

单晶 Cu 冲击加载及卸载下塑性行为的微观模拟^{*}

何安民[†] 邵建立 秦承森 王 裴

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2008 年 6 月 12 日收到, 2008 年 12 月 30 日收到修改稿)

使用分子动力学方法对室温下单晶铜沿 [001] 和 [111] 方向冲击加载及卸载下的塑性行为进行了模拟, 得到了 Hugoniot 关系以及冲击熔化压力, 与实验基本符合. 加载过程中, 较高的初始温度有利于位错的形核与发展. 通过对冲击波在自由表面卸载过程的模拟和分析发现, 卸载过程呈现“准弹性卸载行为”; 沿 [001] 方向卸载后大量不全位错环与堆积层错消失, 而沿 [111] 方向卸载后只有少量层错消失, 部分层错甚至会发展扩大.

关键词: 分子动力学, 冲击波, 塑性

PACC: 7115Q, 6842, 6170G

1. 引 言

材料在极端条件下的动力学响应过程, 如冲击塑性、冲击相变、层裂等一直是冲击波物理的研究热点. 长期以来, 人们已进行了大量的相关实验研究^[1,2], 但基于微观机理的理论研究工作还很不成熟. 随着计算机水平的迅速发展, 人们已能够在原子层次上理解材料的动态响应过程, 其中基于确定性模拟的分子动力学 (MD) 方法成为一种非常重要的模拟手段.

早在 20 世纪 70 年代末期, Mogilevsky 等^[3]使用静态压缩的方法模拟冲击波, 观察到材料结构的变化, 揭示了材料在被压缩状态下会产生位错以降低偏应力. 随后, 人们对这种缺陷产生的细节以及本质开展了大量的工作^[4-10]. Holian 等^[4,5]对理想面心立方 (fcc) 单晶沿 [001] 方向的冲击研究表明, 塑性是由堆积层错的形核并发展所引起. 随后人们对单晶 Cu 沿不同方向加载下的冲击塑性行为分别进行了研究^[6-10], 发现了明显的各向异性. Germann 等^[7,8]研究了冲击波分别沿 [100] 与 [111] 方向产生冲击塑性的行为. 文献 [7,8] 指出, 沿 [001] 方向传播的冲击波只激发一种类型的不全位错, 形成一个快速扩展的不全位错环, 经过的区域留下堆积层错并产生一个过载的塑性波, 使得沿 [001] 方向无弹性先

驱波, 而对于 [111] 方向, 两种类型的不全位错都被激发, 发生位错反应后形成一个全位错环, 全位错环可以交滑移, 运动速度也相对较慢. 从微观机制上定性地解释了 [001] 方向与 [111] 方向冲击塑性行为的不同. 此外, 人们还对材料包含孔洞等微缺陷下的塑性行为进行了大量的模拟分析^[11-13].

本文使用 MD 方法对室温下单晶铜沿 [001] 方向和 [111] 方向冲击加载以及卸载下的塑性行为进行了模拟, 得到了 Hugoniot 关系及冲击熔化压力, 与实验基本一致. 与零温下的模拟结果^[6-9]相比, 较高的初始温度有利于位错的形核与发展, 可以更快地形成稳定的弹塑性双波结构. 对加载波在自由表面卸载过程的模拟发现, 存在“准弹性卸载行为”, 即弹性卸载波与塑性卸载波没有发生分离, 这与实验观察一致. 冲击波沿 [001] 方向卸载后大量不全位错环与堆积层错消失, 材料残留一定微变形, 而 [111] 方向卸载后只有少量层错消失, 部分层错甚至会发展扩大.

2. 模型与分析参数

2.1. 势函数

本文采用文献 [14] 给出的嵌入原子方法 (embedded atom method, EAM). EAM 势是基于有效

^{*} 中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2007B09012, 2008B0101008) 资助的课题.

[†] E-mail: he_anmin@iapcm.ac.cn

介质理论的半经验多体势函数. 和对势相比, EAM 势更能准确反映金属中原子之间的相互作用, 其形式如下:

$$V = \sum_{j>i} \Phi(q_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i^T). \quad (1)$$

(1) 式等号右端第一项是原子 i 与 j 之间的短程势能, 采用传统的对势形式, 其中 q_{ij} 是原子 i 与 j 之间的距离; $F_i(\rho)$ 为嵌入能, $\rho_i^T = \sum_{i \neq j} \rho_j(q_{ij})$ 是某处没有原子 i 时的电子密度.

2.2. 计算模型与加载方法

对于沿 [001] 方向的加载情况, 初始构型为 $30a \times 20a \times 100a$ (a 为单晶 Cu 的晶格常数), 共有 2.4×10^5 个原子. 这个规模已经能够模拟冲击 Hugoniot 以及早期的冲击塑性, 与采用更大的初始样品的模拟结果基本一致. x, y, z 坐标轴分别对应 [100], [010] 和 [001] 方向. 初始温度为 300 K, 初始压力为零. 沿 x 和 y 方向内采用周期性边界条件, 首先将样品弛豫 2 ps, 之后沿 z 方向加载冲击波, 冲击波的产生采用“动量反射”法^[5], 即令活塞以一定速度(波后粒子速度)沿 z 方向压缩初始样品产生冲击波, 计算步长为 2 fs.

对于沿 [111] 方向加载情况, 初始构型大小为 $36a \times 18a \times 100a$, 共 259200 个原子. x, y, z 坐标轴分别对应 [110], $[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 [111] 方向. 其余控制参数以及产生冲击波的方法与沿 [001] 方向加载相同.

2.3. 中心对称参数

通常情况下单晶 Cu 为 fcc 结构, 属于中心对称材料, 我们使用中心对称参数对模拟结果进行分析. 中心对称参数的定义如下^[15]:

$$P = \sum_{i=1}^6 |R_i + R_{i+6}|^2, \quad (2)$$

式中, R_i 和 R_{i+6} 是 fcc 结构中原子和与它最近邻所成的相等和相反的 6 个键. 显然, 处于完整的 fcc 结构或者发生弹性变形的原子 P 值为零, 而对于不同类型的缺陷(表面、位错、堆积层错等) P 为非零值, 根据 P 值的大小可以将不同的缺陷区分开来. 对于 Cu, 当 $0.005 \text{ nm}^2 < P < 0.035 \text{ nm}^2$ 时代表不全位错, 当 $P > 0.035 \text{ nm}^2$ 而小于表面原子所对应的值时代表堆积层错. 沿 [001] 方向, 表面原子的 P 值为 0.26 nm^2 , 而沿 [111] 方向, $P = 0.19 \text{ nm}^2$. 因此, 根据 P 值的大小, 可将模拟结果中的弹性变形原子、不全位错以及堆积层错区分开来.

3. 结果分析

3.1. 加载过程

图 1 给出活塞速度为 1.25 km/s 分别沿 [001] 和 [111] 方向产生的冲击波速度波形, 此时冲击压力约为 60 GPa, 已超过 Hugoniot 弹性极限 (HEL). 如图 1 所示, 沿 [001] 方向, 塑性波很快追赶上弹性波, 并形成塑性冲击波, 而沿 [111] 方向, 弹性波与塑性波分裂, 形成稳定的双波结构.

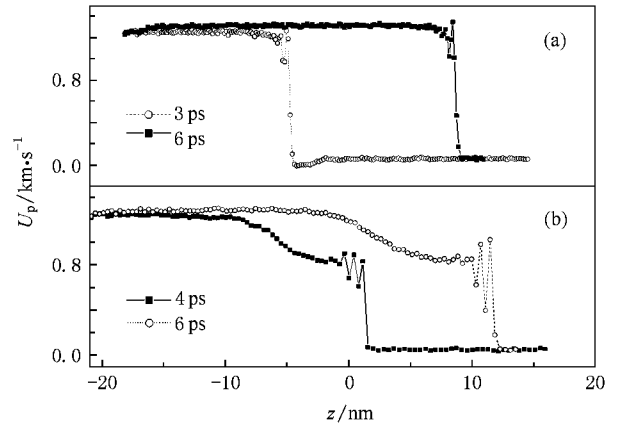


图 1 加载过程中的粒子速度波形 (a) [001] 方向 (b) [111] 方向

图 2 是沿不同冲击方向下的压力 P 以及剪应力 P_{shear} 曲线. 对于 [001] 方向, P_{shear} 随着压力的上升而迅速降低, 接近于零. 对于 [111] 方向, P_{shear} 在压力第二次上升的时刻开始减小, 显然这是由于在塑性波头附近位错环形核并发展, 从而释放了剪应力.

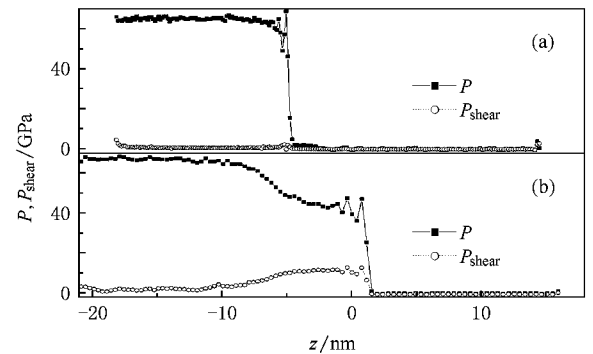


图 2 加载过程中的压力与剪应力波形 (a) [001] 方向, (b) [111] 方向

图 3 是沿 [111] 方向冲击时, 不同初始温度下的

剪应力 P_{shear} 波形, 冲击速度仍然为 1.25 km/s. 从图 3 可以看出, 温度为 300 K, 在 1.1 ps 时剪应力明显降低; 温度为 30 K, 在 1.2 ps 时剪应力依然无明显变化, 在 1.9 ps 时才明显减小. 这说明较高的初始温度有利于位错的形核与发展. 以上在模拟过程中将样品初始温度设为 300 K, 也是因为温度效应能促进位错的产生, 缩短了冲击波过后塑性变形至平衡的时间, 使得沿 [111] 方向冲击时能更快地形成稳定的双波结构, 便于各种宏观量的统计.

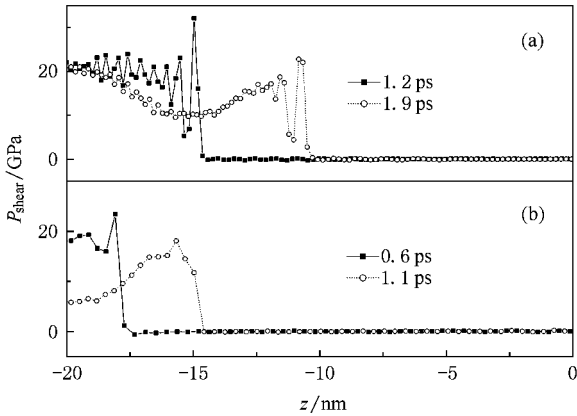


图 3 沿 [111] 方向冲击下不同初始温度下的剪应力曲线 (a) 300 K (b) 30 K

[001] 与 [111] 方向呈现出的不同的塑性行为也反映在二者的 Hugoniot 关系上. 图 4 给出了不同冲击压力下的冲击波波速 U_s 与波后粒子速度 U_p 的关系, 实线为多晶 Cu 的实验结果. 模拟中 HEL 值约为 40 GPa, 远高于实验值, 文献 [4] 的结果也类似. 这是由于模拟样品是理想单晶, 而实验材料多是含

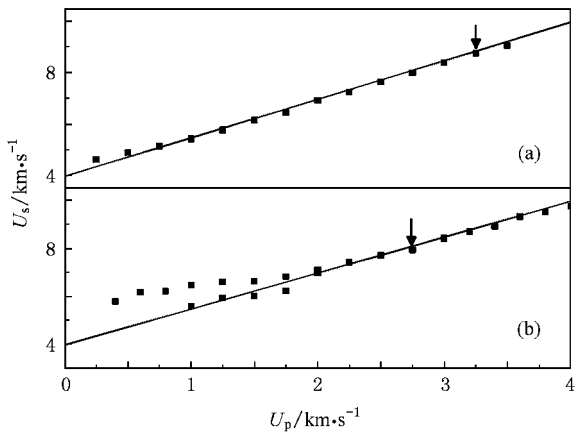


图 4 不同冲击方向下的 U_s-U_p 关系 (a) [001] 方向 (b) [111] 方向

有缺陷的多晶, 当材料中加入微缺陷时能明显降低 HEL 值^[3]. 如图 4(a) 所示, 对于 [001] 方向 U_s 与 U_p 近似呈线性关系, 与实验结果基本符合. 如图 4(b) 所示, 对于 [111] 方向, 当冲击压力高于 HEL 值时, 出现双波结构, 随着冲击压力升高, 弹性波波速随粒子速度增加的斜率逐渐降低, 弹性压缩区域不断减小. 当冲击压力高于一定值时, 塑性波追赶上弹性波, 以致二者无法区分. 当冲击压力更高时, 可出现冲击熔化现象. 对于 [001] 方向, 冲击熔化压力约为 240 GPa, 对应的冲击速度为 3.25 km/s; 对于 [111] 方向, 冲击熔化压力约为 200 GPa, 对应的冲击速度为 2.75 km/s (如图 4 中箭头所指), 与多晶 Cu 的实验冲击熔化压力 (230 GPa)^[16] 基本符合.

3.2. 卸载过程

下面对冲击波在自由表面卸载时的塑性行为进行分析. 图 5 是冲击波在自由表面卸载至某一时刻的粒子速度波形. 由加载过程的分析结果可知, 沿 [001] 方向加载时冲击波为单波, 从图 5(a) 可以看出此时卸载波明显为单波结构. 沿 [111] 方向加载时冲击波为双波结构, 即弹性波头后面跟随一个塑性波. 而从图 5(b) 可以看出卸载波似乎出现了双波结构, 但两个波之间光滑过渡, 没有出现稳定的平台, 无法将弹性卸载波与塑性卸载波有效地加以区分.

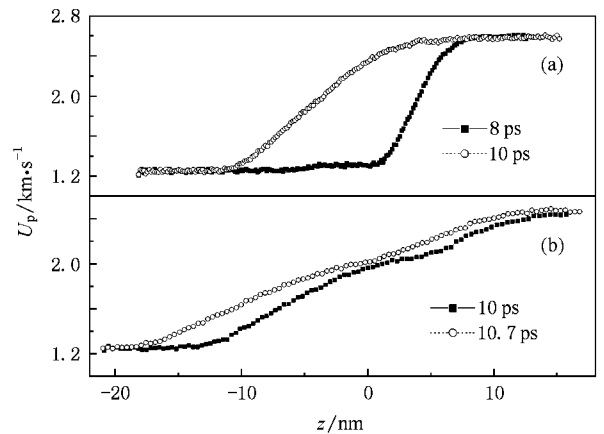


图 5 卸载过程中的粒子速度波形 (a) [001] 方向 (b) [111] 方向

按照理想弹塑性理论, 由于弹性纵波波速大于塑性波波速, 因此在卸载过程中塑性卸载波要比弹性卸载波传播得慢, 从而会导致两波阵面在传播过程中发生完全分离, 在速度曲线上的弹性卸载波和塑性卸载波之间将会出现平台, 形成完全分离的双

波结构. 而实验上^[17]观察到的是光滑过渡的卸载波, 无法区分弹性卸载部分与塑性卸载部分. 这种偏离理想弹性特性的卸载行为被称为准弹性卸载^[18,19], 准弹性卸载行为的物理机制目前尚不明确. Johnson 等^[18]建立了基于位错塞积和钉扎位错环的细观模型, 对准弹性卸载行为进行了模拟, 得到了一些与实验相符的结果, 但有些量仍然与实验有很大的偏离. 而从我们的 MD 模拟结果中可以看出, 卸载过程中出现了类似的“准弹性卸载行为”. 在对卸载过程中的微观结构的演化进行粗略分析时, 大致可以看出弹性卸载时就伴随着一部分位错环的运动.

3.3. 微观分析

选择初始温度为 30 K 的样品, 分析沿不同晶向的加载及卸载过程中单晶 Cu 中的位错环以及堆积

层错等微结构的变化. 选择较低的初始温度是为了在使用中心对称参数对样品进行分析时降低热涨落的影响.

图 6 是冲击波沿 [001] 方向和 [111] 方向加载时, 在不同加载时刻单晶 Cu 的微结构示意图. 使用中心对称参数对样品进行了分析, 区分出了堆积层错 (图中深色区域). 加载波过后, 不全位错环形核并沿着密排面传播, 位错环后的区域就形成堆积层错. 从图 6 可以看出, 随着冲击波的传播, 波后的缺陷结构相对没有发生变化. 通过对微结构更仔细的分析发现 [001] 方向的波后区域形成一系列不全位错环并沿着 4 个 {111} 族等效滑移面快速扩展, 位错环内部为堆积层错; 而对于 [111] 方向, 波后区域出现的是可以交滑移的全位错环^[8], 大量的位错环扩展、交滑移、发生反应, 形成了复杂的三维微缺陷, 如图 6(c) 所示.

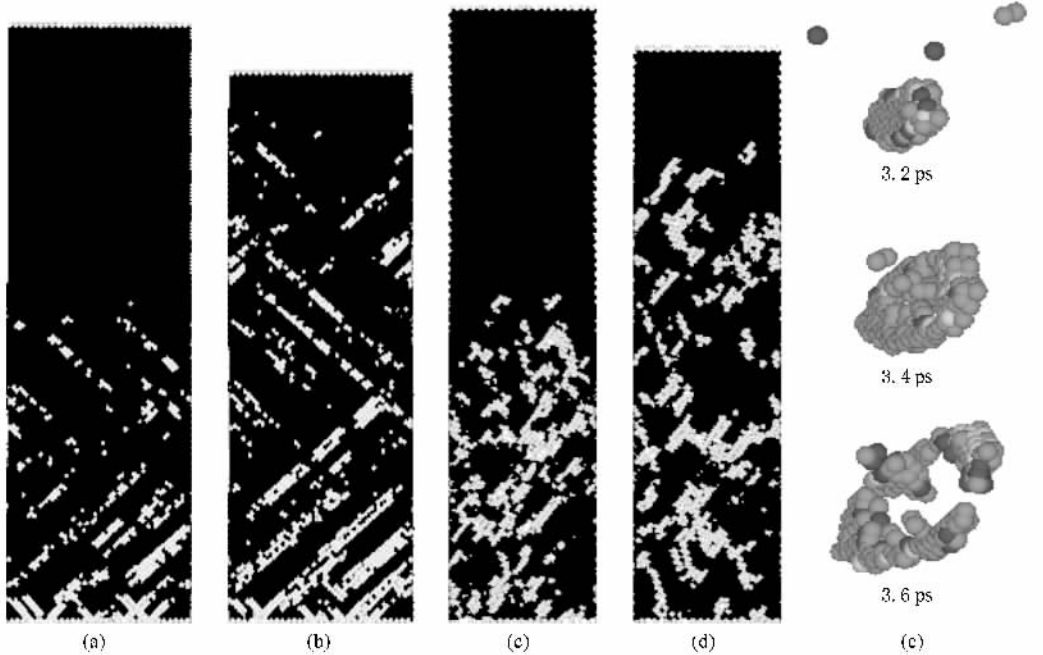


图 6 冲击波传播所形成的微结构 (a) [001] 方向 4 ps; (b) [001] 方向 6 ps; (c) [111] 方向 4 ps; (d) [111] 方向 6 ps. 其中深色代表位错以及堆积层错 (e) 全位错环形核并扩展过程示意图

图 7 所示为冲击波在自由面卸载后形成的缺陷结构. 从图 7(a) 中可以看出, 卸载波过后大量的位错环逐渐收缩, 堆积层错随着位错环的收缩而减小直至消失. 从图 7(b) 中看出, 沿 [111] 方向加载的冲击波在自由表面卸载后, 有少量的堆积层错消失, 也有部分堆积层错反而逐渐扩大. 这与沿 [001] 方向的卸载过程明显不同. 此外, 沿 [001] 方向卸载后, 虽然堆积层错消失了, 但材料会留下一定的微变形.

4. 结 论

应用 MD 方法对单晶 Cu 沿 [001] 方向和 [111] 方向冲击加载及卸载下的塑性行为分别进行了微观模拟. 通过对模拟结果的分析 and 讨论, 得到以下主要结论:

1) 模拟得到的 Hugoniot 关系及冲击熔化压力

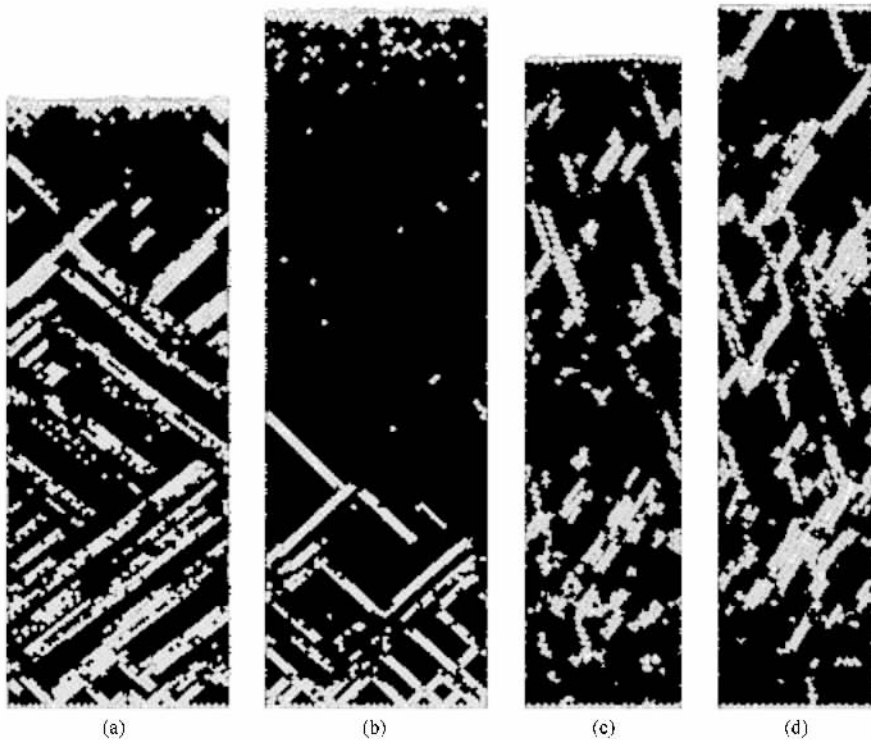


图 7 冲击波在自由面卸载后所形成的微结构 (a) [001] 方向 8 ps (b) [001] 方向 11 ps (c) [111] 方向 8 ps (d) [111] 方向 11 ps

值都与实验结果基本一致。

2) 初始温度的升高有利于位错的形核与发展,并能更快地形成稳定的塑性波。

3) 模拟了冲击波在自由表面的卸载过程,获得了“准弹性卸载行为”,与实验观测结果相一致。从微观原子层次上对这种行为进行了初步的讨论。

4) 冲击波沿 [001] 方向卸载后大量的堆积层错

消失,但材料会留下一定的微变形;而沿 [111] 方向卸载后有少量的堆积层错消失,部分堆积层错逐渐扩大。这与沿 [001] 方向卸载时微结构的行为明显不同。

在卸载过程中出现的“准弹性卸载行为”的微观机制以及沿不同晶向卸载时微结构的演化过程都还需要更深入的研究。

- [1] Meyers M A , Gregori F , Kad B K , Schneider M S , Kalantar D H , Remington B A , Ravichandran G , Boehly T , Wark J S 2003 *Acta Mater.* **51** 1211
- [2] Schneider M S , Kad B , Kalantar D H , Remington B A , Kenik E , Lubarda V , Meyers M A 2005 *Int. J. Impact Eng.* **32** 473
- [3] Mogilevsky M A , Mynkin A O 1978 *Combust. Explos. Shock Waves* **14** 680.
- [4] Holian B L 1988 *Phys. Rev. A* **37** 2562
- [5] Holian B L , Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 2085
- [6] Bringa E M , Cazamias J U , Erhart P 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 3793
- [7] Germann T C , Holian B L , Lomdahl P S 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 5351
- [8] Germann T C , Tanguy D , Holian B H , Lomdahl , Mareschal M , Ravelo R 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2609
- [9] Cao B Y , Bringa E M , Meyers M A 2007 *Metall. Mater. Trans. A* **38** 2681
- [10] Tanguy D , Mareschal M , Lomdahl P S , Germann T C , Holian B L , Ravelo R 2003 *Phys. Rev. B* **68** 144111
- [11] 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]
- [12] Yang Q L , Zhang G C , Xu A G , Zhao Y H , Li Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 940 (in Chinese) [杨其利、张广才、许爱国、赵艳红、李英骏 2008 物理学报 **57** 940]
- [13] Davila L P , Erhart P , Bringa E M , Meyers M A , Lubarda V A , Schneider M S , Kumar M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 161902
- [14] Mei J , Davenport J W , Fernando G W 1991 *Phys. Rev. B* **43** 4653
- [15] Kelchner C L , Plimpton S J , Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085

- [16] Jeong J W , Chang K J 1999 *J. Phys. : Condens. Matter* **11** 3799
- [17] Dremin A N , Hanel G I , Chernikova O B 1981 *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **22** 558
- [18] Johnson J N , Hixson R S , Gray G T , Morris C E 1992 *J. Appl. Phys.* **72** 429
- [19] Huang H , Asay J R 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 033524

Molecular dynamics study on the plastic behavior of monocrystalline copper under shock loading and unloading *

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

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China*)

(Received 12 June 2008 ; revised manuscript received 30 December 2008)

Abstract

Molecular dynamics simulations were used to study the plastic behavior of copper monocrystal under shock loading and unloading. We obtained the Hugoniot relation for both [001] and [111] orientations and the melting pressure , which turns out to be in agreement with experiment. The results showed that higher initial temperature increases the possibility for the dislocation loop generate and expansion. The release behavior after the shock wave reaching the back of the sample was also analyzed. We found that the release behavior was quasi-elastic and most of the stacking-fault networks disappear behind the release wave along [001] orientation while few stacking faults disappear along [111] orientation.

Keywords : molecular dynamics , shock wave , plasticity

PACC : 7115Q , 6842 , 6170G

* Project supported by the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. 2007B09012 , 2008B0101008).

[†] E-mail : he_anmin@iapcm.ac.cn