

晶界对纳米多晶铝中冲击波阵面结构影响的分子动力学研究*

马文¹⁾²⁾ 祝文军^{1)†} 陈开果¹⁾ 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国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

2) (国防科学技术大学物理系, 长沙 410073)

(2010年3月25日收到; 2010年5月12日收到修改稿)

用分子动力学方法研究了纳米多晶铝在冲击加载下的冲击波阵面结构及塑性变形机理. 模拟研究表明: 在弹性先驱波之后, 是晶界间滑移和变形主导了前期的塑性变形机理; 然后是不全位错在界面上成核和向晶粒内传播, 然后在晶粒内形成堆垛层错、孪晶和全位错的过程主导了后期的塑性变形机理. 冲击波阵面扫过之后留下的结构特征是堆垛层错和孪晶留在晶粒内, 大部分全位错则湮灭于对面晶界. 这个由两阶段塑性变形过程导致的时序性塑性波阵面结构是过去未见报道过的.

关键词: 晶界, 塑性变形, 冲击波阵面, 分子动力学

PACS: 61.72.Mm, 62.20.F-, 62.50.Ef, 71.15.Pd

1. 引言

了解冲击波阵面 (shock front) 结构对发展合适的连续介质模型及预测材料的动力学相应特性有着至关重要的作用. 早期针对弱冲击波的线性流体力学近似和用于稀薄气体冲击的 Boltzmann 公式都存在一定的限制^[1]. 实验研究主要借助测量冲击波阵面的上升时间 (rising time) 来推测波阵面的内部结构. Jones 等^[2] 的测量表明粗晶低碳钢在爆轰冲击加载下的上升时间为几十纳秒量级, 随后 Chhabildas 等^[3] 测定 6061-T6 铝、无氧铜和 4043 钢在不同冲击强度下冲击波上升时间为纳秒量级, 随着近年测量仪器时间分辨率的提高, Gahagan 等^[4] 用激光辐照加载方法得到铝、镍薄膜的上升时间为皮秒量级. 由于受到实验水平和仪器分辨率的限制, 目前用实验方法还不能直接观察到冲击波阵面的内部结构, 所以有关冲击波阵面结构的跨尺度理论方法的发展就显得十分重要^[5].

实际上, 早在 1977 年 Meyers 等^[6,7] 就研究了冲击加载下微米尺度多晶铁中的双波结构问题, 提出众多晶粒中冲击波速的各向异性是冲击波阵面展宽的主要原因. 最近 Barber 等^[8] 基于这个思想建立了冲击波阵面宽度的理论模型, 并据此估算了不同金属材料的冲击波阵面展宽程度. 随着分子动力学 (MD) 方法和 Monte Carlo 方法在冲击波研究中的应用, 越来越多的复杂的冲击波阵面内部结构在原子和介观尺度上被揭示了出来. 沿不同单晶晶向加载冲击波的 MD 模拟^[1,9-11] 给出了冲击波在单晶中详细的阵面结构, 然而由于金属材料通常是以多晶方式存在的, 不同取向晶粒间的界面 (晶界, grain boundary) 大量存在于金属材料中. 晶界对于多晶金属材料的性能, 特别是对于金属的强度和塑性机理有很大影响^[12], 以上可参见 Dao^[13], Meyers^[14] 和 Kumar^[15] 等人的综述性文章. 然而由于受到现有实验手段的限制, 对冲击加载下多晶金属的力学行为研究还不多, 因此 MD 模拟就成了目前比较有效的研究方法^[16-18], 但又由于受到当前计算机能力的限

* 冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金 (批准号: 9140C6703010804, 9140C6701010902), 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) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

制,目前仅能进行纳米多晶金属力学行为的 MD 模拟研究.

表 1 本文模拟样本的详细参数

样本	晶粒数	平均晶粒大小/nm	总原子数	密度/%	尺寸/nm × nm × nm
1	6 × 3 × 3	10.1	3284189	97.4	60.7 × 30.4 × 30.4
2	16 × 2 × 2	10.1	3902745	97.2	161.9 × 20.2 × 20.2

由于尺度效应存在,纳米多晶材料的冲击波阵面结构与通常粗晶材料的会有一定差别,但这并不妨碍我们通过纳米多晶材料的研究来获取对冲击加载下普通多晶材料塑性变形机制的了解.在这方面,尽管 Bringa^[19] 基于 Meyers 的思路^[6, 7] 用 MD 方法模拟研究过纳米多晶铜的波阵面展宽对晶粒尺寸、冲击强度和时间的依赖性,但他主要考虑了晶粒的各向异性弹性性质的影响,而忽略了通过材料变形过程中塑性变形及晶界散射的影响,也没有分析其中的塑性机理. 本文研究目的就是针对这个问题安排的.

2. 计算模拟方法

采用文献[20]中的方法生成纳米多晶 fcc 金属

的初始结构,并模拟研究了两个样品(见表 1)的冲击加载过程. 使用本组自行开发的并行 MD 程序对初始多晶结构在周期性边界条件约束下进行了弛豫,样品弛豫后的密度约为理想单晶的 97%,详情见文献[21]. Al 原子间的相互作用采用 Mishin 等人发展的嵌入原子(embedded atom method, EAM)势^[22]描述,此势对单晶的适用性已通过了本组并行 MD 程序的验证^[23, 24]. 使用键对分析方法^[25]来分析原子结构,依照 Cormier^[26]提出的微应力分析方法来分析体系的内应力. 冲击波的产生由活塞法^[10, 27]来实现,沿冲击方向采用自由边界条件,垂直冲击方向使用周期性边界条件. 由于碰撞过程十分短暂,可以认为整个系统是绝热的,初始温度设为 0 K.

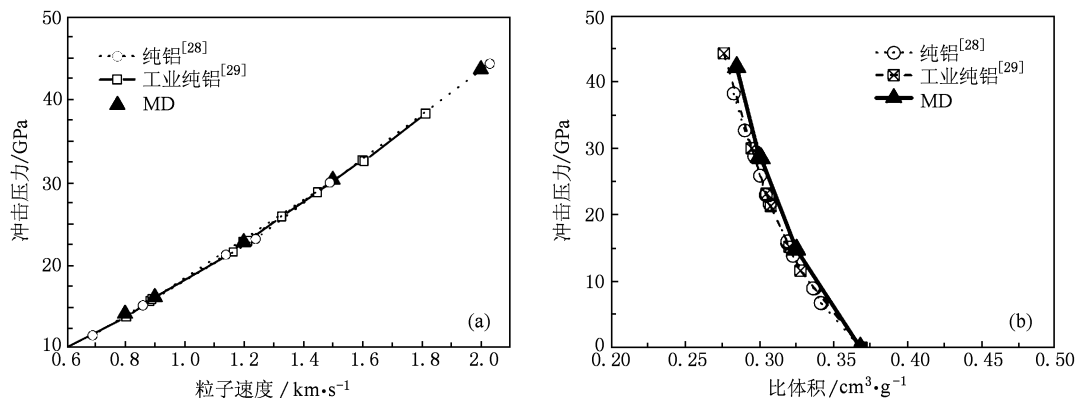


图 1 样本 1 的冲击加载 MD 模拟得到的 (a) 冲击压力-粒子速度关系, (b) 冲击压力-体积关系与纯铝^[28] 和工业纯铝实验结果^[29] 的对比

3. 计算结果与讨论

本文中铝采用的 EAM 势函数^[22]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,并且能用来模拟多晶铝的准静态加载过程^[30]. 为了进一步考核它对冲击波动态加载条件下的适用性,我们将首先把它用于模拟研究纳米多晶铝的冲击压

缩线(hugoniot curve),并与现有文献中的有关实验数据进行比较.

3.1. EAM 势函数适用性的验证

我们计算了样本 1 在五个不同活塞速度(0.8, 0.9, 1.2, 1.5 和 2.0 km/s)加载下的冲击压力-粒子速度关系($P-U_p$)和冲击压力-体积关系($P-V$),并与纯铝^[28]和工业纯铝的实验数据^[29]进行了比较,见

图 1. 从图 1 可以看出,用 MD 模拟得到的 $P-U_p$ 关系在冲击压力 45 GPa 以下与实验结果符合得较好. 虽然图 1(b) 中存在很小的差距,但由于本文主要关注的是冲击波阵面结构和塑性变形过程,这点差距不会在本质上影响对塑性变形机理信息的提取和分析研究. 故可认为本文采用的铝的 EAM 势函数^[22]亦能使用于对铝的动态力学行为的模拟研究.

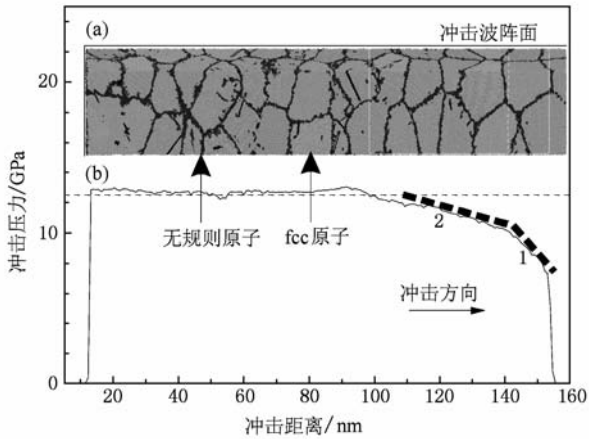


图 2 (a) 样本 2 在活塞速度 0.7 km/s 作用后 20 ps 时刻多晶变形结构图,白色方框标志了冲击波阵面的位置,浅灰色表示 fcc 原子,深灰色为无规则结构原子(晶界和位错核),并用箭头标出,黑色表示 hcp 原子;(b) 为 20ps 时刻的冲击压力剖面图,其中黑色箭头表示冲击波传播方向,细虚线表示冲击波后平衡态的冲击压力(12.5 GPa),粗虚线 1 和 2 分别为冲击波阵面上两段不同斜率指示的不同塑性过程

3.2. 冲击波阵面的结构

我们分别模拟了样本 2 在活塞速度 0.7 km/s 和 1.5 km/s 冲击加载下的塑性变形过程. 图 2 给出了活塞速度 0.7 km/s 作用后 20 ps 时刻样本 2 的多晶变形形貌和冲击压力沿冲击方向上的分布情况(冲击压力剖面). 冲击压力和粒子速度分布是由沿冲击方向上两个晶格常数(约 0.8 nm)长盒子内所有原子(约 20000 个)的速度和应力值的统计平均后得到的. 局域应力必须表示为一定体积内 Virial 应力^[31]的统计平均,研究证明^[26, 32],边长为两个晶格常数的体积内的统计平均是足够. 但为了慎重起见,我们还尝试了更大体积(约 2 nm 长)中的平均,发现得到的冲击压力剖面图与图 2(b) 的差别不大. 图 2(a) 是用键对分析方法得到的在 20 ps 时刻的多晶变形结构图,可以看到在冲击波后仅有少量的位错产生(此时的冲击压力已高于 Hugoniot 弹性极

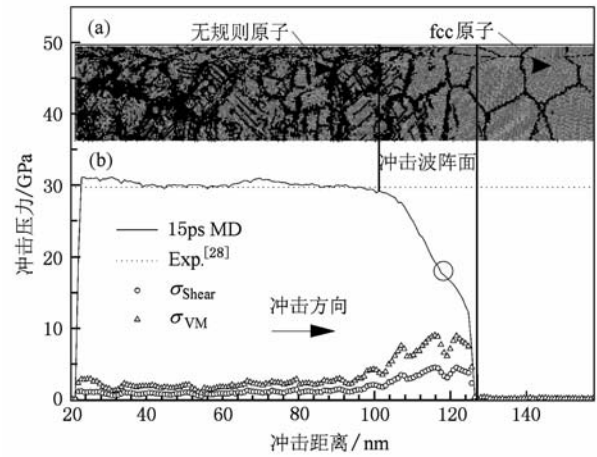


图 3 (a) 为样本 2 在活塞速度 1.5 km/s 冲击加载下 15 ps 时原子结构示意图,颜色标识同图 2;(b) 为 15 ps 时冲击压力,剪切流应力 σ_{shear} (空心圆)和 Von Mises 流应力 σ_{VM} (空心三角)沿冲击方向的空间分布,两条黑色实线确定了冲击波阵面的位置,黑色箭头表示冲击方向,黑色圆圈标识出冲击波阵面上的拐点

限);但由于此情况下的冲击压力还不算太高(比 Hugoniot 弹性极限高得不多),此时纳米多晶铝的塑性变形机理由晶界滑移所主导. 图 2(a) 中的白色方框标示出冲击波经过 20 ps 传播后的波阵面位置,可以看出白色方框的前半区域中没有位错产生,但与此对应的波阵面则显示此区域已发生了塑性变形,如图 2(b) 冲击压力曲线中标识的 1 和 2 两段斜率不同的曲线,也就是说晶界滑移和位错发射两种塑性发生过程在波阵面上体现为时序上两段. 进一步仔细观察此时晶界原子的变形情况,我们发现了原子拖曳(atomic shuffling)和应力辅助的自由体积迁移(stress-assisted free-volume migration)两种原子过程,标志着晶界滑移在此区域已经发生^[33]. 图 2(b) 的冲击压力平台显示活塞速度 0.7 km/s 时对应的冲击压力约为 12.5 GPa,略高于传统块体材料得到的实验值^[28]. 从图 2(b) 还能明显观察到弹塑性双波结构,并且弹性前驱波上升非常快,在图 2(b) 中表现为弹性阶段波形曲线的斜率很大. 总结上面的分析,我们发现冲击波在纳米多晶中的传播过程可以分为三个阶段,首先在冲击波传到的区域发生弹性形变并形成比较窄的弹性前驱波传播区域;然后随着应力的增加晶界滑移发生,形成塑性波区域;最后随着应力的进一步增加位错开始在晶界处发射并伴随着晶界的变形,形成完整的塑性流动并使冲击波后达到稳定的应力状态. 晶界滑移和

位错发射这两种塑性机制发生的时序性主要是由于在一定应力和晶粒尺寸下纳米多晶金属的晶界塑性开始占主导作用^[33], 这样的纳米多晶金属在冲击加载下由于两种塑性过程的时序性会导致冲击波阵面的展宽. 为了说明这一现象并非偶然出现, 我们模拟了样本 2 在另一冲击加载强度(活塞速度 1.5 km/s)和样本 1 在活塞速度 0.9 km/s 加载下的塑性变形过程和波阵面结构. 图 3 显示了样本 2 在活塞速度 1.5 km/s 加载下的原子结构(a)和波阵面(b), 并给出了样本 2 中的两种流应力 σ_{shear} 和 σ_{VM} 的变化过程, 其定义如下:

$$\sigma_{\text{shear}} = \frac{1}{2} \left[\sigma_{xx} - \frac{\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{2} \right],$$

$$\sigma_{\text{VM}} = \sqrt{[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2] / 2}.$$

除活塞速度与图 2 不同外, 其余条件和方法均与图 2 相同. 从图 3 和图 2 的对比可以看出随着活塞速度的增加, 冲击压力增大, 冲击波阵面的宽度减小, 与粗晶材料实验^[3] 和其他 MD 模拟^[19] 得到的认识是一致的. 同时导致样本 2 中的位错密度更高, 应变也随之增加. 在冲击波阵面后方流应力基本达到稳定, 约为 1—3 GPa, 比实验使用粗的晶 (coarse-grain) 金属屈服强度高一个数量级, 但与其他纳米多晶金属 MD 模拟结果^[16, 17] 接近, 主要原因为 MD 模拟的样品中虽然考虑了晶界缺陷, 但相比于实验使用的样品中的缺陷仍然少得多, 所以相比实验更难于屈服. 在冲击波阵面上, 仍然可以发现与图 2 一样的结果, 晶界滑移先于位错发射, 在图 3(b) 中表现为塑性波出现拐点(黑色圆圈标识), 说明了两种塑性机理对应力增加贡献的不同, 这比低加载强度(活塞速度 0.7 km/s)下的时序性表现得更加明显. 同时冲击波阵面上的流应力和剪切应力出现振荡, 也说明了不同塑性过程的发生.

为了进一步说明冲击波阵面上晶界滑移和位错发射的时序性, 我们给出了样本 1 在活塞速度 0.9 km/s 冲击加载 7 ps 时距表面 20 nm 处厚 4 nm 薄层的原子结构(刨去了具有 fcc 结构的原子)及其对应的微区域粒子速度分布情况, 分别如图 4(a) 和(b)所示. 从图 4(a) 看出, 冲击波阵面后出现了大量不全位错(如黑点线圆圈所示), 也有少量的全位错(黑虚线圆圈)和孪晶(黑实线圆圈)形成. 通过连续观察不同时刻的原子结构图发现, 前导不全位错(leading partial dislocation)与晶界处产生的后续

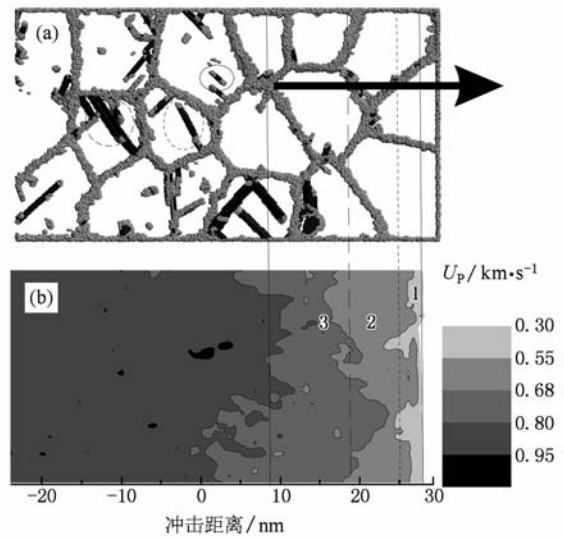


图 4 样本 1 在活塞速度 0.9 km/s 加载下垂直冲击方向 20 nm 深处 4 nm 厚切片在(a) 7 ps 时刻的原子形貌(b)及其对应的粒子速度分布, 黑色箭头表示冲击方向. (a) 中具有 fcc 结构的原子未显示, 灰色表示晶界及其他无正常结构原子, 黑色代表 hep 原子. 黑点线圆圈中为不全位错, 黑实线圆圈为全位错, 黑虚线圆圈为孪晶

不全位错(trailing partial dislocation)形成全位错在晶粒内部运动, 并最终在对面的晶界处湮没, 在晶粒内部不留下任何痕迹而与不全位错在晶粒内留下层错(stacking fault)不同, 这与准静态加载下纳米多晶的塑性变形机理是相同的^[34]. 另外位错集中在容易滑移的晶粒内, 同时在冲击波后晶粒的形状也发生了改变, 说明在冲击波阵面后的塑性过程包括位错发射和晶界的变形. 图 4(b) 可以看出在冲击加载 7 ps 后, 冲击波阵面(黑实线之间区域)后的平均粒子速度达到 0.9 km/s 左右的平衡态, 对应的冲击波阵面宽度约为 20 nm. 冲击波阵面为两条黑实线之间的区域, 即粒子速度从大于 0.3 km/s 到小于 0.8 km/s 的不规则区域, 粒子速度在上升的前半段(点线到实线之间的区域 1)对应的原子结构中没有观察到任何位错的产生, 而在后半段(虚线到实线之间的区域 3)对应的原子结构不少不全位错已经在晶界处成核并开始向晶粒内部传播; 中间的区域 2(虚线和点线间的区域)中基本没有位错的产生, 但对应的粒子速度剖面则说明此区域已经是塑性变形区域, 也即晶界引起的塑性变形在此区域占主导作用. 这也再次说明了冲击波阵面在纳米多晶铝中的传播过程有三个阶段, 弹性变形阶段(对应图 4 中区域 1), 晶界占主导作用的塑性变形阶段(对应

图 4 中区域 2), 位错占主导的塑性变形阶段(对应图 4 中区域 3).

综合对两个样本的冲击加载过程分析, 我们可以得到纳米多晶铝在冲击加载时的原子尺度弹塑性响应过程的清晰认识: 纳米多晶铝在冲击波作用下经历短暂(小于 1 ps)的弹性形变后, 波阵面上的应力和粒子速度都开始上升; 之后晶界原子在应力集中作用下开始调整、滑移, 释放部分应力, 这段过程体现在波阵面塑性区域的前半段(ps 量级); 随着冲击的进一步加载粒子速度增加, 应力仍然在升高, 特别是在晶界处, 不全位错开始在晶界处成核并向晶粒内部传播; 冲击波阵面扫过之后应力、粒子速度、能量等宏观量达到平衡, 不再发生变化. 这种冲击波阵面上的分段塑性过程形成了特殊的波阵面结构及展宽, 其最主要的原因是纳米多晶铝中大量晶界的存在及其晶粒尺寸的限制. 因此在传统粗晶中不存在这种波阵面展宽机理, 而且在单晶的冲击加载 MD 模拟也未看到这种现象. 由于纳米多晶金属的塑性过程严重依赖于晶界结构, 晶粒大小和材料种类等因素^[13-15], 并且这种冲击波阵面展宽机理是因为晶界缺陷引起的位错发射和晶界滑移的时序性而形成, 因此本文提出的纳米多晶铝冲击波阵面展宽机理对晶界微观结构、晶粒大小等因素的依赖也非常强, 需要我们下一步工作中进一步的分析研究.

4. 结 论

本文通过 MD 模拟研究了不同晶界构型的纳米多晶铝在冲击加载下原子尺度的塑性变形过程和冲击波阵面的结构. 研究表明, 在冲击加载下冲击波阵面的结构是微观塑性变形过程的宏观体现. 在冲击波阵面刚扫过纳米多晶铝时, 经过短暂的弹性形变后晶界开始发生滑移等塑性过程, 之后不全位错在晶界处成核并向晶粒内部传播, 并会在晶粒内部形成堆垛层错、全位错和孪晶界; 波阵面扫过之后在晶粒内部留下层错和孪晶界, 全位错湮没于对面的晶界后塑性变形结束并在冲击波阵面后形成稳定的波后状态. 通过观察不同冲击条件下波阵面的宽度, 可以发现对纳米多晶金属而言, 冲击波阵面宽度随冲击加载强度的增加而减小, 这与传统非纳米材料是相同的. 然而, 我们发现由于晶界缺陷的存在导致晶界和位错两种塑性过程在波阵面上出现时序性从而使波阵面宽度增加, 这是纳米多晶金属响应冲击加载的特性. 研究结果有助于在原子尺度上深刻理解纳米材料的冲击波阵面, 建立描述冲击波阵面及波后状态的理论模型.

感谢中国工程物理研究院应用计算机研究所张亚林, 王永红在并行计算过程中提供的帮助.

- [1] Zhakhovskii V V, Zybin S V, Nishihara K, Anisimov S I 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1175
- [2] Jones O E, Holland J R 1968 *Acta Metall.* **16** 1037
- [3] Chhabildas L C, Asay J R 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 2749
- [4] Gahagan K T, Moore D S, Funk D J, Rabie R L, Buelow S J, Nicholson J W 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3205
- [5] Holian B L 2003 *High-Pressure Shock Compression of Solids VI* edited by Horie Y, L Davison, and N N Thadhani (New York: Springer)
- [6] Meyers M A 1977 *Mater. Sci. Eng.* **30** 13
- [7] Meyers M A, Carvalho M S 1976 *Mater. Sci. Eng.* **24** 5
- [8] Barber J L, Kadau K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 144106
- [9] Germann T C, Holian B L, Lomdahl P S, Ravelo R 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4
- [10] Holian B L, Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 4
- [11] Cao B, Bringa E M, Meyers M A 2007 *Metall. Mater. Trans. A* **38** 2681
- [12] Weertman J R 2002 *Nanostructured Materials: Processing, Properties, and Potential Applications* edited by Koch C C (New York: William Andrew Publishing)
- [13] Dao M, Lu L, Asaro R J, Hosson J T M D, Ma E 2007 *Acta Mater.* **55** 25
- [14] Meyers M A, Mishra A, Benson D J 2006 *Prog. Mater. Sci.* **51** 427
- [15] Kumar K S, Van Swygenhoven H, Suresh S 2003 *Acta Mater.* **51** 5743
- [16] Bringa E M, Caro A, Wang Y M, Victoria M, McNaney J M, Remington B A, Smith R F, Torralva B R, Van Swygenhoven H 2005 *Science* **309** 1838
- [17] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Albers R C, Wark J S, Higginbotham A, Holian B L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 135701
- [18] Jarmakani H N, Bringa E M, Erhart P, Remington B A, Wang Y M, Vo N Q, Meyers M A 2008 *Acta Mater.* **56** 5584
- [19] Bringa E M, Caro A, Victoria M, Park N 2005 *JOM* **57** 67
- [20] Chen D 1995 *Comput. Mater. Sci.* **3** 327
- [21] Ma W, Zhu W J, Zhang Y L, Chen K G, Jing F Q, 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4781 (in Chinese) [马文、祝文军、张亚林、陈开果、邓小良、经福谦 2010 物理学报 **59** 4781]

- [22] Mishin Y, Parkas D, Mehl M J, Papaconstantopoulos D 1999 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **538** 535
- [23] 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]
- [24] Wang H Y, Zhu W J, Deng X L, Song Z F, Chen X R 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1154 (in Chinese) [王海燕、祝文军、邓小良、宋振飞、陈向荣 2009 物理学报 **58** 1154]
- [25] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [26] Cormier J, Rickman J M, Delph T J 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 99
- [27] 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]
- [28] Jing F Q 1999 *Introduction to Experimental Equation of States* (ed. 2) (Beijing: Science Press) p91 (in Chinese) [经福谦 1999 实验物态方程导引(第二版)(北京: 科学出版社) 第 91 页]
- [29] Marsh P S 1980 *LASL Shock Hugoniot Data* (Berkeley: University of California Press)
- [30] Frøseth A G, Derlet P M, Van Swygenhoven H 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5863
- [31] Cheung K S, Yip S 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 5688
- [32] Zimmerman J A, Webb III E B, Hoyt J J, Jones R E, Klein P A, Bammann D J 2004 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12** S319
- [33] Van Swygenhoven H 2002 *Science* **296** 66
- [34] Van Swygenhoven H, Derlet P M, Hasnaoui A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024101

Molecular dynamics investigation of shock front in nanocrystalline aluminum: grain boundary effects*

Ma Wen^{1,2)} Zhu Wen-Jun^{1)†} Chen Kai-Guo¹⁾ Jing Fu-Qian^{1,2)}

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

2) (Department of Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 25 March 2010; revised manuscript received 12 May 2010)

Abstract

The shock front structure and the plastic deformation of nanocrystalline aluminum under shock loading are investigated by using molecular dynamics simulations. The simulation results show that: after the elastic wave was generated, the grain boundary sliding and deformation dominated the early plastic deformation mechanisms, then the partial dislocations were nucleated at the deformed grain boundaries and spread within the grains, finally the process of stacking faults, deformation twins and full dislocation formation in the grain dominated the latter stage of the plastic deformation. The structural characteristics after the shock front swept over is that the stacking faults and the deformation twins are left in grains, and the majority of the full dislocations are annihilated at the opposite grain boundaries. It is reported for the first time that the shock front structure reflects the time sequence of two different plastic deformation mechanisms in nanocrystalline aluminum.

Keywords: grain boundary, plastic deformation, shock front, molecular dynamics

PACS: 61.72. Mm, 62.20. F - , 62.50. Ef, 71.15. Pd

* Project supported by the Science and Technology Foundation of National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics (Grant Nos. 9140C6703010804, 9140C6701010902), and the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2007A01004).

† Corresponding author. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn