元的距离。

结合(2)(3)式可以得到任意时刻微孔洞体积表达式

$$\begin{aligned} V &= \int dV = 2 \times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \frac{1}{3} ((r_0 + v_B \cos\theta \\ &+ v_D \sin\theta)t)^3 \sin\theta d\theta \\ &= \frac{4\pi}{3} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{3} ((r_0 + v_B \cos\theta \\ &+ v_D \sin\theta)t)^3 \sin\theta d\theta, \end{aligned} \quad (4)$$

其中 r_0 为微孔洞初始半径, 考虑对称性, 所以 θ 的积分区间为 $(0, \frac{\pi}{2})$, 计算(4)式得到

$$\begin{aligned} V &= v_D t r_0^2 \pi^2 + \frac{1}{4} v_B^2 v_D t^3 \pi^2 + v_D^2 v_B t^3 \pi \\ &+ \frac{1}{4} v_D^3 t^3 \pi^2 + \frac{8}{3} v_D v_B t^2 r_0 \pi \\ &+ \frac{4}{3} r_0^3 \pi + 2 v_B t r_0^2 \pi \\ &+ \frac{4}{3} v_B^2 t^2 r_0 \pi + \frac{8}{3} v_D^2 t^2 r_0 \pi + \frac{1}{3} v_B^3 t^3 \pi. \end{aligned} \quad (5)$$

这样就得到了在一定的初始半径 r_0 下, 微孔洞体积随时间的变化规律。

在(5)式中共有三个参数, 其中 r_0 为初始孔洞

半径, 是已知参数, 另外两个参数 v_D, v_B 可以通过 δX_{AB} 及 δX_{CD} 与时间的关系得到. 为了便于和前面直接测量结果进行比较, 通过(5)式也可得到等效孔洞半径随时间的变化规律. 当 v_D 和 v_B 是常数时, 发现模型给出的等效孔洞半径 R 和 t 之间满足下式:

$$R = R_0 + v_R t. \quad (6)$$

此时, 相应的标准偏差(SD)很小, 这说明数据的线性关系比较好. 不同活塞速度下测量得到的 v_D, v_B 以及计算得到的 v_R, R_0 的值如表2所示. 表中 r_0, R_0, v_R 三列中括号里的数据表示相应参数的变化范围, 可以看出, r_0 即使变化达到50%, 对等效孔洞半径增长速率影响也很小, 这说明等效孔洞半径增长速率只依赖于孔洞表面原子径向速度, 而基本不依赖于孔洞初始半径大小.

图5给出了直接测量体积得到的 v_r' 和基于孔洞顶点径向速度的增长模型得到的 v_R 的比较. 从图中可以看出, 模型给出的等效孔洞半径增长速率与直接测量结果符合很好, 说明模型比较准确的描述了孔洞的增长过程. 同时说明在活塞速度从 4.0 \AA/ps 变化到 4.25 \AA/ps 时, 等效孔洞半径增长速率发生了显著变化的微观机理是由于冲击强度引起的位错机理改变, 使孔洞的增长方向由单一沿冲击加载方向增长变化为同时沿加载及其垂直方向增长造成的. 这种变化规律以前还未见文献报道, 它对深入认识高应变率下延性材料中动态损伤的微观机理有重要的意义.

表 2 不同活塞速度下的 v_B, v_D, r_0 以及 R_0, v_R, SD . 其中 v_B 表示图 2 中 B 处粒子径向速率, v_D 表示 D 处粒子径向速率, r_0 为微孔洞初始半径, R_0 为线性拟合参数, v_R 为模型给出的等效孔洞半径生长速率, SD 表示标准偏差

u_p ($\text{\AA}/\text{ps}$)	3.00	3.50	4.00	4.25	4.50	5.00
v_B ($\text{\AA}/\text{ps}$)	0.85	1.32	1.83	2.62	2.83	3.21
v_D ($\text{\AA}/\text{ps}$)	0	0	0	0.96	1.14	1.92
$r_0/\text{\AA}$	$6.00(\pm 3.00)$	$6.00(\pm 3.00)$	$6.00(\pm 3.00)$	$6.00(\pm 3.00)$	$6.00(\pm 3.00)$	$6.00(\pm 3.00)$
$R_0/\text{\AA}$	$5.97(\pm 3.01)$	$5.94(\pm 3.01)$	$5.91(\pm 3.01)$	$5.94(\pm 3.00)$	$5.94(\pm 3.00)$	$5.96(\pm 3.00)$
v_R ($\text{\AA}/\text{ps}$)	$0.46(\pm 0.02)$	$0.74(\pm 0.03)$	$1.04(\pm 0.04)$	$2.16(\pm 0.02)$	$2.41(\pm 0.02)$	$3.18(\pm 0.01)$
SD	0.01	0.02	0.03	0.02	0.02	0.01

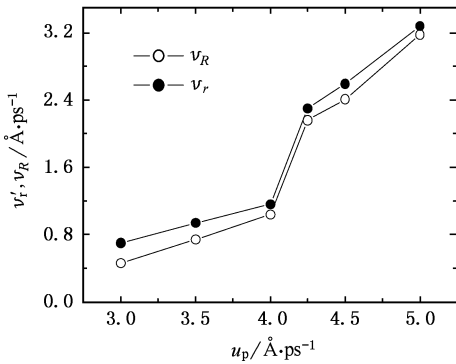


图 5 不同活塞速度下基于模型和直接测量孔洞体积得到的等效孔洞半径生长速率

孔洞在冲击加载下的早期生长规律,在模拟计算的活塞速度范围内,发现随着活塞速度增加,微孔洞呈现两种不同的生长方式,当活塞速度小于或等于 $4.0 \text{\AA}/\text{ps}$ 时,微孔洞主要是沿着冲击加载方向生长,在垂直于冲击加载的方向上不会生长;当活塞速度大于或等于 $4.25 \text{\AA}/\text{ps}$ 时,微孔洞也会在垂直于冲击加载的方向上生长.通过测量发现孔洞表面垂直于加载方向和平行于加载方向的顶点速度基本恒定,由此提出了一个微孔洞生长模型,通过这个模型能够得到等效孔洞半径生长速率,该模型计算得到的生长速率与直接测量结果符合很好,并且显示等效孔洞半径生长速率基本不依赖于孔洞初始半径.

感谢中国工程物理研究院计算机研究所张亚林在并行计算过程中提供的帮助.

4. 结 论

利用分子动力学方法模拟计算了单晶铜中纳米

[1] Seaman L, Curran D R, Shockey D A 1976 *J. Appl. Phys.* **47** 4814

[2] Curran D R, Seaman L, Shockey D A 1987 *Physical Reports* **147** 253

[3] Carroll M M, Holt A C 1972 *J. Appl. Phys.* **43** 1626

[4] Johnson J N 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 2812

[5] Johnson J N, Addessio F L 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6699

[6] Nasser S N, Hori M 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 2746

[7] Chen J, Jing F Q, Zhang J L, Chen D Q 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2386 (in Chinese) [陈 军、经福谦、张景琳、陈栋泉 2002 物理学报 **52** 2386]

[8] Geng H R, Sun C J, Yang Z X, Wang R, Ji L L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1320 (in Chinese) [耿 昊、孙春静、杨中喜、王 瑞、吉蕾蕾 2006 物理学报 **55** 1320]

[9] Lubarda V A, Schneider M S, Kalantar D H, Remington B A, Meyers M A 2004 *Acta Mater* **52** 1397

[10] Seppala E T, Belak J, Rudd R E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 245503

[11] Seppala E T, Belak J, Rudd R E 2005 *Phys. Rev. B* **71** 064112

[12] Marian J, Knap J, Ortiz M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 165503

[13] Gungor M R, Maroudas D 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 113527

[14] Davila L P, Erhart P, Branga E M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 161902

[15] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106

[16] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford : Clarendon Press) p341

[17] Luo J, Zhu W J, Lin L B, He H L, Jing F Q 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2791 (in Chinese) [罗 晋、祝文军、林理彬、贺红亮、

经福谦 2005 物理学报 **54** 2791]

[20] Liu B , Qiu X , Huang Y , Hwang K C , Li M , Liu C 2003 *J.*

[18] Andrew S , Clarke , Jonsson H 1991 *Phys. Rev. E* **47** 3935

Mech. Phys. Solids **51** 1171

[19] Rice J R , Tracey D M 1969 *J. Mech. Phys. Solids* **17** 201

Initial dynamic behavior of nano-void growth in single-crystal copper under shock loading along 111 direction*

Deng Xiao-Liang^{1,2)} Zhu Wen-Jun^{1,2)†} He Hong-Liang¹⁾ Wu Deng-Xue²⁾ Jing Fu-Qian^{1,2)}

¹ *Lab for Shock Wave and Detonation Physics Research , Institute of Fluid Physics , CAEP , Mianyang 621900 , China*

² *Department of Physics , Sichuan University , Chengdu 610064 , China*

(Received 22 January 2006 ; revised manuscript received 10 March 2006)

Abstract

Initial stage of nano-void growth in single crystal copper under shock loading along 111 direction has been investigated by using molecular dynamics (MD) simulation. The results show the void growth rate , represented by increase of equivalent radius of void vs time , keeps constant under certain shock strength. Two kinds of dislocation mechanisms of single void growth have been observed. When shock strength is lower than a critical value , dislocations nucleate and move outward only in the area around two vertices of the void along the shock direction and the void only grows along shock direction. When shock strength exceeds the critical value , dislocations nucleate and move outward not just in the above area but also in the equator perpendicular to the shock direction , and the void grows both along the shock direction and its normal. By examining the displacement history of atoms around the void surface , we find that the radial velocities of the vertices along and perpendicular to the shock direction almost keep constant during the tensile process. Based on constant radial velocities of vertices , we have derived a model of void growth which explains the constant void growth rate well.

Keywords : nano-void , molecular dynamics , shock loading , dislocation

PACC : 4630N , 7115Q , 6250 , 6170Q

* Project supported by the NSFC and the China Academy of Engineering Physics (Grant No. 10476027) and by the Science and Technology Fund of China Academy of Engineering Physics (Gran. No.20050105).

† E-mail : wjzhu@caep.ac.cn