

冲击加载下孔洞贯通的微观机理研究^{*}

邓小良¹⁾ 祝文军^{1)†} 宋振飞¹⁾ 贺红亮¹⁾ 经福谦^{1)‡}

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)

(2008 年 10 月 24 日收到, 2008 年 11 月 15 日收到修改稿)

利用分子动力学方法计算模拟了沿 100 晶向冲击加载下单晶铜中双孔洞的贯通过程. 发现孔洞周围发射剪切型位错环是孔洞塌缩和增长的原因. 在拉伸阶段, 孔洞首先分别独立增长, 随后其周围塑性变形区开始交叠和相互作用, 最后两个孔洞开始直接贯通. 这种贯通模式和实验对延性材料中孔洞贯通过程的显微观察结果一致. 对四种不同 θ 值 (θ 为两个孔洞中心连线与冲击加载方向之间的夹角) 的模型分别进行了计算模拟, 发现在相同的冲击加载强度下, $\theta = 0^\circ$ 和 $\theta = 30^\circ$ 的孔洞之间没有相互贯通, 而在 $\theta = 60^\circ$ 和 $\theta = 90^\circ$ 的孔洞之间观察到了贯通现象, 而且 $\theta = 60^\circ$ 比 $\theta = 90^\circ$ 的构型更容易贯通. 根据单孔洞周围位错发射特征, 对上述现象在微观机理上进行了深入分析和解释.

关键词: 纳米孔洞, 分子动力学, 冲击加载, 贯通

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

1. 引 言

实验研究已经发现, 延性金属材料在动态加载下, 首先微孔洞在材料内部薄弱处(晶界、二相粒子界面等)开始成核, 随后这些孔洞在拉伸应力作用下开始增长, 当孔洞增长到一定程度后, 孔洞之间开始贯通, 从而在材料内部形成宏观的断裂面^[1,2]. 因此, 孔洞之间相互贯通过程及其微观机理是研究延性材料动态断裂的一个重要方面, 它对深入理解延性材料动态断裂过程有重要意义.

基于这一问题的重要性, 人们分别从宏观和微观尺度对孔洞贯通问题进行了一定的研究. 在宏观尺度上, 从连续介质力学出发, 对孔洞贯通的临界判据、影响孔洞贯通的因素等问题进行了比较详细的研究, 例如通过计算模拟发现, 孔洞贯通过程和应力三轴度、应变硬化指数、孔洞形状以及初始孔隙度、加载晶向等因素相关^[3-6], 在对孔洞构型的研究方面, Schacht 等人对两种不同孔洞构型进行的计算模拟, 发现构型对孔洞周围滑移带形貌的影响可以忽略^[7], 而 Horstemeyer 等人的研究结果表明, 孔洞贯通

过程不但和材料、温度、加载方式有关, 而且也和孔洞空间构型有关^[8]. 在微观尺度的研究方面, 由于目前的传统回收实验无法提供孔洞贯通的完整动态过程, 人们主要是采用分子动力学计算模拟等方法从微观上对贯通过程进行研究. 如 Seppala 等人采用准静态的加载方式, 研究发现当孔洞之间相距约一个孔洞半径的时候, 贯通过程开始出现^[9,10]. Portimiche 等人研究了尺寸效应对孔洞贯通过程的影响^[11]. 但上述研究只是对贯通过程的一种唯像观察, 还缺乏对其微观机理及过程的理解和分析.

综上所述, 从目前基于连续介质力学的方法对贯通过程的研究结果看, 孔洞之间的贯通过程非常复杂, 从而使贯通判据(临界间距、临界应力应变、临界孔隙度等)和众多的因素相关联(加载、形貌、材料、构型等), 其机理还不清楚, 这也造成在工程应用中难以准确地考虑损伤演化的影响. 要深入认识和理解孔洞之间的贯通过程, 有必要从微观尺度上对这一问题进行深入研究, 找出影响这一过程各种因素的微观物理机理. 然而, 由于连续介质力学无法考虑晶格尺度上材料的本质离散特征, 所以对这一问题进行微观尺度上的研究非常困难. 分子动力学方

^{*} 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)及国家自然科学基金 NSAF 联合基金项目(批准号: 10876014)资助的课题.

[†] E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

法作为从微观尺度研究各种相关物理问题的有力工具,能够更深入和详细地了解孔洞贯通的微观过程.

从对单晶体中单孔洞在冲击加载下演化过程的研究结果看,位错在孔洞表面并不是均匀发射,在不同的冲击加载晶向下,位错在孔洞周围的发射有特定的最优方向^[12-15],并且材料内部产生的位错结构也和具体的冲击加载晶向有关^[16,17].孔洞周围位错的发射伴随着孔洞的增长,据此可以知道当孔洞之间在空间呈现不同的分布时,必然会影响到孔洞的贯通过程.本文用分子动力学方法研究含双孔洞的单晶铜在沿 $[100]$ 晶向冲击加载下的贯通过程,着重研究孔洞构型对其贯通过程的影响,本文提到的不同空间构型主要是指孔洞中心连线与冲击加载方向形成不同的角度,最后借助位错在孔洞周围的成核和运动规律,对计算结果进行深入的分析.

2. 模拟方法

我们以典型的延性金属材料面心立方(fcc)单晶铜为研究对象,采用 Mishin 等人拟合的原子嵌入势(EAM)函数描述铜原子之间的相互作用^[18],因为它不仅能准确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^[19],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 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 晶向.沿 x 方向进行冲击加载,采用周期性边界条件,模拟体系共包含约 5 493 398 个原子,三边长度分别约为 $40 \text{ nm} \times 40 \text{ nm} \times 40 \text{ nm}$.在模拟体系的中心预置了两个直径约 2.7 nm 的微孔洞,两孔洞中心之间的距离等于 5 个孔洞半径.定义两个孔洞中心连线与冲击加载方向之间的夹角为 θ ,我们共对四种不同的 θ 值($0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$)进行了计算机模拟,冲击加载强度均为 15.7 GPa.

冲击加载后在材料内部产生拉伸应力的实现过程如下所述:首先选定计算模型最左端两层 $[100]$ 面上原子作为活塞原子,给活塞原子施加沿 x 方向的恒定速度使其在材料内部产生沿 x 方向传播的压缩冲击波.当压缩冲击波传播到 x 方向另一个自由面后,取消恒定的活塞原子速度,使左端恢复为自由面,此时 x 方向两个自由面将同时产生一个稀疏波,这两个稀疏波将在计算模型中心相遇并相互作

用产生拉伸应力,随着稀疏波的传播拉伸应力区逐渐扩大,孔洞将在此拉伸应力作用下开始增长.当稀疏波继续传播并相互作用直至结束孔洞周围的拉伸应力状态时,我们的计算模拟过程也随之结束.

3. 计算结果和讨论

3.1. 孔洞贯通的塑性机理

图 1 给出了 $\theta = 60^\circ$ 时不同时刻模拟结果的原子图像,采用中心对称分析方法分析计算体系中的位错、层错等缺陷结构^[20].图中灰色的原子表示位于孔洞表面的原子,浅灰色的原子表示的是位错、层错等缺陷结构.图 1(a)为模拟开始的初始时刻,图 1(b)对应模拟开始后 10.0 ps,此时孔洞周围区域仍处于压缩状态(模拟开始后约 8.6 ps 冲击波传播到 x 方向的另外一个自由面,在 10.0 ps 时,两个自由面反射的稀疏波还没有交汇).在冲击压缩阶段,我们发现 fcc 结构中四个等效的 $\{111\}$ 滑移面均被激活,位错首先在迎着冲击方向的孔洞表面一侧开始成核,随着冲击波扫过整个孔洞,位错同样会在背着冲击方向的孔洞表面成核,然后位错将在四个 $\{111\}$ 面上运动,由于 fcc 铜中全位错容易分解为部分位错^[21],在部分位错运动过后的区域,观察到了层错结构.由于不同位错结构能量的差别,在两个相邻的 $\{111\}$ 面上运动的两个部分位错会发生反应,形成一个能量更低更稳定的 $\langle 110 \rangle$ 型压杆位错,因为此种位错不能在 fcc 结构的滑移面上运动,故它的存在将阻碍先前位错环的自由扩展,使位错只能在两个 $\langle 110 \rangle$ 方向所形成的近似扇形区域运动.虽然剪切型和棱锥型的位错结构均被提出作为孔洞增长的机理(位错反向运动则对应孔洞塌缩)^[22],但我们在孔洞塌缩过程中只观察到了剪切型的位错环,这一点也和 Davila 等人报道的结果一致^[23].随着压缩应力的持续作用,位错环将不断扩展(同时伴随着孔洞塌缩),最终,不同孔洞周围发射的位错环将部分相互交叠(见图 1(b)).

随着 x 方向两个自由面反射的稀疏波向模拟体系中心传播,它们将相遇并在体系中心区域开始形成拉伸应力,此拉伸应力区随着冲击波的传播而不断扩展.图 1(c)显示的是模拟开始后 18.0 ps 的原子图像,此时孔洞周围区域完全处于拉伸应力区,观察发现,随着拉伸应力区随时间的不断扩展,压缩

阶段在孔洞周围产生的位错有一部分由于反向运动而恢复为完整的晶体结构,同时孔洞表面区域将开始产生新的位错结构(见图 1(c)).随着位错不断向孔洞周围区域扩展,两个孔洞周围的塑性变形区相

互交叠和作用,从而在孔洞之间的区域产生较大的塑性变形区(见图 1(d)).随着孔洞在拉伸应力持续作用下增长,塑性变形区开始断裂,由此使孔洞贯通.

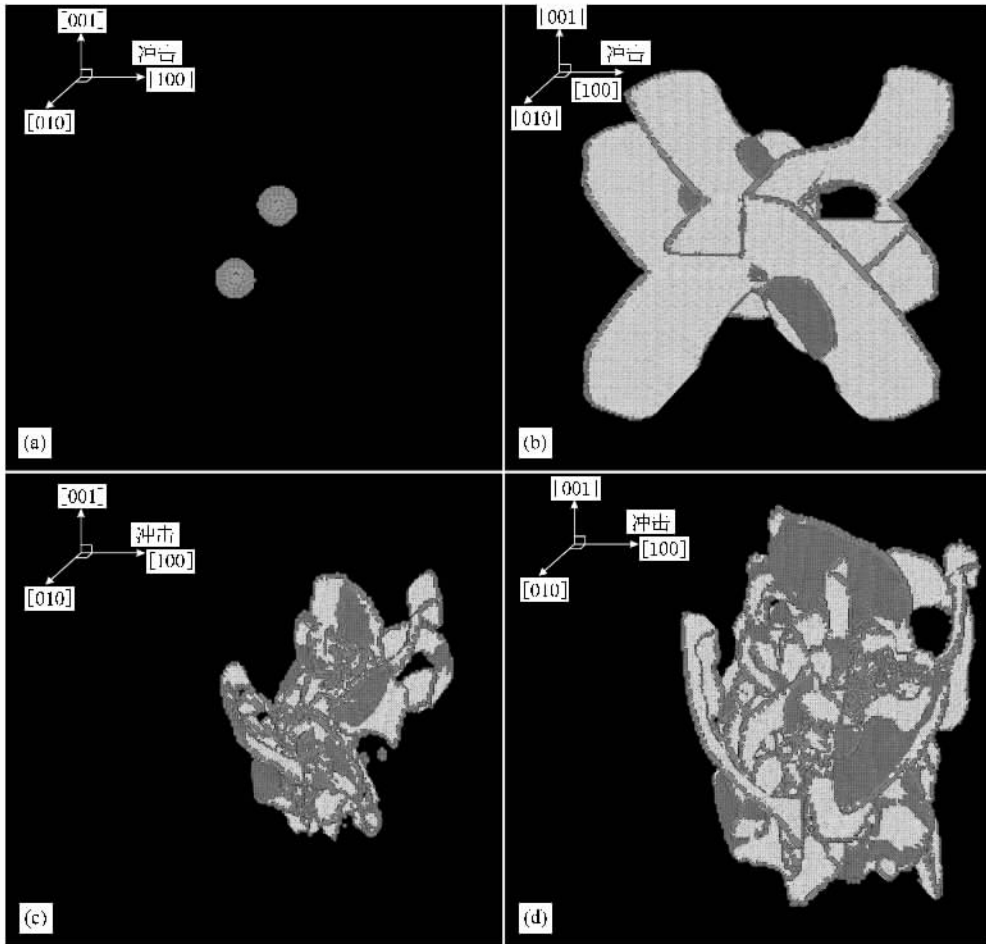


图 1 $\theta = 60^\circ$ 时孔洞周围位错结构演化 (a) 0 ps (b) 冲击加载后 10.0 ps (c) 冲击加载后 18.0 ps (d) 冲击加载后 21.4 ps

3.2. 孔洞构型对贯通过程的影响

以上我们对孔洞在一个完整的压缩和拉伸过程中的演化过程进行了描述,本节将着重讨论不同的空间构型对孔洞贯通过程的影响.

为了清楚观察孔洞之间相互贯通的微观过程,我们只给出了穿过孔洞中心的 xoz 面的一个薄切片(厚度约为 0.37 nm),图中同样只显示了缺陷原子.图 2 所示为 $\theta = 0^\circ$ 时的计算结果,初始时刻的构型如图 2(a) 所示.图 2(b) 所示的时刻为模拟开始后 18.0 ps,此时孔洞处于拉伸应力区,可见此时孔洞体积比初始时刻有所增大,同时孔洞表面有位错发射,这些位错在 fcc 结构的 $\{111\}$ 面上向孔洞外运动.在冲击加载后 21.4 ps(图 2(c)) 此时刻对应于两稀疏波在

x 方向自由边界反射的压缩波基本交汇,从而结束了孔洞附近区域的拉伸应力状态,孔洞体积进一步增加,每个孔洞表面发射的位错相互交叠和作用,但我们看到,两个孔洞最终并没有出现完全贯通.对 $\theta = 30^\circ$ 时孔洞构型的模拟结果,观察发现其规律和 $\theta = 0^\circ$ 时相类似,两个孔洞最终也没有出现贯通现象,故在此没有给出详细的原子结构示意图.

$\theta = 60^\circ$ 时的模拟结果如图 3 所示,发现在模拟开始后 19.2 ps 左右,两个孔洞已经完全贯通,初始两个分立的球形孔洞最终完全贯通成为一个哑铃形状的大孔洞,在拉伸应力的持续作用下,这个哑铃形状的孔洞体积继续增大,其周围有更多的位错从孔洞表面区域发射出来(见图 3(c)).

当 $\theta = 90^\circ$ 时,模拟结果如图 3 所示,它的过程基

本与 $\theta = 60^\circ$ 时类似,不同之处在于:在冲击加载后 19.2 ps 时, $\theta = 90^\circ$ 时的两个孔洞还没有贯通,而 $\theta = 60^\circ$ 时已经完全贯通.在冲击加载后 21.4 ps 时,两个孔洞才基本完全贯通,孔洞贯通的方向均和两孔洞中心连线的方向一致(见图 3,图 4).这个现象说明,两个孔洞在 $\theta = 60^\circ$ 时比 $\theta = 90^\circ$ 时更容易相互贯通.显微实验观察表明,孔洞贯通过程大致有两种微观过程^[21]:第一种为分立的孔洞首先自由增长,当增长到一定程度后开始相互贯通,这种现象多在铝、铜等

延性金属材料中观察到;第二种贯通过程为首先在初始孔洞之间的区域出现应变局域化现象,通常这些区域内会形成一些新的较小孔洞,随后这些小的孔洞首先逐渐相互贯通,最后导致初始分立的孔洞之间最终贯通,这种现象多在钢等脆性材料中出现.我们对典型延性金属材料铜中孔洞贯通过程进行的计算模拟,发现在初始孔洞之间的区域内没有新孔洞成核现象,因此它与显微实验观测得到的延性材料中孔洞贯通机理一致.

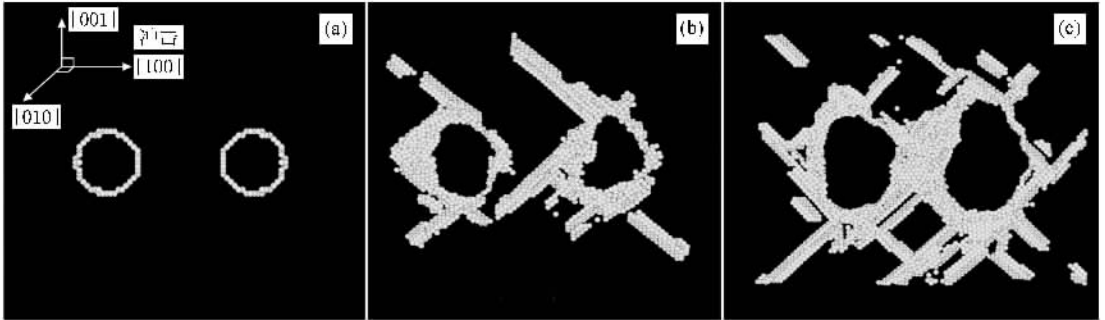


图 2 $\theta = 0^\circ$ 时孔洞演化示意图 (a) 0 ps (b) 18.0 ps (c) 21.4 ps

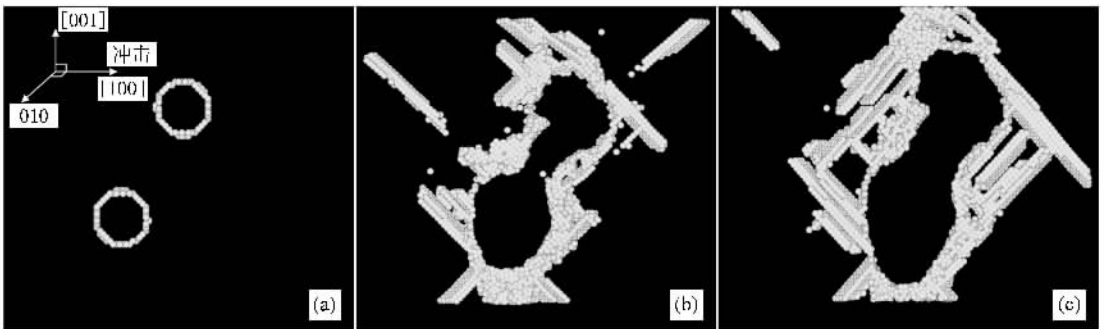


图 3 $\theta = 60^\circ$ 时孔洞演化示意图 (a) 0 ps (b) 19.2 ps (c) 21.4 ps

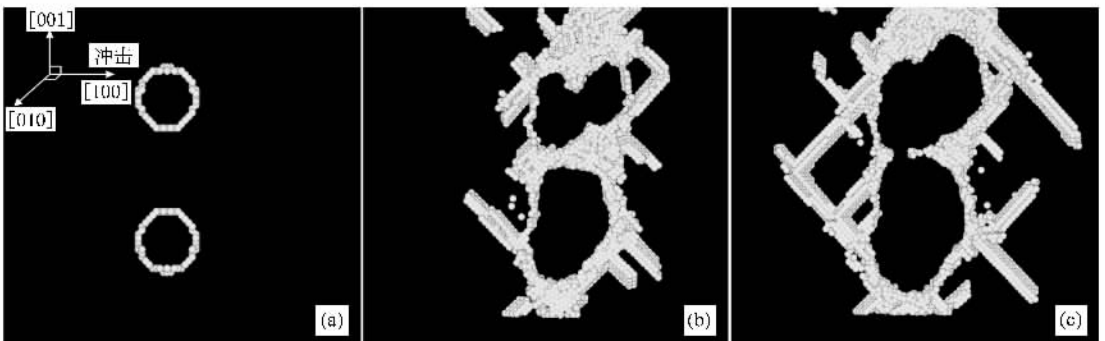


图 4 $\theta = 90^\circ$ 时孔洞演化示意图 (a) 0 ps (b) 19.2 ps (c) 21.4 ps

3.3. 讨 论

从以上模拟结果可以看到,在拉伸阶段下,首先

是单孔洞开始发生塑性变形,随后单孔洞周围的塑性变形区开始发生交叠和相互作用,最终出现孔洞贯通现象,因此单孔洞周围位错成核特征必然会影

响后续的孔洞贯通过程. 我们认为当两个孔洞周围最易发射的位错平行于两孔洞之间连线, 并且最易发射位错位置距离两孔洞之间连线距离最近时, 两孔洞之间发射的位错容易发生交叠, 交叠区域强度明显减弱, 容易断裂而造成孔洞间的贯通.

根据以上分析可知, 位错运动主要是因为位错滑移面上的分解剪切应力造成的, 需要通过分析两孔洞间位错滑移面上的分解剪切应力分布解释孔洞间贯通原因. 图 5(a) 给出了两孔洞冲击加载的三维模型示意图, AF 沿着 x 轴, 即冲击加载方向, A, B 表示球形孔洞的初始位置, 位于 $AFMN$ 平面内, AB 的距离等于 5 倍的孔洞半径, D 点表示孔洞中心 B 在平面 $AGHF$ 上的投影. 可以看到, 在初始情况下, 由于孔洞中心所在的平面 $AFMN$ 均不和 fcc 结构的滑移面垂直, 所以无法直接利用孔洞周围剪切应力的二维模型进行分析, 但对于平面 $AGHF$ 而言, 它和 (111) 滑移面互相垂直, 因此可以在 $AGHF$ 平面上直接利用二维模型进行分析, 图 5(b) 给出了在平面 $AGHF$ 上进行分析的示意图, 最后可以通过确定的空间位置关系确定孔洞间连线与冲击加载的夹角.

根据已有的位错在单孔洞周围的成核及运动特征, 滑移面上剪切应力 τ_d 可以用以下两个式子^[13]:

$$\tau_d = T_0 |f(r, \theta)|, \quad (1)$$

$$f(r, \theta) = \frac{k+1}{2} \left(\frac{R}{r}\right)^2 \sin[\alpha(\alpha - \theta)] + \frac{k-1}{2} \left\{ \sin 2\alpha + \left[3\left(\frac{R}{r}\right)^4 - 2\left(\frac{R}{r}\right)^2 \right] \times \sin(2\alpha - 4\theta) \right\}, \quad (2)$$

式中 T_0 为拉伸应力大小, R 为孔洞半径, r, θ 为极坐标, α 为滑移面和冲击加载方向夹角, $k = \frac{\nu}{1-\nu}$ (k 为两轴应力比, ν 为泊松比, 取 1/3).

从以上公式可知, 在沿 [100] 晶向冲击加载时, 位错首先在 $\theta_1 = 82^\circ$ 处的孔洞表面周围区域成核和运动 (另一个孔洞对应于 262° , 故 $\theta_2 = 98^\circ$). 图中 $\alpha \approx 35^\circ$ 是滑移面和冲击加载方向的夹角. 根据图 5(a) 和 (b) 中所示的空间位置关系, 我们最后可以计算得到此时图 5(b) 中 $\varphi \approx 57^\circ$, 图 5(a) 中的 $\angle BAC \approx 66^\circ$, 由此可以知道孔洞中心连线与冲击加载方向之间夹角约等于 66° 时, 孔洞之间最容易相互贯通, 我们前面给出的四组计算模拟结果显示 $\angle BAC$ 为 60° 时, 孔洞之间最容易发生贯通, 因此分解剪切应力分析充分解释了模拟结果. 同时我们的计算模拟结果也说明, 在考虑单晶体中孔洞贯通问题时, 必须要考虑到材料晶格尺度的离散性, 以及具体晶格结构发生塑性变形的微观过程, 只有考虑到这些因素, 才能更深刻地了解孔洞之间贯通过程的微观物理本质.

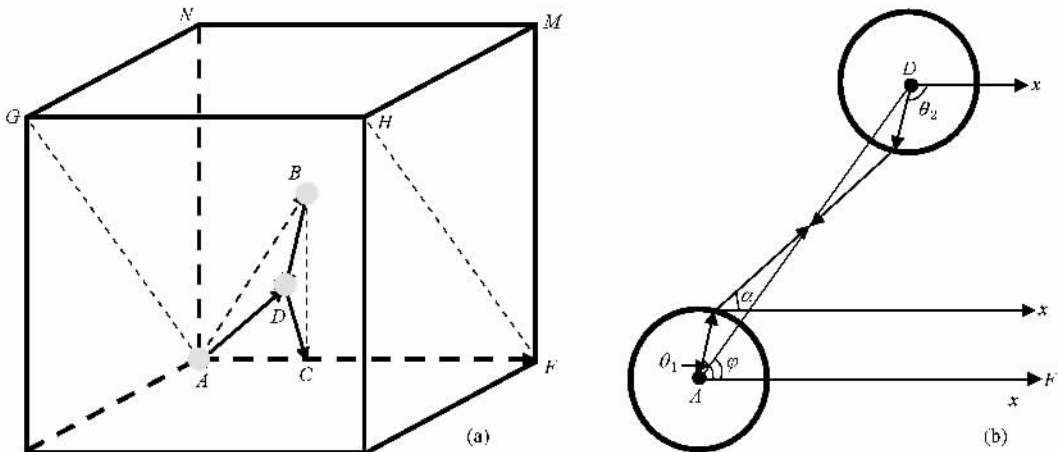


图 5 模型示意图 (a) 三维模型 (b) 二维模型

4. 结 论

用分子动力学方法对单晶铜中双孔洞贯通过程的计算模拟表明, 在冲击压缩和拉伸阶段, 孔洞周围

通过发射剪切型位错环使孔洞塌缩 (位错向内运动) 和生长 (位错向外运动). 在拉伸阶段, 位错首先在单个孔洞周围成核和运动, 随后两个孔洞周围的塑性变形区出现交叠和相互作用, 最终导致孔洞之间开始贯通. 对不同空间构型的双孔洞进行计算模拟, 发

现两个孔洞中心连线和冲击加载方向之间的夹角为 60° 时,两个孔洞最容易贯通.根据已有的单孔洞周围位错成核和运动的规律,我们对这一现象进行了理论解释,二者符合得比较好.模拟结果说明,在微观尺度上考虑孔洞贯通问题时,必须要考虑具体晶

格结构发生塑性变形的特征.

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] 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] Pardoen T , Hutchinson J W 2000 *J. Mech. Phys. Solids* **48** 2467
- [4] Gao X S , Kim J 2006 *Int. J. Solids Struct.* **43** 6277
- [5] Klocher H , Tvergaard V 2003 *Int. J. Mech. Sci.* **45** 1283
- [6] Potimiche G P , Hearndon J L , Horstemeyers M F , Ling X W 2006 *Int. J. Plasticity* **22** 921
- [7] Schacht T , Untermann N , Steck E 2003 *Int. J. Plasticity* **19** 1605
- [8] Horstemeyer M F , Matalanis M M , Sieber A M , Botos M L 2000 *Int. J. Plasticity* **16** 979
- [9] Seppala E T , Belak J , Rudd R E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 245503
- [10] Seppala E T , Belak J , Rudd R E 2005 *Phys. Rev. B* **71** 064112
- [11] Potimiche G P , Horstemeyer , Wagner G J , Gullett P M 2006 *Int. J. Plasticity* **22** 257
- [12] Zhu W J , Song Z F , Deng X L , He H L , Cheng X Y 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024104
- [13] Song Z F , Zhu W J , Deng X L , He H L 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 3041
- [14] 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]
- [15] 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]
- [16] Timothy C G , Holian B L , Peter S L 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 5351
- [17] Oyeon K 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 3239
- [18] Mishin Y , Mehl M J , Papaconstantopoulos D A , Voter A F , Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [19] Allen M P , Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford : Clarendon Press) p341
- [20] Kelchner C L , Plimpton S J , Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [21] Hirth J P , Loyshe J. 1982 *Theory of Dislocations* (New York : Wiley) p267—275
- [22] Lubarda V A , Schneider M S , Kalantar D H , Remington B A , Meyers M A 2004 *Acta Mater.* **52** 1397
- [23] Davila L P , Erhart P , Bringa E M , Meyers M A , Lubarda V A , Schneider M S , Becker R , Kumar M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 161902

Microscopic mechanism of void coalescence under shock loading^{*}

Deng Xiao-Liang¹⁾ Zhu Wen-Jun^{1,2)†} Song Zhen-Fei¹⁾ He Hong-Liang¹⁾ 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, Sichuan University, Chengdu 610064, China*

(Received 24 October 2008; revised manuscript received 15 November 2008)

Abstract

The influence of void configuration on void coalescence in single crystal copper under shock loading along [100] direction has been investigated with molecular dynamics (MD) simulation. The results reveal that the voids collapse and grow by means of emission of shear dislocation loops. In the tension stage, the voids first grow independently, then the plastic zone around the voids begin to interact and overlap, leading to the void coalescence. The pattern of void coalescence observed in our simulations coincides with the microscopic experimental results. We calculated for four different configurations, characterized by the angle (θ) formed by shock direction and the line connecting the two centers of voids, and found that among the four configurations, the coalescence of the voids prefers to occur where θ is 60° . Based on the resolved shear stress model around the void, we can clearly explain the simulation results.

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

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

^{*} Project supported by the Science and Technology Foundation of State Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics (Grant Nos. 9140C6703010804, 9140C6701010902), the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. 2007A01004), and the NSAF (Grant No. 10876014).

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