

# 冲击加载下铝中氦泡和孔洞的塑性变形特征研究\*

王海燕<sup>1)2)3)</sup> 祝文军<sup>1)3)</sup> 邓小良<sup>1)</sup> 宋振飞<sup>1)</sup> 陈向荣<sup>3)</sup>

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) 河南理工大学材料科学与工程学院, 焦作 454000)

3) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2008 年 5 月 5 日收到, 2008 年 7 月 17 日收到修改稿)

通过分子动力学模拟研究了在相同冲击加载强度下单晶铝中氦泡和孔洞的塑性变形特征, 结果发现氦泡和孔洞的塌缩是由发射剪切型位错环引起的, 而没有观测到棱锥型位错环发射. 氦泡和孔洞周围的位错优先成核位置基本一致, 但是氦泡周围发射的位错环数目比孔洞多, 位错环发射速度明显比孔洞快. 且氦泡和孔洞被冲击波先扫过部分比后扫过部分发射位错困难. 通过滑移面上的分解应力分析发现, 氦泡和孔洞周围塑性特征的差别是由于氦泡内压引起最大分解应力分布改变造成的. 氦泡和孔洞被冲击波先后扫过部分塑性不对称是因为冲击波扫过时引起形状变化, 使这两部分位错临界成核应力阈值不同造成的. 研究结果有助于深入认识辐照损伤对金属材料动态性能影响的微观机理.

关键词: 分子动力学, 冲击波, 氦泡, 孔洞

PACC: 6170G, 7115Q, 6250, 6170Q

## 1. 引言

氦泡和孔洞是高能粒子长时间辐照金属材料后产生的典型缺陷, 这些缺陷的存在改变了金属材料的微观结构, 引起金属材料物理性质的明显变化, 从而影响金属在辐照环境下的使用寿命和性能. 氦泡和孔洞的存在对金属材料静态力学性质的影响主要表现在, 使金属材料出现典型的辐照硬化效应, 即延展性降低, 脆性增加<sup>[1]</sup>. 通过微观显微分析发现, 氦泡对位错环的长大以及线位错的演化产生较强的抑制作用是造成金属材料辐照硬化效应的微观机制<sup>[2]</sup>. 氦泡和孔洞对金属材料在冲击加载下动态性质影响的研究开展比较晚. 尽管如此, 已经发现氦泡与孔洞的存在对金属材料的宏观动态力学性质有显著影响.

Reisman 等<sup>[3]</sup>在对辐照损伤铁的冲击压缩实验中发现孔洞的占空比会影响冲击波阵面的速度. Kubota 等<sup>[4]</sup>利用分子动力学研究发现氦泡和孔洞会改变材料的冲击雨贡纽曲线(Hugoniot curve)和临界

剪切强度. 但是对于其影响的微观机制还缺少研究. 要了解它们对金属材料动态力学性质影响的微观机制, 就需要了解它们在动态加载下演化的微观过程. 由于目前实验测量技术的限制, 还无法直接观察动态过程中微观缺陷演化的图像, 只能通过对冲击加载实验后的软回收样品进行显微分析. 但是软回收后的样品分析只能获得终态结构<sup>[5,6]</sup>, 由于存在应力波的多次反射等复杂因素影响, 很难反演出微观结构的变化过程. 另外, 在氦泡的形成过程中, 同时伴随着多种缺陷的产生, 例如孔洞、位错等, 这些缺陷以及基体材料中本身含有的杂质都有可能引起材料动态特性的改变. 因此, 从宏观性质中区分出单一缺陷因素的影响比较困难.

分子动力学方法可以从微观尺度研究体系的动态演化过程, 并方便地处理单一缺陷, 自然成为研究这类问题的有力工具. 近年来, 利用分子动力学模拟冲击加载下孔洞塌缩变形的研究表明<sup>[7-12]</sup>, 孔洞的塌缩变形与位错成核及长大紧密相关, 延性金属中孔洞的塌缩是由发射剪切型位错引起的<sup>[11]</sup>, 而没有观测到 Reisman 等<sup>[3]</sup>认为的棱柱型位错发射. 另

\* 冲击波物理与爆轰物理重点实验室基金(批准号: 9140C67010106ZS75)、中国工程物理研究院科学技术发展基金重点项目(批准号: 2007A01004)和国家自然科学基金(批准号: 60436010)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

外,还发现位错发射所对应的临界剪切应力与孔洞的大小有关<sup>[13]</sup>.而对于氦泡来讲,它的内压可以达到几个 GPa,与孔洞明显不同.在冲击加载下氦泡是如何变形以及其变形特征与孔洞有何区别,目前还缺少研究.

本文利用分子动力学方法模拟了冲击加载下单晶铝中氦泡和孔洞塌缩过程中塑性变形的过程,通过微观结构和应力分析比较,研究了氦泡和孔洞周围位错成核和发射的机制,获得了氦压对氦泡塌缩影响的微观机理认识.

## 2. 模拟方法

在含氦泡的铝体系,存在着三种相互作用势,即 Al-Al, He-He 和 Al-He. 对于 Al-Al 之间的相互作用势,采用 Mishin 等<sup>[14]</sup>的原子嵌入势(EAM)函数描述铝原子之间的相互作用,因为它不仅能准确地拟合单晶铝的弹性性质、结合能、缺陷结合能等参数,而且还很好地拟合了铝在高压下的状态方程,能够比较准确地描述铝原子之间的相互作用. He-He 的相互作用采用对势<sup>[15]</sup>来描述,为了使计算结果和实验结果更好地符合,适当地修改了拟合参数的值( $a = 13.1$ ,  $\epsilon = 12.4$  ( $k$  为波尔兹曼常数),  $r^* = 3.25 \times 10^{-8}$  cm). 对于 Al-He 之间的相互作用势,采用对势 $\phi(r) = -\alpha[1 + \beta(r/r_a - 1)]\exp[-\beta(r/r_a - 1)]$ 形式来描述. 由于缺少实验数据来拟合上述 Al-He 相互作用势参数,我们通过建立虚拟的 Al-He 立方晶体结构,利用第一性原理方法计算该结构的总能,拟合得到势参数  $\alpha$ ,  $\beta$  和  $r_a$  的值分别是 0.0024, 0.70 和 0.57, 详见文献[16].

运用预测校正算法迭代求解经典牛顿运动方程<sup>[17]</sup>, 时间步长为  $1 \times 10^{-15}$  s. 模拟体系的  $x$ ,  $y$  和  $z$  轴分别对应于 [100], [010] 和 [001] 晶向,  $x$  方向为冲击加载方向,采用自由边界条件,  $y$ ,  $z$  方向分别采用周期性边界条件,以实现冲击波压缩下的一维应变条件. 铝样品的尺寸是  $36 \text{ nm} \times 24 \text{ nm} \times 24 \text{ nm}$ ,  $x$  方向平行于  $36 \text{ nm}$  长边,共包含 1296000 个原子,在样品的中心预置一个直径为  $3.0 \text{ nm}$  的孔洞(挖去 887 个铝原子形成的). 在孔洞中填入一定数量的氦原子(氦原子的个数与空位数的比近似为 15%),经过 5 ps 的弛豫,即在体系中形成了一个稳定的氦泡,氦压为 0.5 GPa. 在分子动力学模拟中有多种方法产生冲击波<sup>[18]</sup>,我们采用一种活塞推动的方法,

即固定样品一边开始的两层(100)面原子作为活塞,在  $x$  方向以恒定速度推动活塞在样品中产生冲击波,活塞速度即为冲击波阵面后的粒子速度.

## 3. 结果及讨论

为了比较氦泡和孔洞在冲击加载下的塑性变形特征,我们对含氦泡和孔洞的样品施加同样的冲击加载强度. 通过由低到高逐渐改变活塞速度而逐渐增加冲击加载强度,直到氦泡和孔洞都出现塌缩. 当活塞速度设为 600 m/s 时,冲击强度约为 12 GPa,氦泡和孔洞都开始塌缩.

在氦泡和孔洞的塌缩过程中,都伴随着位错在氦泡和孔洞周围区域的成核和运动,即发生塑性变形. 面心立方结构(fcc)晶体中全位错通常分解为不全位错运动,而不全位错扫过的区域将经历从 fcc 到六角密堆结构(hcp)结构的转变. 在 fcc 晶体中,  $1/6 \langle 211 \rangle \{111\}$  不全位错是最容易发生的,并且一旦产生则沿着  $\{111\}$  面向前运动,就会在其后形成堆垛层错<sup>[19]</sup>. 运用键对分析技术<sup>[20]</sup>能够识别模型内部原子所处的三种结构:即 fcc, hcp 和无序结构(非 fcc 和 hcp 结构). 孔洞和氦泡周围的原子处于无序结构. 因此通过保留模型中属于 hcp 结构的原子,可以获得孔洞和氦泡周围的塑性变形区域. 保留模型中属于无序结构的原子,可以获得孔洞和氦泡的外形轮廓. 图 1 是采用上述方法去掉 fcc 结构原子后得到的原子快照图. 从图 1(a)可以看出,当冲击波扫过孔洞后,在与冲击加载方向垂直的赤道附近首先观察到位错成核,然后位错均沿四个等效的  $\{111\}$  面,即  $\{111\}$ ,  $\{1\bar{1}1\}$ ,  $\{\bar{1}11\}$ ,  $\{\bar{1}\bar{1}1\}$  晶面,向外发射剪切型  $1/6 \langle 211 \rangle \{111\}$  不全位错环. 位错环在向外扩展过程中,侧面互相接触,形成 Stair-rod 位错锁,阻止位错向侧面进一步发展,使周围区域逐渐硬化. 孔洞周围发射的位错环空间特征与 Davila 等<sup>[11]</sup>, Zhu 等<sup>[21]</sup>和罗晋等<sup>[22]</sup>在单晶铜中模拟的结果一致,并没有发现棱柱型位错环<sup>[3]</sup>的出现. 从图 1(b)可以看出,在氦泡塌缩过程中,部分氦原子混入氦泡表面附近的铝原子中,但是并没有观察到氦原子沿着位错扩散到基体材料内部. 位错优先成核的位置以及发射出的位错空间特征与孔洞类似.

但是,在氦泡和孔洞的左面(冲击加载一侧),塑性特征相差较大. 在图 1(a)中,我们发现位错的成核长大仅沿着孔洞的右半部分,左半部分没有位错

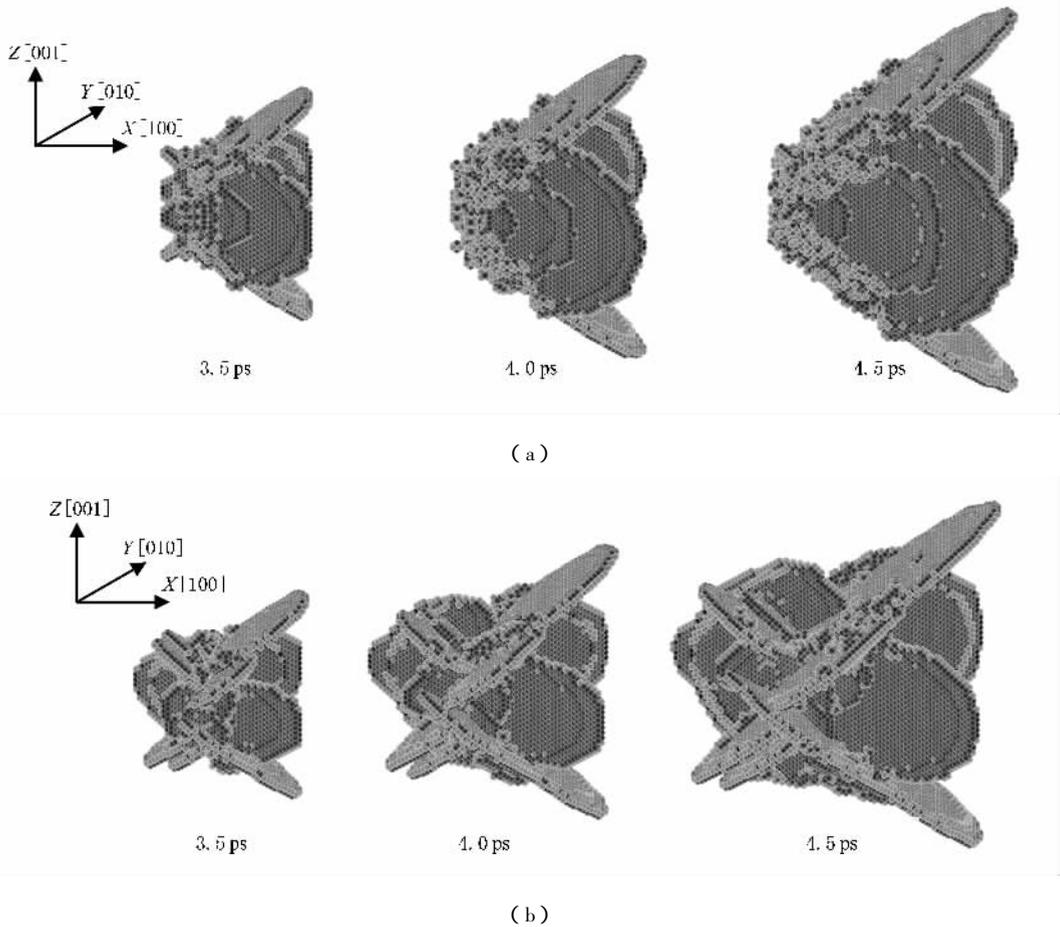


图 1 12 GPa 冲击波压缩应力下不同时刻孔洞 (a) 和氦泡 (b) 周围的塑性变形特征图 图中示出的是结构发生变化的原子, 具有 fcc 结构的原子没有给出

出现,而在图 1(b)中,在氦泡的左右两部分均发现有位错发射.为什么在同样的加载强度下,氦泡和孔洞塌缩时塑性特征表现出明显差异?Zhu 等<sup>[21]</sup>对冲击加载下孔洞增长的研究发现,位错成核与发射的难易与沿滑移面的分解剪切应力分布有关.Lubarda 等<sup>[13]</sup>和 Song 等<sup>[23]</sup>的研究都发现位错成核所需的临界剪切应力与孔洞的大小有关,随着孔洞半径的增大,临界剪切应力减小.

据此,我们认为氦泡和孔洞塌缩时出现塑性特征差异的现象可能存在着两个原因:一方面,在冲击波从左到右的传播过程中,波阵面首先到达孔洞和氦泡的左半部分.孔洞的左半面是一自由面,这时自由面会反射一稀疏波,那么稀疏波就会降低冲击波的强度,使孔洞的左半部分分解的剪切应力减小,有可能使得滑移面上的最大剪切应力小于位错发射所需要的临界剪切应力,那么就不会有位错发射.在同样的加载强度下,由于氦泡内具有较强的压力,对冲击波的衰减作用不如孔洞的自由面,使得

氦泡附近的滑移面分解剪切应力比孔洞相应位置大,使得氦泡的左半部分更容易发射位错.另一方面,如文献[8]中证明的冲击波引起的孔洞塌缩并不是像气球那样均匀塌缩.冲击波首先到达孔洞的左半部分,在冲击压力的作用下,左半部分先开始塌缩,使其曲率增加,那么对应的位错发射所需要的临界剪切应力增加.而右半部分因为冲击波绕过孔洞后加载,塌缩不如左面的程度,发射位错所需要的临界剪切应力要比左面小.因此右半部分比左半部分更容易发射位错.而对于氦泡来说,由于内压的存在,在一定程度上阻碍氦泡的塌缩,氦泡左右部分曲率的差异相对于孔洞来说比较小,所以氦泡的左半部分比孔洞的左半部分容易发射位错,但从图 1(b)可以看出,左半部分位错发射仍然比右半部分困难.

继续增加冲击波的强度,可以观察到孔洞的左右两部分均出现了位错成核和发射,左右两部分的塑性特征没有明显差别.这说明在更大的冲击加载条件下,分解剪切应力均超过了孔洞左右两部分位

错成核所需要的临界应力,左右两部分均有位错产生.不过,相同时间内,氦泡周围的位错运动仍明显比孔洞快.

下面从应力分析定量解释氦泡和孔洞周围的塑性特征及其差异.

### 3.1. 原子应力计算分析

位错的成核和发射与沿滑移面的分解剪切应力直接相关,因此分析孔洞和氦泡周围的分解剪切应力分布对于我们理解位错的成核和发射至关重要.根据原子的位置和相互作用力,从维里定理(Virial theorem)<sup>[24]</sup>可以计算出原子应力,通过分解可以得到沿滑移面的剪切应力.直接对冲击加载瞬态过程进行原子应力分析,由于冲击压缩过程引起局域温升,原子随机振动加剧,导致难以分析冲击加载下一维应变造成的应力分布.为了去除温升的影响,直接给体系施加一个一维压应变,然后利用最速下降

法进行迟豫使得体系能量最小化.

当施加的压应变为 0.08 时,孔洞周围出现塑性变形.图 2(a)是通过键对分析技术,除去 fcc 结构原子后,孔洞周围区域的塑性变形特征图(为了更清楚地说明问题,仅给出了孔洞周围四组等效位错中的一组滑移面),小球颜色不同表示结构不同.可以看出,与冲击加载时一样在孔洞的相同位置位错首先成核,然后向外发射.说明一维应变引起的应力分布是位错成核和发射的原因.在位错成核的临界时刻根据维里定理计算得到在滑移面上沿滑移方向的分解剪切应力.图 2(b)是通过空洞中心垂直于滑移面的切面上的原子的分解剪切应力分布图,小球的颜色由浅到深表示分解剪切应力从小到大,圆圈表示位错成核的实际位置,由此我们看到最大剪切应力位置与位错成核的实际位置一致.氦泡的最大剪切应力位置与孔洞一样.

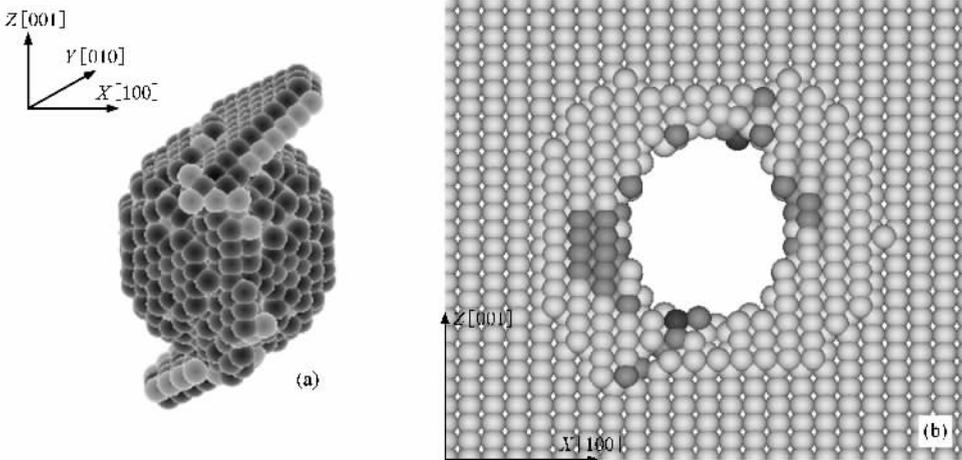


图 2 静态加载下孔洞周围区域的塑性变形特征图(a)和原子剪切应力分布图(b)

### 3.2. 弹性应力模型分析

原子应力计算虽然能够得到每个原子所处区域的应力情况,可以分辨出最大分解剪切应力的位置,但是由于原子的不连续分布及孔洞或氦泡周围原子无序结构,难以获得周围原子的应力分布规律.在孔洞或氦泡发射位错前,都是弹性变形,可以用弹性模型分析应力.只对一族 $\{111\}$ 滑移面上的剪切应力进行分析,这样可以将三维问题简化为如图 3 所示的二维问题.氦泡与孔洞的差别是氦泡具有内压,而孔洞的内压为 0.因此,后面针对氦泡建立模型,孔洞只是内压为 0 的特例.忽略惯性效应的影

响,在一维应变条件下,对一氦泡施加一沿  $x$  轴方向的静态远场压力的作用,由于泊松效应在  $y$  轴方向也会同时产生压力,泡内的压强为  $P$ .泡表面的应力分布可以解析表示为: $\sigma_R = -P$ , $\tau_{R\theta} = 0$ 和 $\sigma_\theta = T_x(1 - 2\cos 2\theta) + P$ , $T_x$ 是  $x$  轴方向远场压应力<sup>[25]</sup>.考虑到冲击加载的一维应变条件,垂直于加载方向的压应力满足 $T_y = kT_x$ , $k$ 是二轴加载比,因此在泡表面沿  $\theta$  方向的应力分量为

$$\sigma_\theta = T_x(2k - 1)\cos 2\theta + (1 + k)P. \quad (1)$$

位错的成核与发射仅与滑移面上沿滑移方向的分解剪切应力有关,我们定义滑移面与加载方向的夹角为  $\alpha$ ,那么氦泡表面沿滑移方向的分解剪切应力为

$$\tau_\alpha = \frac{1}{2} T_x [2k - 1] \cos 2\theta + (1 + k) \times \sin 2(\alpha - \theta) + \sin 2(\alpha - \theta) \cdot P. \quad (2)$$

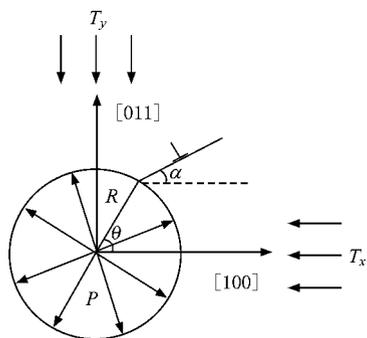


图 3 一氦泡受到远场应力  $T_x$  作用的示意图 氦泡半径为  $R$  , 内压为  $P$  , 滑移面与加载方向的夹角为  $\alpha$  , 位错成核位置与加载方向的夹角为  $\theta$

空洞多.

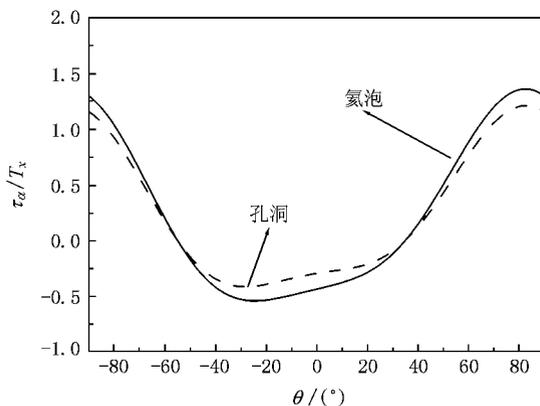


图 4  $\tau_\alpha / T_x$  随  $\theta$  的变化关系 连续的和不连续的线分别表示氦泡和空洞

$\tau_\alpha / T_x$  随  $\theta$  的变化关系如图 4 所示. 当冲击方向为  $[100]$  时,  $\{111\}$  滑移面与加载方向的夹角  $\alpha = 35.2^\circ$ . 根据单晶铝在常压下的弹性常数<sup>[26]</sup>,  $c_{11} = 114 \text{ GPa}$ ,  $c_{12} = 61.9 \text{ GPa}$  和  $c_{44} = 31.6 \text{ GPa}$ , 可以计算出在一维应变条件下二轴加载比  $k = \frac{c_{12}}{c_{11}} \approx 0.53$ , 冲击压力约为  $12 \text{ GPa}$ . 模拟计算中氦泡的内压约为  $0.5 \text{ GPa}$ . 由此可以得到无论模拟体系中心是空洞还是氦泡,  $\tau_\alpha$  的最大值均出现在  $\theta \approx 83.1^\circ$  处, 但是由于氦泡内压的作用, 氦泡对应的  $\tau_\alpha$  的最大值大于空洞对应的  $\tau_\alpha$  的最大值. 因此在同样的加载强度下, 氦泡表面更容易发射位错. 从(2)式还可以推出, 氦压增加不仅提高洞边的分解剪切应力, 使位错更容易发射, 而且还能降低  $\theta$  的值, 即改变最大剪应力位置. 在本文中, 由于氦泡的内压比较小, 氦泡和空洞周围最大剪应力位置并没有差别, 因此位错优先成核位置一致, 优先成核处发射的位错因为驱动力大, 移动也最快. 因为氦压造成相同位置处, 分解应力偏大, 因此在氦泡周围发射的位错面积和数目都比

### 4. 结 论

本文通过分子动力学模拟比较研究了相同冲击加载强度下单晶铝中氦泡和空洞的塑性变形特点. 研究表明, 氦泡和空洞在冲击加载下的塌缩是以发射剪切型位错环为机制, 而不是棱柱型位错环. 由于冲击加载时造成冲击波先扫过部分和后扫过部分的形貌差异, 使对应部分的位错成核临界应力不同, 会导致氦泡和空洞对应部分的位错发射难易程度出现差异. 氦泡周围位错优先成核位置与空洞相同, 但是氦泡周围发射位错比空洞容易. 通过滑移面剪切应力计算和弹性力学模型分析, 发现原因是氦泡压力会增加洞周围的剪切应力大小, 也会改变洞周围的最大剪切应力位置, 但在本文所模拟的氦泡压力比较低, 没有改变最大剪切应力位置. 研究结果有助于深入认识辐照损伤对金属材料动态响应性质影响的微观机理.

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.

[1] Wan F R 1993 *Irradiation Damage of Metal* (Beijing: Science Press) p137 (in Chinese) [万发荣 1993 金属材料的辐射损伤 (北京: 科学出版社) 第 137 页]  
 [2] Lee E H, Humm J D, Byun Mansur L K 2000 *J. Nucl. Mater.* **18** 280

[3] Reisman D B, Wolfer W G, Elsholz A, Furnish M D 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 8952  
 [4] Kubota A, Reisman D B, Wolfer W G 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 241924  
 [5] Koller D D, Hixson R S, Gray G T, Rigg P A, Addressio L B,

- Cerreta E K, Maestas J D, Yablinsky C A 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 103518
- [ 6 ] Chen X, Asay J R, Dwivedi S K, Field D P 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 023528
- [ 7 ] Belak J 1998 *J. Comput. Aided Mater. Des.* **5** 193
- [ 8 ] Mintmire J W, Robertson D H, White C T 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14859
- [ 9 ] Seppala E T, Belak J, Rudd R E 2004 *Phys. Rev. B* **69** 134101
- [ 10 ] Strachan A, Cagin T, Goddard W A 2001 *Phys. Rev. B* **63** 060103
- [ 11 ] Davila L P, Erhart P, Meyers M A, Lubarda V A, Schneider M S, Recker R, Kumar M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 161902
- [ 12 ] Hatano T 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 015503
- [ 13 ] Lubarda V A, Schneider M S, Kalantar D H, Remington B A, Meyers M A 2004 *Acta Mater.* **52** 1397
- [ 14 ] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J, Papconstantopoulos D A 1999 *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **538** 535
- [ 15 ] Young D A, McMahan A K, Ross M 1981 *Phys. Rev. B* **24** 5119
- [ 16 ] Wang H Y, Zhu W J, Song Z F, Liu S J, Chen X R, He H L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3703 ( in Chinese ) [ 王海燕、祝文军、宋振飞、刘绍军、陈向荣、贺红亮 2008 物理学报 **57** 3703 ]
- [ 17 ] Allen M P, Tildesley D J 1990 *Computer Simulation of Liquids* ( Oxford : Oxford University Press ) p341
- [ 18 ] Holian B L, Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 2085
- [ 19 ] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of Dislocations* ( New York : Wiley ) p306—320
- [ 20 ] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [ 21 ] Zhu W J, Song Z F, Deng X L, He H L, Cheng X Y 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024104
- [ 22 ] 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 ]
- [ 23 ] Song Z F, Zhu W J, Deng X L, He H L 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 3041
- [ 24 ] Allen M P, Tildesley D J 1989 *Computer Simulations of Liquids* ( Oxford : Oxford University Press ) p234
- [ 25 ] Sadd M H 2005 *Elasticity : Theory , Applications and Numerics* ( Oxford : Elsevier Inc. ) p163
- [ 26 ] Mishin Y, Farkas D, Mehl M 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393

# Plastic deformation of helium bubble and void in aluminum under shock loading<sup>\*</sup>

Wang Hai-Yan<sup>1,2,3)</sup> Zhu Wen-Jun<sup>1,2)†</sup> Deng Xiao-Liang<sup>1)</sup> Song Zhen-Fei<sup>1)</sup> Chen Xiang-Rong<sup>3)</sup>

1) *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, Mianyang 621900, China*

2) *College of Materials Science and Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China*

3) *College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China*

( Received 5 May 2008 ; revised manuscript received 17 July 2008 )

## Abstract

The characteristic of microscopic plasticity associated with collapse of helium bubble and void in single-crystal aluminum under the same shock loading strength has been investigated by molecular dynamics ( MD ) simulations. The results show that both the helium bubble and the void collapse through the emission of shear dislocation loops, while prismatic dislocation loops are never observed in the simulations. The preferential dislocation nucleation sites are similar for the helium bubbles and the voids, but the number of dislocations emitted from the helium bubble outnumbers that from the voids, and the dislocation loops emitted from the helium bubbles move faster than that from the voids. Meanwhile, it is more difficult to emit dislocation loops from the leading side ( the side which the shock hits first ) of both the helium bubbles and the voids than from the trailing side. By analysing the resolved shear stress along the slip plane, we found that the internal pressure of the helium bubbles increase the resolved shear stress and make the dislocation emission from the helium bubbles much easier than from the voids. The curvature change from the leading side to the trailing side produced by the shock modifies the critical shear stress for dislocation nucleation, which explains the difference in the plasticity between the leading side and the trailing side of both the helium bubbles and the voids. The result will contribute to a better understanding of the microscopic mechanism through which irradiation damages affect the dynamic properties of metals.

**Keywords** : molecular dynamics, shock wave, helium bubble, void

**PACC** : 6170G, 7115Q, 6250, 6170Q

<sup>\*</sup> Project supported by the Science and Technology Foundation of State Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, China ( Grant No. 9140C67010106ZS75 ), the Key Program of Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics ( Grant No. 2007A01004 ) and the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 60436010 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : wjzhu@caep.ac.cn