

冲击作用下纳米孔洞动力学行为的多尺度 方法模拟研究^{*}

陈 军[†] 徐 云 陈栋泉 孙锦山

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室 北京 100083)

(2008 年 2 月 25 日收到 2008 年 4 月 26 日收到修改稿)

本文利用多尺度方法研究了包含孔洞金属材料在冲击加载条件下的动力学行为. 该多尺度方法结合了分子动力学和有限元方法, 分子动力学方法运用于局部缺陷区域, 而有限元方法运用于整个模型区域, 两种方法之间使用桥尺度函数进行连接. 计算结果既包括了系统宏观的物理信息, 如应变场、应力场、温度场等, 也得到了微观原子的物理信息, 如原子能量和位置坐标等. 结合以上的模拟结果, 发现孔洞的坍塌与材料屈服强度和冲击强度有关, 而孔洞坍塌和坍塌过程中对微喷射原子的压缩过程是形成局部热点的主要原因. 同时也发现孔洞坍塌形成的位错和局部热点可以导致局部绝热剪切带更容易形成.

关键词: 微孔洞, 热点, 冲击加载, 多尺度方法

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

1. 引 言

金属延性材料在高应变率加载下的损伤行为是多年以来人们关心的一个热点问题^[1-10]. 宏观的实验已经发现在高应变率加载下材料的局部可能形成绝热剪切带, 而绝热剪切带是宏观断裂开始的前兆^[1-4]. 形成绝热剪切带的时间尺度在微秒甚至更低的量级. 目前, 对于绝热剪切带的形成机理并没有一个合适的理论可以解释. 基于宏观实验的基础上, Stake 等人^[5,6]提出了一个假设, 认为绝热剪切带是在冲击作用下材料局部过热导致的热软化和塑性硬化失稳的结果. 而材料内部存在的各种微观缺陷, 如微孔洞和裂纹等, 在冲击作用下将不断地成核长大、产生位错、形成材料局部热点等^[11-15]. 微观缺陷在冲击条件下正是材料的各种宏观损伤效应的起源点. 因此, 对于材料损伤机理的研究需要结合宏观性质和微观缺陷, 需要考虑缺陷从微观发展到宏观在时间和空间的多尺度过程. 长期以来, 由于研究方法的局限性, 人们对各种缺陷损伤机理研究主要局限在不同尺度和运用对应的方法进行研究.

在宏观理论研究方面, 依靠连续理论为基础, Rosakis 等人^[1]提出了连续损伤模型. 在宏观数值模拟方法中, 有限元方法是应用最为广泛的宏观模拟方法. 结合连续损伤模型, 人们对损伤行为进行部分数值模拟研究^[16,17]. 但是, 使用有限元方法在材料大变形情况下存在网格扭曲的问题. 同时需要指出的是, 连续损伤模型是基于实验基础上的宏观统计假设, 并没有考虑损伤的微观机理. 在微观理论研究方面, 运用包括介观的质点法 (MPM) 和微观的分子动力学方法, 文献 [11-15] 报道了对孔洞等微观缺陷在冲击加载下的坍塌、位错的形成和生长机理等动力学行为的研究. 如 Zhu 等人^[11]运用分子动力学方法研究了含孔洞的金属 Cu 在冲击加载情况下的位错形成过程; Xu 等人^[12]运用 MPM 研究孔洞的塌缩效应; Holian 等人^[13]运用分子动力学方法研究孔洞引起的热点效应等. 但是局限于研究的空间尺度的限制 (分子动力学方法目前研究尺度仍局限于纳米量级), 人们很难对微观缺陷的进一步发展以及与宏观损伤效应的关系进行深入模拟研究.

近十年来, 随着大型计算机和多尺度研究方法的不断发展, 结合微观和宏观方法模拟材料损伤过

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10774017) 和中国工程物理研究院发展基金 (批准号: 2007B09002) 资助的课题.

[†] E-mail: jun_chen@iapcm.ac.cn

程已经成为可能. 目前得到广泛运用的多尺度研究方法包括结合分子动力学方法和有限元方法的准连续方法(QC)^[18], 桥尺度方法(BSM)^[19, 20], 粗颗粒化分子动力学方法(CGMD)^[21]等. 桥尺度方法由 Liu 等人^[19, 20]提出. 其主要思想是运用桥尺度函数将材料的动力学方程写为宏观尺度和微观尺度两个部分之和. 宏观模型采用连续力学模型, 运用有限元方法求解; 微观模型采用 MD 方法模拟, 而两种尺度物理量的交换通过桥尺度函数进行联系. 该方法已经广泛运用于研究材料的各种动力学行为^[19, 20]. 本文构筑了一个二维纳米孔洞模型, 运用桥尺度技术连接了经典分子动力学方法和有限元方法, 研究了包含孔洞缺陷的金属材料在冲击加载条件下的动力学行为, 对冲击条件下的微孔洞引起位错、热点和绝热剪切带的形成机理展开了讨论.

2. 计算方法和模型

本文使用了分子动力学方法和有限元方法相结合的多尺度方法模拟研究材料的动力学行为. 不同尺度之间采用了 Liu 等人提出的桥尺度函数(bridge scaling)进行连接. 对于分子动力学和有限元方法可见文献 [14, 15], 在本文中不再做叙述. 桥尺度连接方法的主要思想^[19]可以表示如下.

将系统的位移场 u 分为连续尺度 $u_1(x, t)$ 和原子尺度 $u_2(x, t)$ 两部分:

$$u(x, t) = u_1(x, t) + u_2(x, t), \quad (1)$$

对于连续尺度 $u_1(x, t)$, 其计算公式为

$$u_1(x, t) = Nd, \quad (2)$$

式中 d 是 FE 方法的解, N 是系统形状函数.

原子尺度 $u_2(x, t)$ 计算公式为

$$u_2(x, t) = q - Pq, \quad (3)$$

q 是分子动力学的解, 原子尺度对系统位移场的贡献 u_2 是分子动力学的解减去该解在连续尺度的投影. 式中算符 P 被称为桥尺度算符, 其表达式为

$$P = NM^{-1}N^T M_A, \quad (4)$$

其中 M 和 M_A 分别是连续尺度和原子尺度的质量矩阵.

在原子尺度区, 原子的运动方程为

$$M_A \ddot{q} = f(q) + f^{\text{imp}}, \quad (5)$$

上式中 f^{imp} 称为逼近力, 其公式可以表达为

$$f^{\text{imp}}(t) = \int \Theta(t - \tau) (\varphi(q(\tau)) - \bar{u}(\tau)) d\tau, \quad (6)$$

式中 Θ 是与原子相互作用势和系统几何构型有关的记忆核函数(memory kernel function).

在连续尺度区, 有限元的运动方程为

$$M \ddot{d} = N^T f(u). \quad (7)$$

对于孔洞缺陷, 可以通过对二维模型的研究了解三维孔洞的物理图像, 同时使用二维的模型可以节约计算量. 因此, 本文建立了一个二维纳米孔洞模型研究孔洞缺陷在冲击加载条件下的动力学行为. 本文选择了 fcc 结构金属 Al(111)面作为研究对象, 建立了两种研究模型: 1) 完整晶体模型; 2) 孔洞模型, 如图 1 所示. 该模型大小为 $140 \text{ nm} \times 140 \text{ nm}$, 整个模型区域采用了 60×60 个有限元网格. 在模型中心区域包括了一个 MD 模拟区域, 大小为 $14 \text{ nm} \times 14 \text{ nm}$, 该区域由 3600 个 Al 原子构成. 孔洞模型是通过如下方法建立: 以 MD 模型中心为圆心, 以

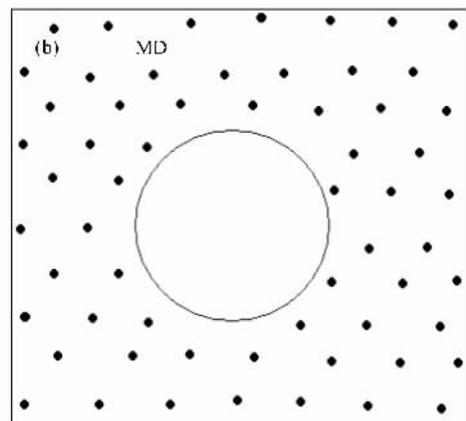
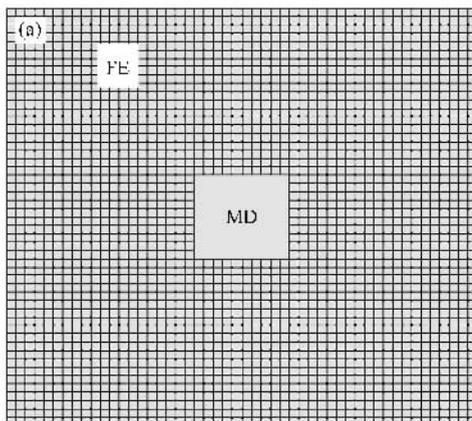


图 1 模型示意图 (a) 有限元模拟区, 中间矩形框表示分子动力学模拟区 (b) 部分分子动力学模拟区示意图, 中间圆心是孔洞位置

直径 6 nm 画一个圆, 去掉圆内所包含的 Al 原子, 形成了一个圆形孔洞. 冲击加载采用了活塞推动模型, 即在模型上表面一层给予一个向下初始速度推动产生冲击波. 本文选择了三种加载速度 0.5, 1.0, 1.5 km/s. 计算方法中分子动力学部分采用了 Lennard-John 势模型, 相关的原子势参数见文献 [22].

3. 计算结果和讨论

首先, 为了验证程序的有效性, 本文模拟了一个完整材料的冲击波加载和传播过程. 图 2 显示了在冲击波通过有限元区域和分子动力学耦合区以及远离耦合区的时刻模型的应变场分布. 如图所示, 激波在通过耦合区时没有反射波出现, 这说明本文的计算程序适合模拟冲击波的传播. 同时, 三种不同的加载速度的波阵面速度 D 和波后粒子速度 u_0 满足如下函数关系式 $D = C_0 + \lambda u_0$, 拟合参数 C_0 (5.46 km/s), λ (1.44) 与实验结果^[23] ($C_0 = 5.25$ km/s, $\lambda = 1.39$) 较好地符合.

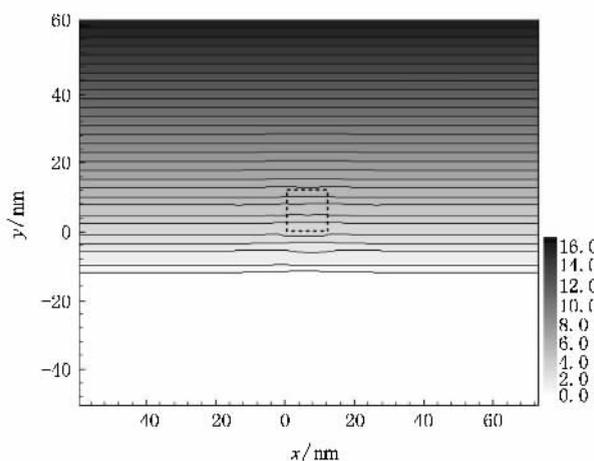


图 2 冲击加载下完整晶体材料在 $t = 40$ ns 时刻应变场分布图, 中间矩形框表示分子动力学模拟区

在不同的加载速度下, 微孔洞显示了不同的动力学行为. 首先分析了低速加载 $v_1 = 0.5$ km/s 的情况. 图 3 是各个时刻模型宏观应变场分布图. 如图所示, 冲击波的传播可以分为 4 个阶段进行描述: 1) 激波在孔洞上部的传播; 2) 激波与孔洞上表面相互作用; 3) 激波穿过孔洞区域; 4) 激波远离孔洞区域. 在第一时间段, 激波在完整晶体中运动, 表现出完整的平面冲击波传播方式, 波阵面传播速度为 $D = 6.09$ km/s, 平均压强为 0.54 GPa, 对比材料的冲击屈

服阈值 (0.48 GPa), 表明材料在此冲击强度下已经表现出部分塑性行为. 在随后的第二个时间段, 冲击波阵面到达孔洞的上表面, 相对于完整材料部分, 孔洞的上表面表现为一个自由界面, 在冲击波作用下开始卸载, 孔洞上表面以比平行的完整晶体区域更大的速度运动, 表现在图 3(b) 中即是在应变场中缺陷所在中心区域有一个深色的尖部, 这说明孔洞上表面材料比平行区域有更大的应变. 随着冲击波在材料的进一步传播, 在 3(c) 中位移场在孔洞区域表现出了一个“M”形状的应变分布; 在第四个阶段, 冲击波已经完全通过了孔洞区域. 如图 3(d) 所示, 由于材料自身的弹性效应, 激波阵面逐步恢复到平面波传播方式, 说明孔洞的影响随冲击波阵面远离孔洞而逐步消失, 这一影响距离从孔洞中心到平面波阵面大约是 20.0 nm. 同时在图 3(d) 中虚线所示的区域出现了一个比周边更小应变区域, 根据分子动力学的分析, 这是由于孔洞导致了位错的形成并进一步导致材料沿位错线的局部滑移.

以上宏观效应, 可以利用微观的原子动力学行为进行对比研究. 从图 3(e)–(h) 是对应宏观应变场各个时刻的原子的位置图. 在图 3(f) 中 ($t = 35$ ns), 激波到达孔洞的上表面, 上表面粒子在稀疏波的作用下进入孔洞区域. 同时, 由于冲击波的强度较弱, 在冲击波通过孔洞区域的图 3(g) 中, 我们发现孔洞仅表现出逐步压缩, 整个孔洞区域并未坍塌. 孔洞的上部仍然保持较好的晶体排列方式, 并未出现大的塑性变形. 随着冲击波的传播, 孔洞边缘的粒子不断压缩, 但在冲击波通过孔洞区域后并没有出现塌缩现象. 在 $t = 40$ ns 时刻 (图 3(g)), 由于孔洞在冲击过程中并没有出现上表面撞击下表面, 使得下表面的粒子速度相对于平行原子存在速度差, 在孔洞平行直径点外端, 粒子向下速度大, 而孔洞圆弧下表面的粒子速度接近于 0, 因此, 在孔洞的平行直径的两端出现了位错的形成和生长. 随着激波的传播, 位错沿 $[111]$ 和 $[-1-1]$ 方向传播. 对应于宏观的应变场图象, 图 3(c) 所示的位移场中“M”形状分布正是以上微观行为的宏观体现. 由于孔洞底部的原子并未得到冲击作用, 孔洞底部在整个模拟时间中表现为位移非常小, 底部的位移量在模拟的时间范围内仅仅 4.0 nm, 相比与平行的完整晶体部分, 它们的位移比是 1/4. 由于微观的位错的出现, 在冲击波通过孔洞区域后, 形成了如图 3(f) 虚圆线所示的局部滑移效应.

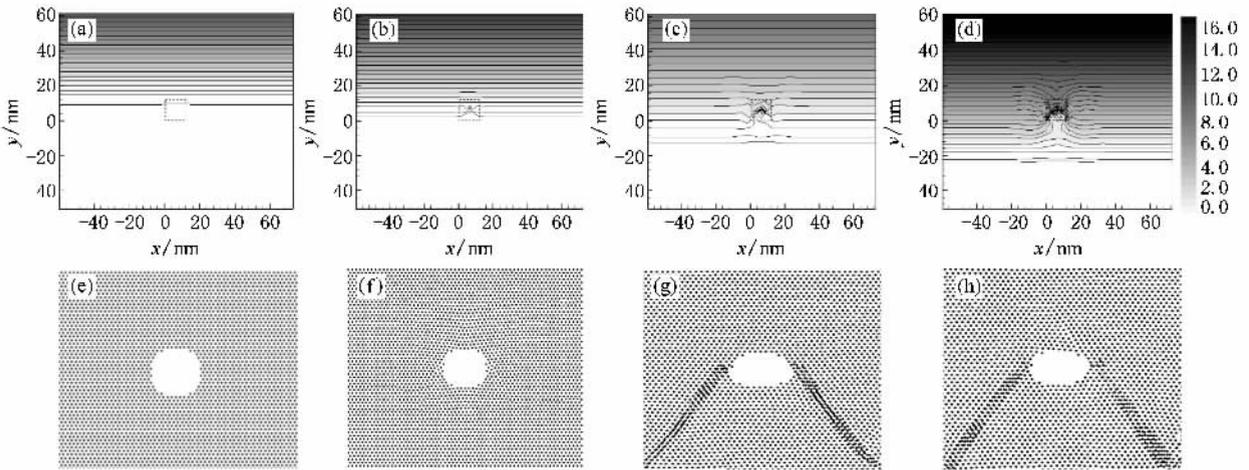


图3 冲击加载速度为 $v = 0.5 \text{ km/s}$ 时模型在不同时刻的应变场和原子图像 (a)–(d)为应变场分布;(e)–(h)为对应时刻的原子图像。(a)和(e)中 $t = 30 \text{ ns}$ (b)和(f)中 $t = 35 \text{ ns}$ (c)和(g)中 $t = 40 \text{ ns}$ (d)和(h)中 $t = 45 \text{ ns}$ (应变场图形中矩形虚框表示分子动力学模拟区)

在不同的冲击加载条件下,孔洞表现出了不同的行为.当加载速度为 $v_2 = 1.0 \text{ km/s}$ 时,本文的模拟结果发现孔洞出现了塌缩效应.图4(a)是 $t = 40 \text{ ns}$ 时刻模型的应变场分布图.对比低速加载,我们发现以 v_2 速度加载时孔洞上表面粒子以更大的稀疏速度进入孔洞区域,应力计算显示孔洞的上部的压强值达到了 1.42 GPa ,该值已经超过了金属 Al 的冲击屈服强度 (0.48 GPa),说明材料在孔洞区域发生了塑性形变.从当前时刻的原子排列(见图4(b))显示了材料的孔洞上表面形成了不可恢复的永久形变,并在激波的进一步发展过程中与下表面碰撞.本文的速度分析发现,在冲击波加载速度大于

1.0 km/s 时,上表面的稀疏速度可以到 1.6 km/s .虽然宏观应变场在冲击波通过缺陷区域以后都表现为相似的“M”形状,但由于在高速加载中存在孔洞坍塌效应,导致材料出现更大面积的塑性变形区,如图4(a)虚圆所示.同时,在冲击波阵面恢复平面波与孔洞中心距离约为 100 nm ,这也远大于低速加载的影响距离.对比以上两种情况,本文认为,在低速冲击加载条件下孔洞没有坍塌而仅仅出现压缩效应,在高速冲击加载条件下($v_2 = 1.0 \text{ km/s}$),从冲击波到达孔洞顶部开始,粒子的应力值已经达到破坏域值的3倍以上,孔洞出现坍塌效应.从以上的模拟可以发现,孔洞的塌缩取决于材料的屈服强度和加载

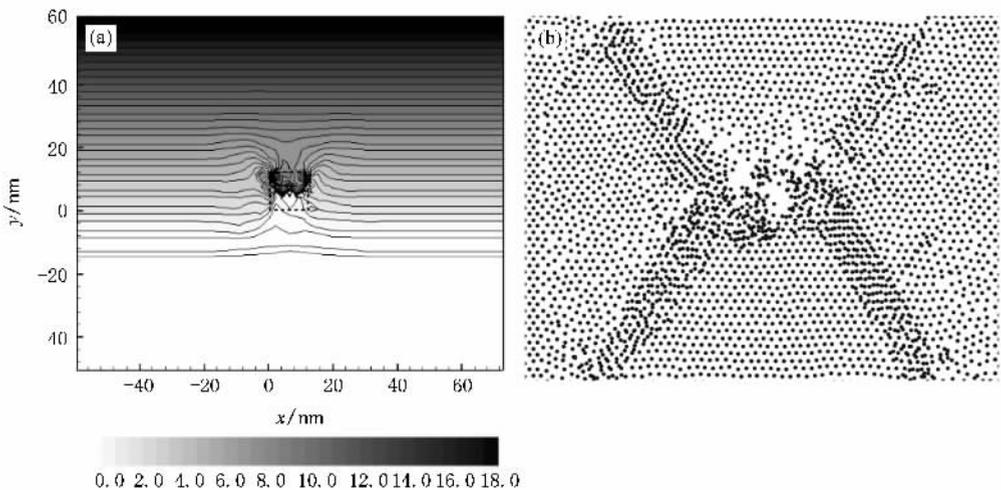


图4 冲击加载速度为 $v = 1.0 \text{ km/s}$ 时模型在 $t = 40 \text{ ns}$ 时刻的应变场和原子图像 (a)应变场分布 (b)原子图像

强度.

相比于低速加载,在高速加载作用下,材料出现了大面积的塑性形变区.为了深入理解激波与材料热点形成的机理,我们也可以通过微观的原子行为分析塑性形变.从图 4(b)所示的 $t = 40$ ns 时刻原子的位置图可知,在上表面撞击下表面以后,材料不但形成了位错团,同时也可以清楚观测到晶体的晶相有不同的取相,说明在高速加载条件下材料可以出现再结晶行为.这一效应与实验观测的高应变率加载下材料局部的绝热剪切带的形成和再结晶行为是一致的.在下面的局部热点形成中,我们也将讨论到在孔洞坍塌中局部高温可以超过金属 Al 的熔化温度.因此,再结晶行为是局部的高温和塑性行为的共同效应.同时,在冲击波通过孔洞以后,大量的沿 $[111]$ 、 $[-1, -1]$ 、 $[-11]$ 和 $[1 - 1]$ 方向的位错线产生并聚集形成了位错团,体现在宏观的应变场中,表现为图 4(a)虚线表示的达到 100 nm 半径的局部低应变区.

在冲击作用下微孔洞形成的局部热点是人们关心的一个问题,对这一问题的研究将对理解材料绝热剪切带形成机理有重要意义.本文使用了原子平均动能与温度的关系求解了模型局部的温度分布.图 5 显示了不同加载速度下局部热点的温度分布,

当加载速度为 0.5 km/s 时,孔洞中心位置的温度比周围的温度高大约 200 K.而在冲击加载速度为 1.0 km/s 时,孔洞中心温度达到了 2100 K,同时形成了一个梯度的分布形式向周围逐步降低.随着冲击速度增加到 1.5 km/s,孔洞中心的温度差也进一步提高到 3400 K.对于这一效应的物理机理已经有了不同的解释,如 Holian 等人^[13]提出的孔洞原子表面汽化效应,Dear 等人^[24]提出的碰撞效应等.本文结果部分支持了 Holian 孔洞原子表面汽化模型,但是,我们认为进入孔洞的原子是由于高速加载下孔洞表面的微喷射原子,这在文献[15]中已得到证实.如图所示,当上表面没有撞击下表面时,孔洞中心与周围温度的差较小,这可以认为是表面粒子的卸载造成粒子高速度运动形成了局部塑性形变,但并没有形成局部高温热点.而在高速加载条件下,我们的计算温度显示在材料孔洞所在的局部区域温度已大于材料的熔化温度.可以认为,在冲击作用下,材料的孔洞区域不但形成了局部的塑性形变,同时,结合 Holian 等人的孔洞原子表面汽化模型,孔洞的坍塌也导致了孔洞表面喷射原子受到了一个高温压缩的过程,以上两个过程共同作用导致了局部高温点的形成.本文的模拟说明微孔洞的坍塌和进一步的压缩过程是形成局部热点的一个重要原因.

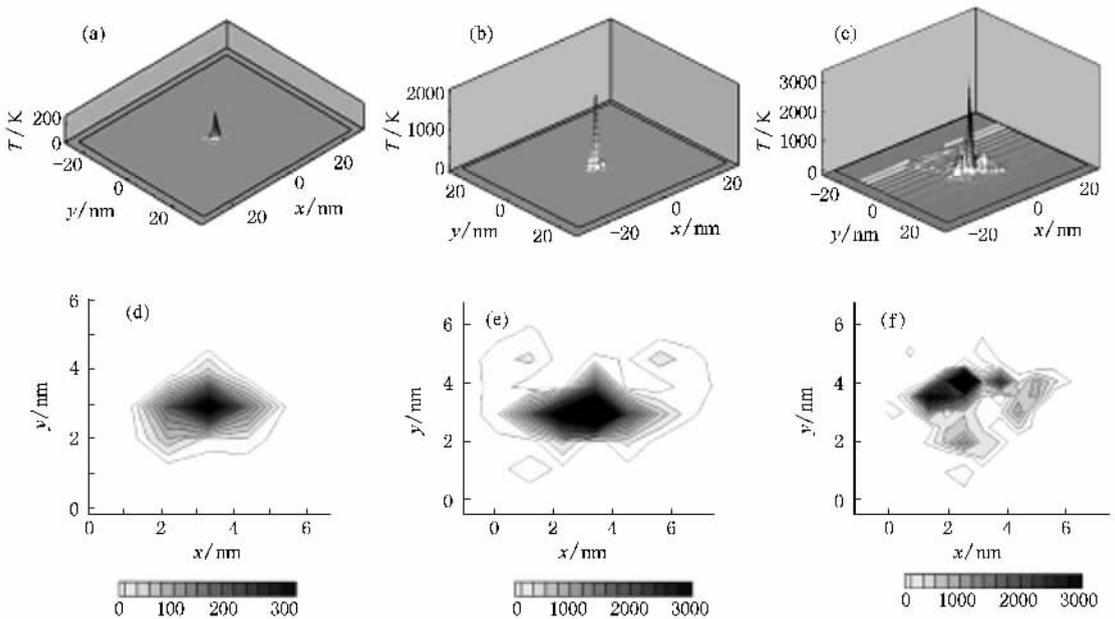


图 5 不同冲击加载速度下材料的局部温度场分布图;(a)–(c)为宏观的三维温度场分布;(d)–(f)为对应的二维温度场等高线分布图;(a)(d)中 $v = 0.5$ km/s;(b)(e)中 $v = 1.0$ km/s;(c)(f)中 $v = 1.5$ km/s

结合以上模拟结果,我们可以讨论在冲击加载

条件下材料绝热剪切带的形成机理.基于宏观实验

的基础上,Stake 等人提出了一个假设认为绝热剪切带是在冲击作用下材料局部过热导致的热软化和塑性硬化失稳的结果^[6,7],但并没有文献从微观原子的角度研究该问题.从我们的几种加载条件来看,在冲击加载速度为 1.0 km/s 时,模型的平均应力已经大于材料的屈服强度,材料表现为部分塑性行为,并在孔洞局部区域形成了高温热点.正是由于在孔洞区域形成了局部的高温导致了在孔洞周围的材料热软化和塑性硬化的失稳.而冲击加载在孔洞产生的位错等缺陷,其在冲击作用下进一步发展使得绝热剪切带更容易形成.绝热剪切带的形成可能还包括更多的机理,但从本文结果可以得到一个有意义的结论:材料内部存在的孔洞等微观缺陷在冲击加载条件下形成的局部位错和热点导致了绝热剪切带在缺陷区域更容易形成.

4. 结 论

本文使用了多尺度方法研究了冲击加载条件下孔洞对材料的冲击波传播的影响.结果表明,孔洞对激波运动的影响与加载速度相关,加载速度越大,影响范围越大.同时,孔洞的坍塌与材料的屈服强度和冲击加载速度相关.在低速加载条件下,冲击加载将导致在孔洞区域产生位错,在宏观应变场中表现为滑移效应;而高速加载下将形成大面积的塑性形变区和位错团.同时,热点的形成分析表明,孔洞坍塌是局部热点形成的重要条件.而由于孔洞造成的塑性区、局部热点和位错等缺陷将使宏观绝热剪切带更容易产生.

- [1] Rosakis A J , Rovichandran G 2000 *Int. J. Solids & Struct.* **37** 331
- [2] Xu Y B , Bai Y L 2007 *Advances in Mechanics* **37** 496 (in Chinese)
[徐永波、白以龙 2007 力学进展 **37** 496]
- [3] Voyiadjis G Z , Palazotto A N , Gao X L 2002 *Appl. Mech. Rev.* **55** 481
- [4] Da L H , Yan M , Liu L F , Bai Y L 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 141916
- [5] Stake M R 1980 *Scripta. Metall.* **14** 677
- [6] Clifton R J 2000 *Int. J. Solids Struct.* **37** 105
- [7] Meyers M A , Xu B Y , Xue Q *et al* 2003 *Acta Materialia* **51** 1307
- [8] Needleman N , Tvergaard V 1992 *Appl. Mech. Rev.* **45** S3
- [9] Xu B Y , Bai Y L , Meyers M A 2006 *J. Mater. Sci. Tech.* **22** 737
- [10] Johnson J N , Addressio F L 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6699
- [11] Zhu W J , Song Z F , Deng X L , He H L , Cheng X Y 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024104
- [12] Xu A G , Pan X F , Zhang G C , Zhu J S 2007 *J. Phys. C* **19** 326212
- [13] Holian B L , Germann T C , Maillet J B , White C T 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 285501
- [14] Deng X L , Zhu W J , He H L , Wu D X , Jing F Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4767 (in Chinese) [邓小良、祝文军、贺红亮、伍登学、经福谦 2006 物理学报 **55** 4767]
- [15] 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 **51** 2386]
- [16] Zienkiewicz O C , Taylor R L 1991 *The Finite Element Method* (London : McGraw-Hill) p122
- [17] Belytschko T , Liu W K , Moran B 2000 *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures* (New York : John Wiley & Sons) p232
- [18] Curtin W A , Miller R E 2003 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **11** R33
- [19] Liu W K 2004 *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193** 1573
- [20] Liu W K , Jun S , Sihling D T , Chen Y , Hao W 1999 *Int. J. Numer. Methods Fluids* **24** 1391
- [21] Rudd R E , Broughton J Q , 1998 *Phys. Rev. B* **58** R5893
- [22] Honeycutt J D , Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [23] Jing F Q 1999 *Interoduction to Experimental Equation of States* (Beijing : Science Press) p145 (in Chinese) [经福谦 1999 实验物态方程导引 (北京 科学出版社) 第 145 页]
- [24] Dear J P , Field J E , Walton A J 1988 *Nature* (London) **332** 505

Multi-scale simulation of the dynamic behaviors of nano-void in shocked material^{*}

Chen Jun[†] Xu Yun Chen Dong-Quan Sun Jin-Shan

(*Laboratory of Computational Physics ,Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100083 , China*)

(Received 25 February 2008 ; revised manuscript received 26 April 2008)

Abstract

In this paper , the multi-scale numerical simulation method was used to simulate the dynamic behaviors of nano-void in metal Al under shock loading. This method couples the molecular dynamics method used in local defect domain and the finite element method used globally by using a bridge-scale function. Based on the calculated strain field and temperature field and atom positions , we reveal that the collapse of nano-void depends on the yield strength of materials and shock loading strength. And compression process of void is the main reason of formation of local hot spot. Meanwhile , the dislocation and hot spot induced by void collapse lead to the easy formation of the local adiabatic shear band.

Keywords : micro-void , hot spot , shock loading , multi-scale method

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

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774017) and the Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No.2007B09002).

[†] E-mail : jun_chen@iapcm.ac.cn