

冲击波在纳米金属铜中传播的分子动力学模拟^{*}

陈开果¹⁾ 祝文军^{1)3)†} 马 文¹⁾²⁾ 邓小良¹⁾ 贺红亮¹⁾³⁾ 经福谦¹⁾²⁾³⁾

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)

3) (四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2009 年 5 月 13 日收到; 2009 年 6 月 8 日收到修改稿)

使用分子动力学方法模拟了冲击波在纳米金属铜中的传播, 模拟样品由 Voronoi 方法得到. 结果显示纳米金属铜在冲击加载下呈现多次屈服的现象, 并发现冲击波具有多波结构. 由于设计样品时选择了晶粒取向, 晶界滑移和位错在冲击波波前上被区分开. 冲击波波阵面由弹性变形区、晶界滑移主导的塑性变形区和位错主导的塑性变形区组成. 样品中弹性波前沿扰动较小, 而位错主导的塑性波前沿扰动较大, 造成后者的主要原因是波阵面上沿冲击方向不同取向晶粒的不同屈服行为.

关键词: 分子动力学, 纳米金属铜, 冲击波, 塑性

PACC: 7115Q, 6250, 6146, 6220F

1. 引 言

纳米多晶 (nanocrystalline, 简称 nc) 金属是特指晶粒尺寸在 1—100 nm 的块体金属材料. 纳米金属具有一般粗晶金属所无法比拟的力学性能, 比如高的屈服和断裂强度及超塑性等^[1]. 近年来的实验和理论研究^[2–5]表明, 纳晶金属的特殊力学性质主要源于其特殊的微观结构——特别高的晶界原子比例和特别小的晶粒尺寸. 但是, 由于目前常规实验还难以实时观察微观结构的运动, 主要采用高分辨率透射电镜分析变形后的结构并结合理论分析来解读纳米金属材料力学性能的微观机理^[6]. 例如有部分模型将晶界处理为纳晶金属的特殊组成成分, 解释其特殊力学性质^[7, 8]. 虽然这些研究取得了一定进展, 但是还远远不能达到完全了解纳米金属材料微观结构特征与其力学性能之间关系的目标. 特别是在纳米金属材料动态力学性能方面的研究, 由于适用于动态研究的样品制备和实验观察两方面的困难, 研究工作还比较缺乏.

在实验研究比较困难的情况下, 计算机模拟对纳米金属材料力学性能的微观机理研究起到了重要

作用. 最近十年来, 随着计算机技术的发展, 分子动力学方法 (MD) 已经可以对微纳米尺度原子体系在皮秒级时间尺度上进行模拟. 其中, 采用均匀变形方法研究纳米延性金属材料的塑性变形微观机理取得了显著进展^[9–17]. 均匀变形方法是在样品中产生一维应变, 并使样品各处变形一致. 由于模拟时间尺度的限制, 均匀变形模拟的应变率特别高 ($> 10^8/\text{s}$). 均匀变形模拟结果表明, 在高应变率加载下, 面心立方 (fcc) 纳晶金属中存在晶界变形与位错两个重要的相互竞争的塑性变形机理. 然而与均匀变形模拟不同, 实际动态变形过程中, 高应变率是通过冲击波的传播实现的, 材料变形在冲击波波阵面上发生. 长期以来人们通过测量冲击波波前来推断材料在波阵面上的变形细节. 但对纳晶金属而言, 因为样品制备的难度, 目前还没有测量其冲击波波形的报道, 要研究其冲击波波阵面上变形的细节及与之对应的波阵面结构, 目前还只能求助于 MD 方法.

冲击波在纳晶金属中传播的研究工作有一些报道^[18–22]. Bringa 等^[18, 19, 22]的模拟工作重点研究了 nc 铜的冲击强度和波阵面宽度, 并指出与均匀变形加载类似, 在冲击加载下 nc 铜中有位错在波后晶界处成核, 并发射穿过晶粒后被晶界吸收. Jarmakani

^{*} 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) 和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

等^[20]的模拟结果显示冲击波波后晶界导致的变形在总变形中所占的比例不可忽略. 这些模拟初步揭示了冲击加载下 nc 铜的塑性变形机理. 但是 nc 铜中冲击波波阵面的详细结构在这些模拟中并未讨论, 对 nc 铜中冲击波波阵面的组成特征以及对应的微观变形机理仍然不清楚.

针对上述问题, 本文利用分子动力学方法模拟计算了冲击波在纳晶金属铜中的传播, 着重研究了纳晶金属铜中冲击波波阵面的结构以及在波阵面上微观结构的变形过程.

2. 模拟方法

采用 Mishin 等^[23]的 EAM 势函数描述铜原子间相互作用, 因为它不但能准确拟合出单晶铜的弹性性质、结合能、缺陷形成能、层错能等参数, 而且还能很好地拟合铜在高压下的物态方程.

纳米金属铜的初始结构通过 Voronoi 方法^[24]构

造. 样品尺寸为 $120\text{ nm}(x) \times 30\text{ nm}(y) \times 30\text{ nm}(z)$, 原子个数为 8890000, 包括 $108(12 \times 3 \times 3)$ 个晶粒, 每个晶粒沿 x 方向的晶体学取向随机取 $[001]$, $[110]$ 和 $[111]$ 三个中的一个. 采用 LAMMPS^[25] 分子动力学模拟软件. 在冲击模拟前先对样品进行热力学弛豫, 首先采用共轭梯度法使样品到达最小位能状态, 再将样品在 300 K, NPT 系综下弛豫 160 ps, 使样品原子充分运动以寻找最佳构型. 最后将样品温度降低到 0.1 K, 再在 NPT 系综下弛豫 120 ps 得到样品最终稳定结构. 弛豫过程中时间步长取为 2 fs, x, y, z 方向均取周期性边界条件. 样品最终密度为金属纯铜密度的 99%.

利用键对分析技术^[26]对样品微观结构进行分析. 图 1 为样品充分弛豫后的结构截面图, 其中利用键对分析方法标定出来的 fcc 结构的原子已经被移除, 剩余的大部分为晶界原子, 少数为样品中残余位错, 缺陷原子占总原子数目的 16%.

LAMMPS 通过预测矫正算法求解经典牛顿方

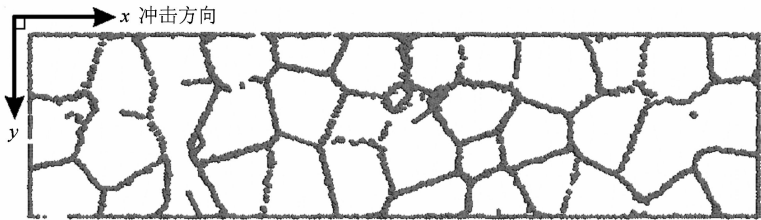


图 1 样品最终结构截面图($z=5\text{ nm}$) 其中 fcc 结构的原子已经移除, 显示的是缺陷原子

程, 冲击模拟过程中时间步长取为 1 fs, 模拟体系初始温度取为 0.1 K. 冲击加载方向为 x 方向, 采用自由边界条件; y, z 方向均采用周期性边界条件. 模拟时通过推动活塞在样品中产生冲击波, 即取样品沿 x 方向一侧开始的四层原子作为活塞, 在 x 方向以恒定的速度推动活塞在样品中产生冲击波, 活塞速度即为冲击波波阵面后的粒子速度.

3. 结果与讨论

本文共模拟了四个不同的冲击强度, 粒子速度分别为 0.5, 0.8, 1.0 和 1.5 km/s. 在模拟中首先验证了利用该势函数得到的冲击 P - V 线. 沿 x 方向在样品中选取一个长为 20 nm 的区域, 可以认为该区域内平均质量密度应正比于原子个数, 即有 $V/V_0 = \rho_0/\rho = N_0/N$ (N 为原子数). 区域内原子数在冲击波通过时持续增加直到该区域全部到达波后稳态, 此

时原子数可用于计算 P - V 线. 计算得到的 P - V 线如图 2 所示, 与实验数据符合得很好. 这表明至少在粒子速度小于等于 1.5 km/s 时, Mishin 等^[23]的 EAM 势函数在冲击加载的模拟中是适用的.

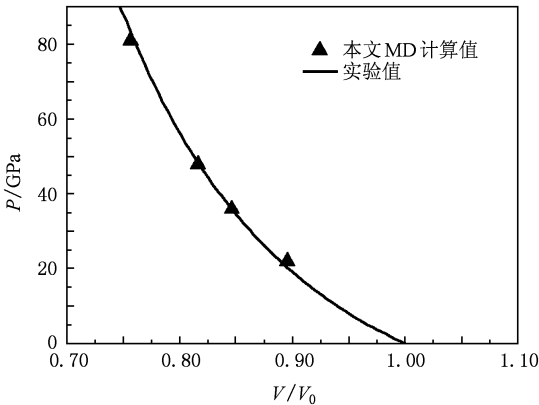


图 2 nc 铜冲击加载下 P - V 关系验证

为了详细地研究 nc 铜中冲击波波结构,需要得到模拟样品中冲击波的波剖面信息. 选取粒子速度、冲击压力、流应力这三个物理量作为研究对象. 沿 x 方向将样品均匀切成 120 个区域,平均每个区域内原子数目为 74000,具有良好的统计平均性. 每个区域内所有原子沿 x 方向速度的平均值即为该区域粒子速度. 考虑 LAMMPS 输出的应力格式实际为 $E_{ij}^k = \delta_{ij} v^k$,其中 δ_{ij} 为原子应力, v^k 为原子体积,每个小

区域的应力可以定义为原子应力对原子体积的统计平均

$$\sigma_{ij} = \frac{\sum_k E_{ij}^k}{V}, \tag{1}$$

其中 V 为每个小区域体积. 考虑模拟的冲击为一维平面正冲击,冲击压力可取为 σ_{xx} ,并应满足雨贡纽关系 $\sigma_{xx} = \rho_0 U_s U_p$, U_s 和 U_p 分别为冲击波速度和粒子速度. 流应力定义为 von-Mises 应力

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

图 3 给出了粒子速度为 0.5 km/s 时冲击波在样品中传播时的波剖面结构. 可以看出,波后粒子速度逐渐上升并稳定到 0.5 km/s,冲击压力逐渐上升到 21 GPa. 而粗晶铜粒子速度 0.5 km/s 对应的冲击波速度为 4.685 km/s,对应冲击压力为 20.9 GPa. 模拟结果与粗晶实验符合得很好. 从图 3 还可以看出,粒子速度和冲击压力上升阶段有一个明显的拐点. 流应力在波后上升到达一个极大值后逐步降低到一个平台,然后再继续上升到第二个极大值,接

着再次下降,最后稳定在 2.1 GPa,这个值比流应力第一次下降到达的平台要低. 图 3 中冲击波波剖面,特别是流应力剖面结构表明粒子速度为 0.5 km/s 时,nc 铜中冲击波具有多波结构,nc 铜在冲击加载下呈现明显的二次屈服.

众所周知,动态变形过程中,流应力的下降对应材料塑性行为的出现. 如图 3 所示,流应力到达第一个极大值开始下降表示样品中塑性行为开始出现. 在 nc 铜中可能发生的塑性行为包括晶界滑移、晶粒

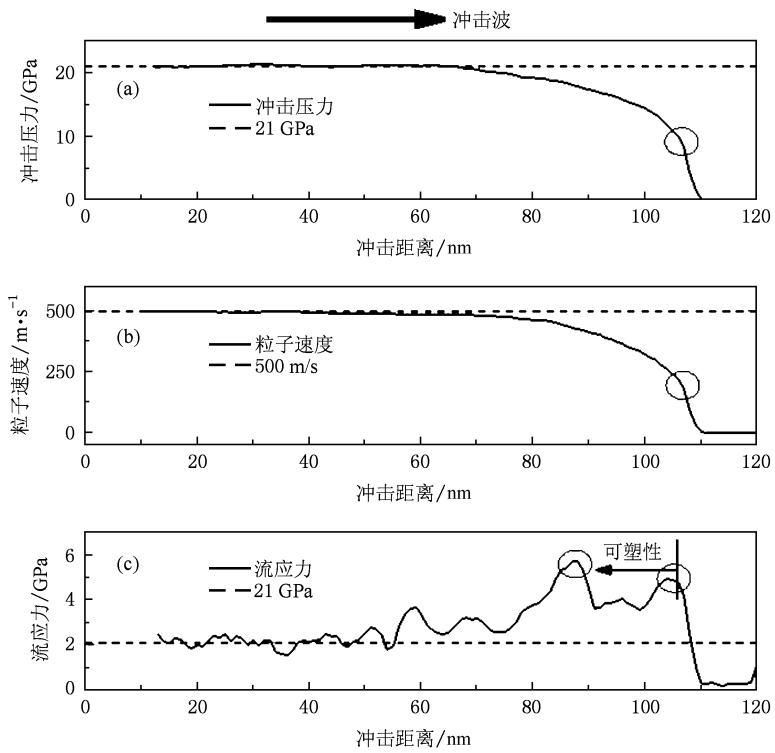


图 3 $U_p = 0.5 \text{ km/s}$, $t = 20 \text{ ps}$ 时冲击波波阵面 (a) 冲击压力剖面, (b) 粒子速度剖面, (c) 流应力剖面

旋转、孪晶、位错等. 这些塑性行为的发生取决于施加的应力、应变率、晶粒尺寸等因素. Bringa 等^[19]认为强冲击加载下晶界的塑性行为被部分抑制, 而 nc 铜晶粒尺寸为 10 nm 时, 晶界发生塑性行为的阈值应力要小于位错滑移的阈值应力. 但 Jarmakani 等^[20]在最近的模拟中指出, 尽管冲击加载下 nc 铜中晶界参与的塑性变形被抑制, 但是仍然不可忽略. 因为纳米金属中位错在晶界处成核, 可认为晶界滑移先于位错滑移, 那么图 3 中流应力在上升到第一个极大值后的下降对应的微观变形是晶界滑移, 而流应力第二次下降则对应位错成核和运动. 为证明这一点, 在样品中 $z = 5$ nm 处沿 z 方向切取厚度为 4 Å 的薄片, 分析切片中原子结构以及流应力的波剖面结构并做出该薄片的粒子速度场, 如图 4 所示.

图 4(a) 显示的是薄片内缺陷原子, 其中晶粒内部缺陷为位错, 与图 1 的对比可知, 样品中在冲击波波后晶粒内部出现大量位错. 而通过不同时刻缺陷原子截面图的分析可以知道位错在晶界处成核, 而并非在波阵面前沿成核, 与此前的模拟结果相同^[18–20]. 图 4(b) 为粒子速度分布图, 从图中可以清楚地将冲击波波后和波前区分开, 与图 4(a) 缺陷原子截面图对比发现, 冲击波波后宽为 15 nm 左右区域晶粒内部没有位错, 粒子速度较小. 将图 4(a) 与图 1 对比, 详细的分析指出冲击波波后区域内晶界原子最近邻原子数发生了明显改变, 这表明该区域内晶界原子结构做出了调整来响应流应力的上升.

图 4(c) 为统计薄片内原子信息得到的流应力剖面, 流应力剖面指出波后 nc 铜有多次屈服. 综合考虑位错分布、粒子速度场分布和流应力剖面, 可以将样品中 $z = 5$ nm 处切片中冲击波波后分为四个区域, 由图 4 中直线 $L1, L2, L3$ 和 $L4$ 所区分开. $L1$ 为冲击波波后与波前的分界线, $L1$ 后到 $L2$ 区域内, 流应力和粒子速度迅速上升, 主要是原子间距做出了调整, 可以认为这个区域内样品变形为弹性. 从 $L2$ 到 $L3$ 区域内并没有观察到明显位错产生, 流应力快速上升的趋势终止, 先是相对较慢到达最大值然后再开始下降, 流应力的这种变化很明显是由于晶界滑移造成的. 从 $L3$ 到 $L4$ 区域内, 部分晶粒内产生位错使得流应力下降, 而晶粒 a 内部无位错产生, 流应力继续上升, 造成该区域内流应力大致维持不变. $L4$ 后流应力先上升后下降, 上升是由于晶粒 b 内无位错, 流应力没有得到弛豫, 下降则是因为晶粒 b 后区域有大量位错产生. 直线 $L2$ 后区域开始有位错产生, 在塑性变形机理中占主导地位.

通过对图 4 的分析可以推断图 3 中所揭示的纳米金属铜的二次屈服分别对应晶界滑移和晶粒内部的位错运动. 当冲击波到达时, 样品中晶粒内部粒子速度和流应力迅速上升, 而晶界原子调整所带来的流应力下降无法抵消这种上升, 样品总的粒子速度和流应力迅速上升. 随后当晶界滑移到达一定程度时, 晶界处流应力的下降占据主导地位, 样品总的流应力呈现下降趋势. 很快部分取向晶粒内位错在晶

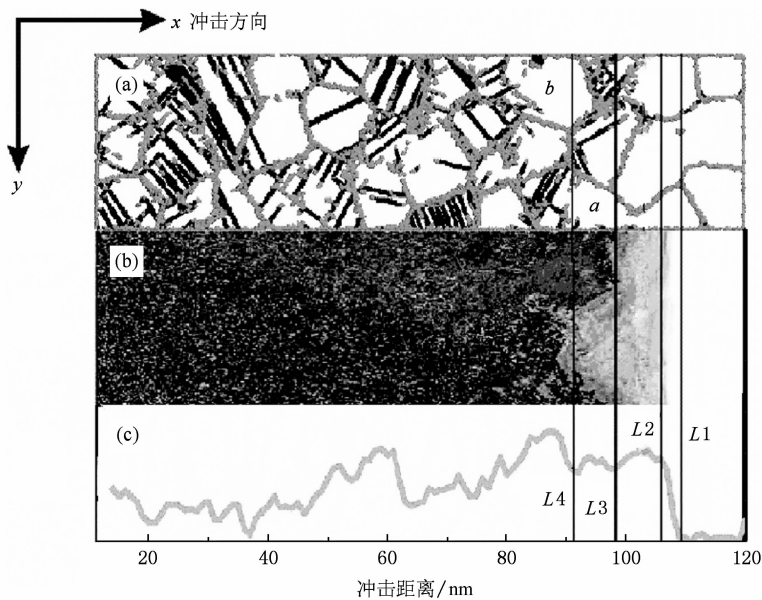


图 4 $U_p = 0.5$ km/s, $t = 20$ ps 时在样品中 $z = 5$ nm 处切片分析 (a) 样品缺陷原子截面图 (仅显示缺陷原子), (b) 切片粒子速度场分布, (c) 统计切片中原子信息得到的流应力剖面

界处成核并发射到晶粒内部并开始运动,晶粒内部流应力被卸载,但此时有些晶粒内部因为产生位错较难,流应力并未被卸载而是持续上升,样品总的流应力在 $L3$ 到 $L4$ 区域内保持不变. 在冲击波波阵面后,样品内出现大量位错,样品流应力被卸载至一个平台. 从本质上说,模拟中纳晶金属铜表现出的二次屈服,其根本原因在于位错在晶界处成核,而位错的成核又是通过晶界原子的调整来完成,晶界滑移要先于位错运动. 同时,由于模拟样品晶粒取向被限制,导致流应力上升后并非持续下降,而是由于晶粒各向异性在下降过程中维持了一个平台,这样在流应力剖面上我们可以将晶界滑移成分区分出来. 于是,nc 铜中冲击波成分包括弹性前驱波、由晶界滑移主导的塑性波和由位错主导的塑性波. 其中弹性前驱波中晶界原子结构做出了调整,但是这种调整幅度很小.

从图 4(b) 可以清晰地看出位于直线 $L1$ 和 $L2$ 之间的弹性波前沿扰动很小. 一般认为是由于弹性波在不同晶向晶粒内部传播速度的各向异性造成了这种扰动. 从 Meyers 等^[27, 28] 对弹性前驱波的分析可以得到,由各向异性导致的弹性前驱波前沿的扰动与冲击强度、冲击时间和晶粒尺寸等因素有关. 模拟中弹性波前沿扰动非常小,这是因为模拟的冲击时间相对实际冲击过程而言非常短. 与弹性波前沿扰动不同,位于直线 $L3$ 和 $L4$ 之间的分界线扰动在 10 nm 级左右,这个分界线可以被认为是由位错主导的塑性波前沿. 若仅从塑性波速度的各向异性出发不能解释这个较大的扰动. 注意到纳晶金属铜中位错的产生和运动并非连续性的,位错是在晶界处成核,运动穿过晶粒内部最后被晶界吸收,模拟过程中未观察到位错穿过晶界. 同时已有的分子动力学模拟冲击波在单晶 fcc 金属中的传播表明,冲击方向取不同晶向时,单晶对冲击的响应呈现明显差异,位错行为也有所不同^[18, 29–34]. 当冲击波沿 $\langle 100 \rangle$ 晶向加载时位错成核的阈值应力最小,位错运动最容易,而沿 $\langle 110 \rangle$ 晶向加载时最难. 显然,对不同取向的晶粒而言,位错运动的难度不同,而位错在晶界处成核所需的时间也不同. 显然,图 4 显示冲击波通过晶粒 a 时需要将更多的能量用于晶界处位错成核,导致该区域动能(粒子速度)上升比其他区域要慢. 当冲击波到达不同取向的晶粒时,随着应力的上升, $\langle 100 \rangle$ 晶向沿冲击方向的晶粒内部将首先出现位错,而 $\langle 110 \rangle$ 取向晶粒最迟出现位错. 这个时间

差与上升时间是同一个数量级,冲击波在这段时间内走过的距离大约在 10 nm 级,这样在纳晶金属中可能出现图 4 中的情形——波阵面上有的晶粒已经屈服,而有的晶粒仍然在弹性变形阶段. 这样 nc 铜中位错主导的塑性波前沿的扰动应当来源于至少两个部分,一个是不同晶粒内部塑性波传播速度的各向异性^[27],另一个则是塑性波波阵面上不同取向晶粒对冲击波的不同响应,后者导致的扰动应当与晶粒尺寸数量级一致.

在粒子速度剖面上可以定出 nc 铜中冲击波波阵面宽度. 图 5 为 $U_p = 1$ km/s 时不同时刻粒子速度剖面图. 做出 $U = 95\% U_p$ 的直线,定出其与粒子速度剖面的交点,这个交点沿冲击方向到波阵面前沿的距离即为波阵面宽度. 这个定义与 Bringa 等^[18] 的定义一样. 从波阵面宽度定义和前面的分析可知,波阵面宽度包括了弹性变形区域宽度、晶界主导变形区域的宽度和位错主导变形区域前沿扰动的宽度. Bringa 等建立了模型来描述纳晶金属中波阵面的展宽,他认为这种展宽主要来源于晶粒取向的各向异性,冲击强度越小,冲击时间越长,展宽越大. 图 5 显示 20 ps 时波阵面展宽为 18 nm,要大于 10 ps 时的 14 nm. 而图 6 则显示了冲击强度越高,总的波阵面展宽越小. 这个结论与 Bringa 等的结论一致. Bringa 的报道中,冲击距离约 70 nm 情况下,冲击强度为 22,47 GPa 时波阵面宽度分别为 21 和 13 nm. 而我们模拟得到的结果则分别为 25 和 16 nm,比 Bringa 等报道的略大. 这是因为我们模拟的样品晶粒取向仅有三个方向,各向异性因子比晶粒取向完全随机的样品要大.

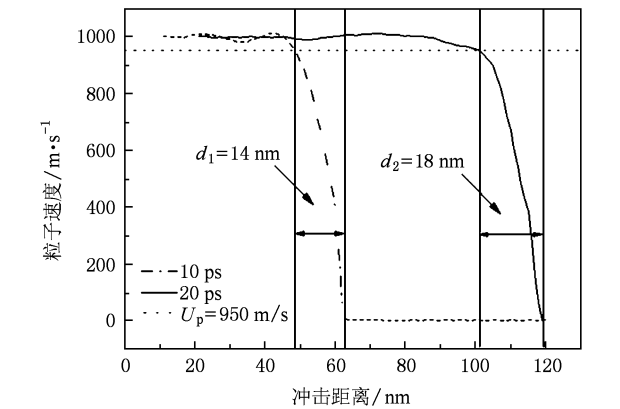


图 5 粒子速度为 1.0 km/s 时冲击波波剖面结构 d_1, d_2 分别为 10 ps 和 20 ps 时刻冲击波波阵面宽度

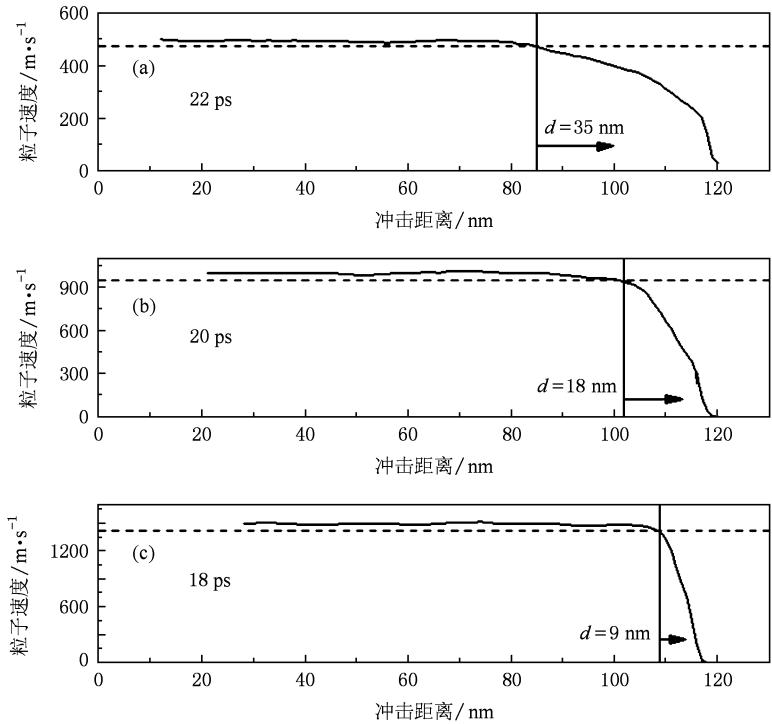


图6 粒子速度分别为0.5 km/s,1.0 km/s,1.5 km/s时冲击波粒子速度剖面 d为冲击波波阵面宽度. (a) $U_p = 0.05$ km/s, (b) $U_p = 1.0$ km/s, (c) $U_p = 1.5$ km/s

4. 结 论

我们采用分子动力学方法(MD)模拟了冲击波在nc铜中的传播,着重讨论了冲击波波阵面结构和微观变形机理之间的关系.发现在冲击加载下纳晶金属铜中有二次屈服现象发生,冲击波具有多波结构.由于样品中晶粒沿冲击方向的晶体学取向被限定在三个范围,并非完全随机,晶界滑移机理和位错机理在冲击波波形上被明显区分开.冲击波波阵面由弹性变形区域、晶界滑移主导变形区域和位错运动主导的塑性变形区构成.冲击波到达时,晶界先屈服发生滑移,此时晶粒内部则先经历弹性变

形,塑性变形由晶界滑移主导.随后位错自晶界处发射、运动穿过晶粒内部,晶粒内部屈服,塑性变形由位错运动主导.晶界滑移机理和位错机理在冲击波流应力剖面上得到体现.冲击波波阵面上弹性波前沿扰动较小,由弹性波速度的各向异性造成;由位错主导的塑性波前沿扰动较大,一部分源于波速各向异性,另一部分原因在于波阵面上不同取向晶粒的屈服有先后顺序.冲击强度越大,总的波阵面宽度越小.

感谢中国工程物理研究院流体物理研究所崔新林博士在缺陷分析方面的帮助.感谢中国工程物理研究院计算机应用研究所张亚林在程序运行过程中提供的帮助.

[1] Meyers M A, Mishra A, Benson D J 2006 *Prog. Mater. Sci.* **51** 427

[2] Xu Z, Wang X X, Liang H Y, Wu H A 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3637 (in Chinese) [徐 洲、王秀喜、梁海弋、吴恒安 2004 物理学报 **53** 3637]

[3] Keglinski P, Wolf D, Phillpot S R, Gleiter H 1999 *Scripta. Mater.* **41** 631

[4] van Swygenhoven H, Spaczer M, Caro A 1999 *Nanostruct. Mater.* **12** 629

[5] van Swygenhoven H, Caro A, Farkas D 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **309-310** 440

[6] Shan Z, Stach E A, Wiezorek J M K, Knapp J A, Follstaedt D M, Mao S X 2004 *Science* **304** 654

[7] Fu H H, Benson D J, André Meyers M 2004 *Acta Mater.* **52**

4413

[8] Jiang B, Weng G J 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 1125

[9] Frøseth A G, Derlet P M, van Swygenhoven H 2004 *Acta Mater.* **52** 5863

[10] Kumar K S, Swygenhoven H, Suresh S 2003 *Acta Mater.* **51** 5743

[11] van Swygenhoven H 2002 *Science* **296** 66

[12] van Swygenhoven H, Caro A 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1652

[13] van Swygenhoven H, Derlet P 2001 *Phys. Rev. B* **64** 224105

[14] van Swygenhoven H, Derlet P M, Hasnaoui A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024101

[15] van Swygenhoven H, Spacér M, Caro A 1999 *Acta Mater.* **47** 3117

[16] van Swygenhoven H, Spaczér M, Caro A 1998 *Nanostruct. Mater.* **10** 819

[17] van Swygenhoven H, Spaczér M, Caro A, Farkas D 1999 *Phys. Rev. B* **60** 4

[18] Bringa E M, Caro A, Victoria M, Park N 2005 *JOM* **57** 67

[19] 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

[20] Jarmakani H, Bringa E, Erhart P, Remington B, Wang Y, Vo N Q, Meyers M 2008 *Acta Mater.* **56** 5584

[21] 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

[22] Wang Y M, Bringa E M, McNaney J M, Victoria M, Caro A, Hodge A M, Smith R, Torralva B, Remington B A, Schuh C A, Jamarkani H, Meyers M A 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 061917

[23] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106

[24] Chen D 1995 *Comput. Mater. Sci.* **3** 327

[25] Plimpton S J 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1

[26] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950

[27] Meyers M A 1977 *Mater. Sci. Eng.* **30** 13

[28] Meyers M A, Carvalho M S 1976 *Mater. Sci. Eng.* **24** 5

[29] Cao B, Bringa E M, Meyers M A 2007 *Metall. Mater. Trans. A* **38A** 2681

[30] Germann T C, Holian B L, Lomdahl P S 1999 *Shock Compression of Condensed Matter* (New York; AIP) p 297

[31] Germann T C, Holian B L, Lomdahl P S, Ravelo R 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4

[32] Holian B L, Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 4

[33] 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]

[34] 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]

Propagation of shockwave in nanocrystalline copper: Molecular dynamics simulation *

Chen Kai-Guo¹⁾ Zhu Wen-Jun^{1)3)†} Ma Wen¹⁾²⁾ Deng Xiao-Liang¹⁾ He Hong-Liang¹⁾³⁾ Jing Fu-Qian¹⁾²⁾³⁾

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

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

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

(Received 13 May 2009; revised manuscript received 8 June 2009)

Abstract

The propagation of shockwave in nanocrystalline copper has been studied by means of molecular dynamics simulation. The samples are prepared by Voronoi method and crystalline orientations of each grain are limited by three conditions. The result shows for the first time that nanocrystalline copper shows the phenomenon of multi-yield under shock loading, and the shockwave has a multi-wave structure. The profiles of shock-front suggest grain boundary sliding and dislocation emmission in sequence. The shock-front consists of an elastically deforming area, a plastically deforming area dominated by grain boundary sliding and a plastically deforming area dominated by dislocation movement. There are irregularities on both elastic wave and plastic wave, and the former is obvious than the latter.

Keywords: molecular dynamics, nanocystalline copper, shockwave, plasticity

PACC: 7115Q, 6250, 6146, 6220F

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

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