

冲击诱导金属铝表面微射流现象的微观模拟*

邵建立[†] 王裴 何安民 秦承森

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100094)

(2012年2月10日收到; 2012年2月27日收到修改稿)

采用嵌入原子势分子动力学模拟方法, 研究了金属铝表面沟槽在冲击下形成微射流的微观过程和动力学性质. 通过对模拟结果的统计分析, 获得了较宽冲击压力范围内微射流形态的变化规律, 以及相应的质量 - 空间分布和质量 - 速度分布变化. 基于原子中心对称参数, 分析了样品近表面非晶态转变和卸载熔化过程, 获得了卸载熔化对微射流质量及其分布的影响规律. 研究还发现: 样品熔化之前, 微射流质量与波后粒子速度呈线性增加关系; 卸载熔化出现后, 微射流质量开始迅速增加; 当卸载熔化速度足够快时, 金属强度效应可忽略, 此时微射流质量与波后粒子速度再次表现出线性增加关系.

关键词: 微射流, 分子动力学, 冲击

PACS: 47.15.Uv, 47.11.Mn, 62.50.Ef

1 引言

当材料自由表面受到强冲击载荷时, 通常会发生微喷射现象, 即部分物质以较高速度脱离材料自由表面或基体向外喷射. 微喷射是材料近表面区域的一种特殊破坏形态, 其形成过程包含了近表面各种微缺陷的跨尺度发展, 并与材料动态物性密切相关. 这一现象在诸多强冲击、高速碰撞等工程领域研究中占有重要地位, 因而该现象自被发现^[1]以来便引起人们的极大关注^[2].

已有研究表明, 影响材料微喷射特性的主要因素包括表面的缺陷构成^[3-5]、冲击加载压力与波形^[6,7]、材料强度与卸载熔化^[8]等几个方面; 当然, 不同材料的喷射特性也存在明显差异^[9], 同一材料在不同冲击强度下的喷射机制也有本质变化, 使得微喷射质量出现阶段性变化规律^[8]. 金属表面(机加工)一般都以周期性沟槽结构为主要形貌特征, 这种结构常被作为研究微喷射机制的主要模型之一. 在较强冲击下这些沟槽将被激活而产生微射流, 从而构成微喷物的一个主要来源机制. 因此,

人们基于沟槽样品陆续开展了大量的实验和理论研究. 如: 美国 Asay 等^[3]在 20 世纪 70 年代开展了一系列金属铝和铅等沟槽样品的微喷射实验研究, 获得了微射流质量及最大速度随沟槽角度的变化规律, 并且与定常射流理论结果取得一致; 国内, 韩长生^[9]基于定常射流理论, 推导出一个估算楔型槽表面微喷射质量的半经验解析公式; 近年来, 我们针对沟槽模型的喷射现象开展了进一步理论研究^[10], 包括微射流形成条件, 加载波前沿宽度效应, 微射流与沟槽夹角的关系, 等等.

需要指出, 传统的实验和经典理论主要是对现象宏观效应的考察和分析, 受模型及其参数等因素的影响, 宏观数值模拟还难以给出微喷射的细致物理过程. 经典的分子动力学 (molecular dynamics, MD) 是基于原子层次的确定性模拟方法, 理论上可以反映材料变形与破坏过程的全部物理细节. 随着近年来计算机技术的飞速发展, MD 模拟逐渐成为微喷射机理研究的一种主要数值手段. 2002 年, 陈军等^[11]采用 MD 方法模拟了单晶铜沟槽微射流的微观过程, 分析了沟槽夹角大小的影响; 2003 年, Germann 等通过大规模 MD 模拟分析了金属铜喷

* 中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2009A0101007) 资助的课题.

[†] E-mail: shao.jianli@iapcm.ac.cn

射颗粒尺寸和速度的分布^[12]; 2005年, 陈其峰等基于 MD 模拟分析了金属铜和铝的喷射质量随沟槽角度和冲击强度的变化规律^[13]. 这些研究进一步揭示了表面沟槽形成喷射的机制和规律. 然而, 一些实验结果表明, 冲击或卸载熔化的出现将对微喷射质量及其分布产生显著影响, 目前, 对这一现象的相关机制认识还并不清晰.

本文以金属铝为例, 通过引入能够反映铝高压熔化的嵌入原子势, 对其表面沟槽模型的微射流喷射现象进行了系列模拟研究. 研究结果获得了微射流形态、头部速度及喷射系数在较宽压力范围的变化规律, 并给出了卸载熔化对微射流的影响分析.

2 模型与方法

2.1 原子间相互作用势

经典 MD 模拟规定所有粒子都要遵守牛顿力学定律, 原子间相互作用势则是影响 MD 模拟结果的关键物理基础. 目前人们使用的势函数大多是经验或半经验的, 势函数的具体形式和参数需要根据研究的具体物质和具体问题来确定.

嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 是基于密度泛函理论的一种多体势函数形式^[14,15], 适合于描述金属及合金的原子间相互作用. EAM 势的总能量可表示为

$$U_{\text{tot}} = (1/2) \sum_{i,j(i \neq j)} \phi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

式中等号右侧 $\phi(r_{ij})$ 为原子 i 与 j 之间的两体势能, $F(\rho_i)$ 为原子 i 嵌入由系统中所有其他原子构成的电子云密度 ρ_i 中所需要的能量. 本模拟工作采用 1992 年由 Mei 和 Davenport 发表的关于金属铝的 EAM 势^[16], 其两体势 $\phi(r)$ 形式为

$$\phi(r) = -\phi_0 \left[1 + \delta \left(\frac{r}{r_0} - 1 \right) \right] \times \exp \left[-\gamma \left(\frac{r}{r_0} - 1 \right) \right], \quad (2)$$

电子密度函数 ρ_i 的形式为

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f(r_{ij}), \quad f(r) = \rho_e \sum_{l=0}^5 \frac{c_l}{12} \left(\frac{r_0}{r} \right)^l, \quad (3)$$

嵌入能 F 的形式为

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\mu}{\nu} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\mu/\nu} + \frac{1}{2} \phi_0 \sum_{m=1}^3 s_m \exp[-(\sqrt{M}-1)\gamma] \times \left[1 + \left(\sqrt{M}-1 \right) \delta - \sqrt{M} \frac{\delta}{\nu} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \times \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\sqrt{M}\gamma/\nu}. \quad (4)$$

该势函数在较宽压力范围内给出的冲击雨贡献关系与实验数据接近, 而且可以描述金属铝的冲击熔化现象.

2.2 模拟方法

初始构型设置为 $13_{[100]} \times 160_{[010]} \times 120_{[001]}$ 个晶胞构成的面心立方单晶铝, 约包含 100 万个原子. 取 x, y, z 轴分别沿 $[100], [010], [001]$ 晶向. 在样品右侧表面设置角度为 120° 和深度为 10 nm 的沟槽, 如图 1 所示. 加载前将样品初始温度设为 0 K, 晶格参数为 $a = 4.05$ nm, 沿 x, y 方向采用周期性边界条件, 沿 z 轴方向设为自由边界, 进行充分弛豫. 采用动量反射方法^[17] 从 z 轴左侧表面加载右行冲击波. 原子运动方程采用速度 Verlet 算法^[18] 进行积分, 时间步长取 0.001 ps.

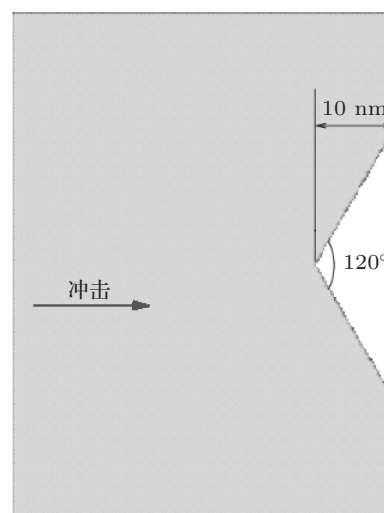


图 1 样品初始构型

原子级应力张量根据维里定理进行计算, 具体

计算公式可写为 [19,20]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left(\sum_i m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij\alpha} f_{ij\beta} \right), \quad (5)$$

式中右侧第一项和第二项分别表示原子的动量流和维里项, 其中 m 为原子质量, v 为原子速度, f 则表示原子 i, j 间的相互作用力, α, β 表示坐标轴. 与此同时, 金属的塑性变形和熔化等微观过程通过原子中心对称参数 c_i 来描述, 其计算公式如下 [21]:

$$C_i = \sum_{(j,j')} |R_{ij} + R_{ij'}|^2, \quad (6)$$

上式中, (j, j') 表示以原子 i 为中心呈中心对称的 6 组最近邻原子对, 其中最近邻 12 个原子由初始完整的面心立方晶格给出. 一般情况下, 晶格点阵理想排布时 C_i 值为零, 而当晶格发生畸变时 C_i 值将伴有迅速增加. 由此, 结合 C_i 值的变化容易找出发生塑性变形或熔化的区域.

3 结果与分析

3.1 冲击雨贡纽关系

基于上述模型和模拟方法, 我们对金属铝单晶样品进行了不同强度 (沿 [001] 晶向, 活塞推动速度 1.5—5.0 km/s) 冲击过程的数值模拟. 根据波阵面的前进速度获得了冲击波速度 (D) 与波后粒子速度 (u_p , 即活塞推动速度) 的对应关系, 采用维里定理计算出了波后压力 (p) 与体积 (V) 的对应关系, 计算结果见图 2(a) 和 (b), 图中 V_0 为波后体积 V 内物质对应的初始体积. 图 2(a) 结果显示, 在模拟的压力范围内 $D-u_p$ 保持了较好的线性关系, 且与文献 [22] 中的铝的实验数据接近; 相应的, 图 2(b) 中 $p-V$ 关系的统计结果也与实验数据接近. 这些结果表明, 本文所采用的势函数模型在较宽压力范围内是相对适合的.

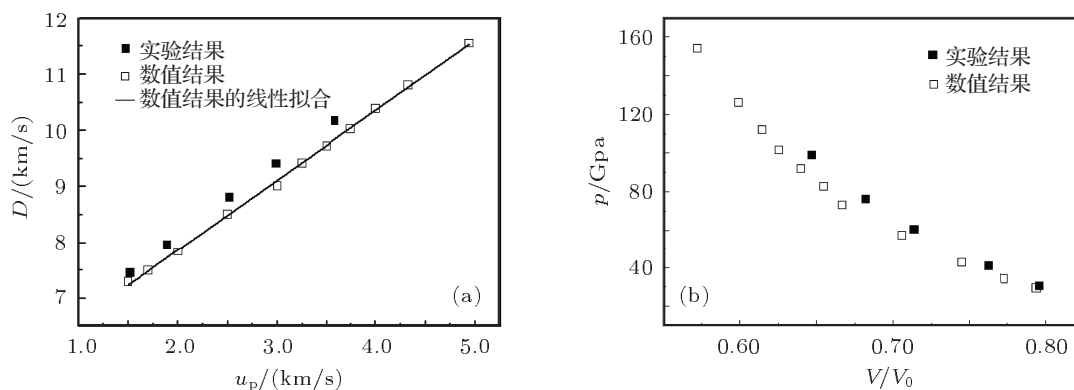


图 2 (a) 冲击波 $D-u_p$ 关系; (b) 波后 $p-V$ 关系

3.2 微射流质量分布及喷射系数

图 3(a) 和 (b) 分别给出了微射流质量 (m_j) 位置 (r) 分布和微射流质量 - 速度分布 (v_z). 本文以相对质量 (m_j/m_0 , 见图 3 中的纵坐标) 来讨论微射流质量分布. 其中, 某位置的 m_j 值是以该位置为中心的单位长度 (Δr) 内的物质质量, 而 m_0 则为对应的单位长度密实基体的物质质量. 从图 3(a) 中结果容易发现, 微射流质量分布基本上都呈现出头部鼓包、中间细长和根部展宽分布特征. 对于低压冲击加载 (如冲击压力为 34.5 和 42.3 GPa, 对应图 3(a) 中 $u_p = 1.7$ km/s, $u_p = 2.0$ km/s 曲线), 微射流根部质量 m_j/m_0 的值在 0.1 左右; 随着冲击压力

升高, 根部质量逐渐增加, 当冲击压力达到 112 GPa 时 (对应图 3(a) 中 $u_p = 4.0$ km/s 曲线) 时微射流根部质量 m_j/m_0 已超过 0.2. 从图 3(b) 中结果可以看到, 在微射流质量 - 速度分布曲线上亦有类似变化, 但高压时根部信号已经难以从曲线上直接辨认. 这些结果表明, 当冲击压力较高时微射流形态 (特别是根部) 将发生显著变化, 下文的分析给出, 这一变化主要是由表面区域的卸载熔化所导致.

根据上述质量分布, 我们统计了喷射系数 (微射流质量与沟槽缺陷对应质量的比值) 和微射流头部速度随波后粒子速度的变化, 见图 4(a) 和 (b). 统计结果表明, 喷射系数在熔化前随波后粒子速度线性增加; 当卸载熔化发生后 (图 4(a) 中 M 点), 喷射

系数开始迅速增加;当冲击压力继续增加,卸载熔化发生的压力增高且速度加快,使得微射流形成过程主要在液态下进行,此时微射流的喷射系数再次表现出随波后粒子速度的线性增加关系.而图 4(b)中结果则显示,微射流头部速度与波后粒子速度在模拟的压力范围内始终保持较好的线性关系,卸载

熔化的发生并未改变这一线性变化;也就是说,微射流头部速度主要取决于冲击波强度,而卸载熔化则主要影响微射流根部的形态.这一结果与相关实验观察基本一致,如 Frachet 等给出楔形沟槽表面锡的最大喷射速度与自由面速度的比值为常数,并给出了其随沟槽角度的变化 [23].

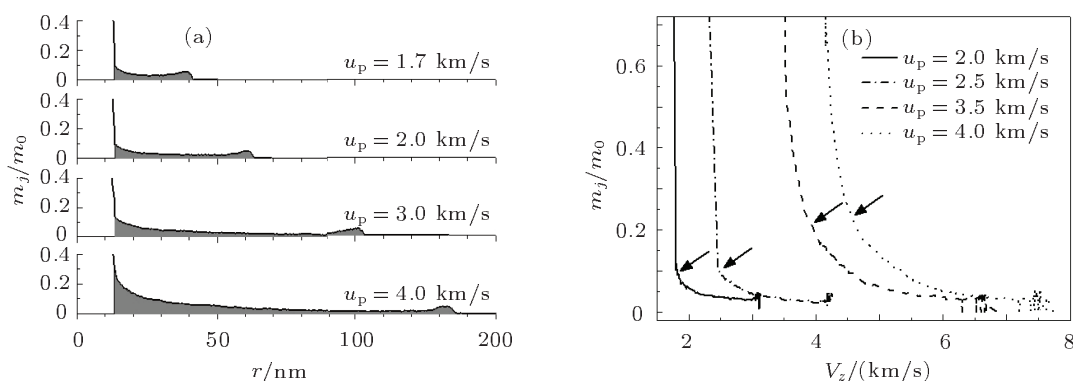


图 3 (a) 微射流质量 - 位置分布曲线; (b) 微射流质量 - 速度分布曲线

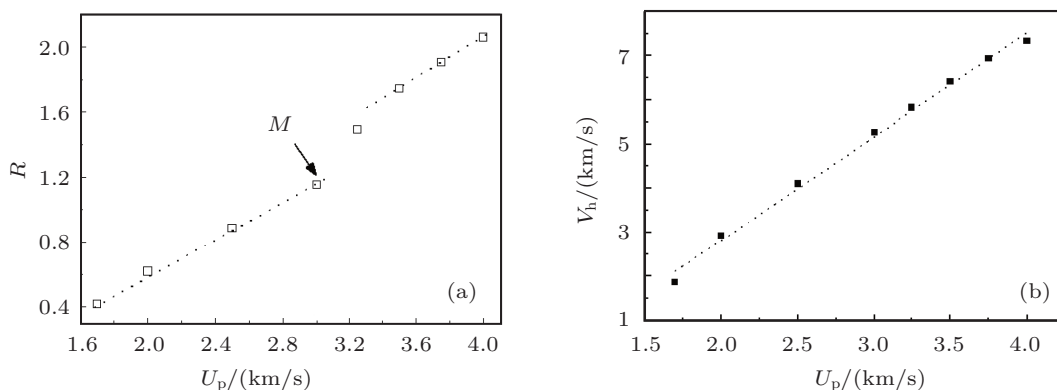


图 4 微射流喷射系数 (a) 和微射流头部速度 (b) 随波后粒子速度的变化

3.3 微射流形成过程的物理图像分析

根据中心对称参数的变化,我们分析了不同冲击压力下金属铝表面微射流形成过程的微观物理图像.图 5 给出了典型低压冲击下的微射流过程(冲击压力为 42.3 GPa, $u_p = 2.0$ km/s),其中中心对称参数值 $C \leq 4$ 为弹性变形, $4 < C < 32$ 为塑性变形区域, $C \geq 32$ 为非晶态区域.从图 5 中的微观图像可以发现,当冲击波从沟槽壁面卸载时,首先诱发沟槽周边的大量塑性变形(灰色区域),并在沟槽底部产生局部非晶态区域(浅灰色区域);之后,塑性区域向金属内部的扩展,沟槽底部非晶态区域逐渐增加并沿孪晶界向金属内部渗透,同时非晶

态区域出现微射流锥形(9 ps);在后续卸载过程,非晶态区域扩展不再明显,非晶态物质在速度梯度下逐步形成细长微射流形态(见 30 ps 图像).图 6 给出了典型高压冲击下(卸载熔化)的微射流过程(冲击压力为 91.8 GPa, $u_p = 3.5$ km/s).与低压加载情况不同的是:由于冲击波后已接近冲击熔化状态,未观察到明显的层错或孪晶等塑性变形;但冲击波在沟槽底部卸载时,诱发了显著的非晶态变化(7 ps);非晶态区域迅速向金属内部扩展,并出现从样品表面发生的卸载熔化(9 ps);最终样品近表面进入完全熔化状态,微射流根部明显变宽,并在沟槽下方稀疏波相交的区域出现微孔洞(30 ps).为进一步说明卸载熔化的影响,我们将上述两种典型压力下的

微射流图像进行了对比 (见图 7), 通过二者的对比发现, 低压下微射流底部存在大量层错和孪晶结构, 仅在沟槽周边区域出现非晶态; 而高压下由于卸载

熔化的发生, 微射流底部几乎完全进入熔化状态, 这必然导致卸载熔化后微射流周边区域的物质流动加强, 从而使得微射流根部相对熔化前明显变粗.

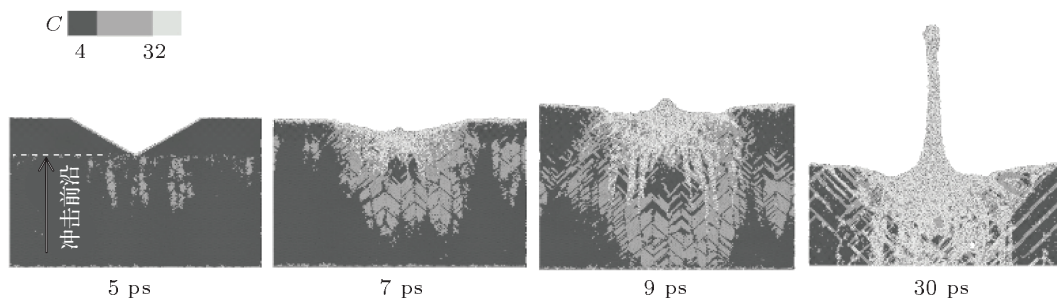


图 5 卸载熔化前 (2.0 km/s) 微射流形成的微观过程

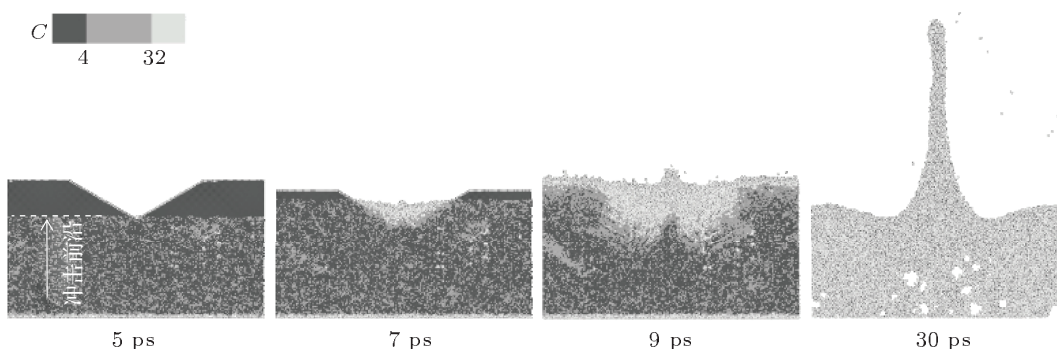


图 6 卸载熔化发生时 (3.5 km/s) 微射流形成的微观过程

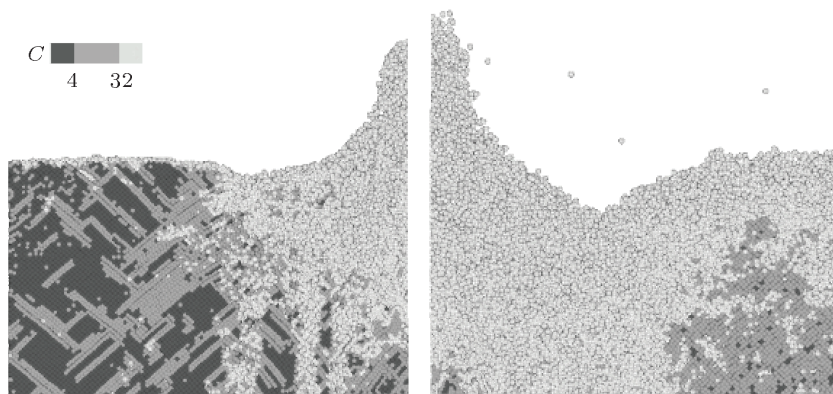


图 7 熔化前后微射流形成过程对比, 左侧: $u_p = 2.0 \text{ km/s}$, $t = 12.6 \text{ ps}$; 右侧: $u_p = 3.5 \text{ km/s}$, $t = 9.0 \text{ ps}$

基于上述微观过程, 我们统计了沿加载方向的密度和温度分布, 见图 8, 图中竖直虚线表示微射流截断位置, 水平虚线则表示本文势函数给出的金属铝在零压下的熔点. 从图 8 中结果容易发现, 微

射流物质的温度显然都高于零压熔点, 这就意味着, 不论表面是否发生卸载熔化, 微射流头部总是处于熔化状态, 这就使得微射流头部速度受卸载熔化影响不明显, 而主要取决于加载冲击波的强度; 然而,

两种冲击压力下微射流根部附近区域的温度分布有着本质差异: 高压下金属内部温度均明显高于常压熔点, 即卸载过程必然发生卸载熔化, 因而加速了近表面物质的流动; 而低压加载下微射流根部后方温度均低于常压熔点, 使得后续的微射流形成主要源自沟槽底部的局部非晶区域; 这最终导致了高压下微射流总量 (尤其是微射流根部质量) 较熔化前有明显增加。

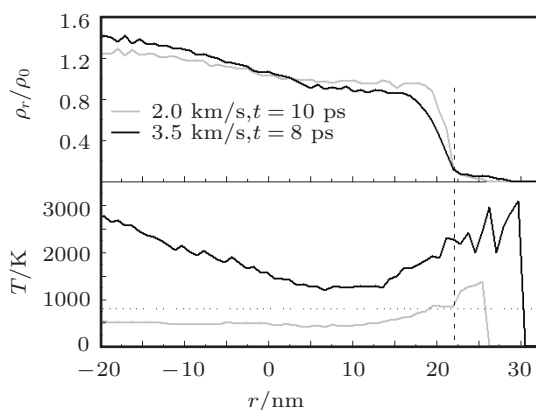


图 8 熔化前后微射流形成过程的密度 (上) 和温度 (下) 分布

3.4 微射流喷射系数的经验表述

根据 3.1 中的统计结果, 在卸载熔化前或熔化速度较高时, 微射流喷射系数与波后粒子速度保持线性增加关系, 即 $R = k \cdot u_p$ (熔化前) 和 $R' = k' \cdot u_p$ (熔化速度较高时); 对于卸载熔化引起的喷射系数的迅速增加, 结合 3.2 中的物理图像分析, 并假设由卸载熔化引起的喷射系数增量与卸载熔化速度 (D_m) 成正比, 即 $\Delta R = k_1 \cdot D_m$; 而数值模拟显示, 卸载熔化速度亦可近似表示为 $D_m = k_2 u_p$. 由此, 我们可将本文数值模拟结果采用如下函数形式进行拟合:

$$R = k \cdot (u_p - u_c) + k_1 \cdot k_2 \cdot H(u_p/u_m - 1), \quad (7)$$

上式中, u_c 和 u_m 分别表示微射流初始形成和卸载熔化出现时所对应的波后粒子速度. 该式将微射流喷射系数变化简化为随波后粒子速度的线性增

加 (数值结果显示 $k \approx k'$) 和卸载熔化引起的喷射系数增量两部分的叠加. 式中 u_m, k_2 取决于材料属性, u_c 则由材料属性和沟槽角度共同决定, u_p 可代表加载强度; k 和 k_1 为数值模拟获得的经验参数, 本文给出 $k = 0.57 \text{ s/km}$, $k_1 \cdot k_2 = 0.528$. 采用 (7) 式对喷射系数的拟合结果如图 9 所示, 其中, 当熔化速度 D_m 高于声速时熔化过程引起的喷射增量则无须再考虑。

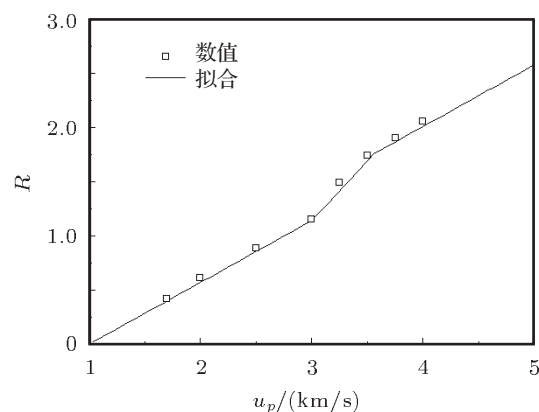


图 9 喷射系数的拟合结果

4 结论

本文基于自行研制的 MD3D 模拟程序, 通过引入能反映金属高压熔化过程的嵌入原子势, 对金属铝表面沟槽模型的微喷射现象进行了系列模拟研究. 研究结果给出了较宽压力范围内的微射流形态、头部速度和喷射系数的变化规律, 及相应的质量 - 空间分布和质量 - 速度分布的统计结果变化; 结合微观结构和力学量分析, 讨论了熔化效应对微射流的影响机制, 给出了包含熔化效应的微射流喷射系数的初步表达式. 本文结果与相关实验中观察到的微喷射现象特征相符 [8,24], 深化了冲击载荷下金属表面微喷射规律的理论认识. 当然, 本文计算模型比较简单, 而实验结果则是包含了多种因素的综合作用结果, 关于加载波形、表面形貌和缺陷尺度效应等诸多因素的对微喷射影响机制研究还有待进一步开展。

[1] Walsh J M, Shreffler R G, Willig F G 1953 *J. Appl. Phys.* **24** 349
 [2] Zhu J S, Hu X M, Wang P, Chen J, Xu A G 2010 *Adv. Mech.* **40** 400 (in Chinese) [朱建士, 胡晓棉, 王裴, 陈军, 许爱国 2010 力

学进展 **40** 400]

[3] Asay J R 1976 *Material Ejection from Shock-Loaded free Surface of Aluminum and Lead*, Sandia Laboratories, SAND76-0542

- [4] Asay J R, Berthold L D 1978 *A Model for Estimating the Effects of Surface Roughness on Mass Ejection from Shocked Materials* Sandia Laboratories, SAND78-1256
- [5] Asay J R, Mix L P, Perry F C 1976 *Appl. Phys. Lett.* **29** 284
- [6] Zellner M B, Grover M, Hammerberg J E 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 013522
- [7] Zellner M B, Dimonte G, Germann T C 2009 *AIP Conference Proceedings* **1195** 1047
- [8] Zellner M B, McNeil W V, Hammerberg J E 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 123502
- [9] Han C S 1989 *Chin. J. High Press. Phys.* **3** 324 (in Chinese) [韩长生 1989 高压物理学报 **3** 324]
- [10] Wang P, Shao J L, Qin C S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1064 (in Chinese) [王裴, 邵建立, 秦承森 2009 物理学报 **58** 1064]
- [11] 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]
- [12] Germann T C, Hammerberg J E, Holian B L 2004 *AIP Conference Proceedings* **706** 285
- [13] Chen Q F, Cao X L, Zhang Y, Cai L C, Chen D Q 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 3151
- [14] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [15] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Philos. Mag.* **A 50** 45
- [16] Mei J, Davenport J W 1992 *Phys. Rev. B* **46** 21
- [17] Holian B L, Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 2085
- [18] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [19] Irving J H, Kirkwood J G 1950 *J. Chem. Phys.* **18** 817
- [20] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulations of Liquids* (Oxford: Oxford University Press) p46
- [21] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [22] Mitchell A C, Nellis W J 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 3363
- [23] Frachet V, Elias P, Martineau J 1988 *Shock Waves in Condensed Matter* (Amsterdam North-Holland) p235
- [24] Ogorodnikov V A, Ivanov A G, Mikhailov A L 1998 *Ogorodnikov_Combustion, Explosion, and Shock Waves* **34** 696

Microscopic simulation on shock-induced micro-jet ejection from metal Al surface*

Shao Jian-Li[†] Wang Pei He An-Min Qin Cheng-Sen

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

(Received 10 February 2012; revised manuscript received 27 February 2012)

Abstract

Via molecular dynamics simulations employing an embedded-atom-method potential, we investigate the microscopic process and dynamical properties of shock-induced micro-jet from a grooved aluminum surface. For a large range of shock pressure, we obtain the micro-jet morphology variation, its mass spatial distribution and mass-velocity distribution. The amorphous state and release melting during the jetting are both analyzed using the central symmetry parameter, where the effect law of release melting on the micro-jet is obtained. It is found that the micro-jet mass keeps a linear increase with the piston velocity prior to release melting; the micro-jet mass is enhanced evidently after release melting; while the velocity of release melting is above a threshold, the jetting mass shows a linear increase with the piston velocity again, where the strength of material can be neglected.

Keywords: micro-jet, molecular dynamics, shock

PACS: 47.15.Uv, 47.11.Mn, 62.50.Ef

* Project supported by the Foundation for Development of Science and Technology of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. 2009A0101007).

[†] E-mail: shao.jianli@iapcm.ac.cn