

高应变率压缩下纳米孔洞对金属铝塑性变形的影响研究

第伍旻杰 胡晓棉

Plastic deformation in nanoporous aluminum subjected to high-rate uniaxial compression

Diwu Min-Jie Hu Xiao-Mian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 170201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.170201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.170201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Cu 刃型扩展位错附近局部应变场的原子模拟研究

Atomistic simulation study on the local strain fields around an extended edge dislocation in copper

物理学报.2014, 63(7): 076103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.076103>

运动物体在颗粒物质中的动力学过程及最大穿透深度仿真研究

Simulation of the projectile dynamics in granular media

物理学报.2013, 62(13): 130204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.130204>

Pb 液滴在 Ni 基底润湿铺展行为的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of the wetting behavior of Pb droplet on Ni substrate

物理学报.2013, 62(12): 120203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.120203>

接触角与液固界面热阻关系的分子动力学模拟

A molecular dynamics simulation on the relationship between contact angle and solid-liquid interfacial thermal resistance

物理学报.2013, 62(11): 110204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.110204>

不同温度条件下单层石墨烯纳米带弛豫性能的分子动力学研究

Relaxation properties of graphene nanoribbons at different ambient temperatures: a molecular dynamics study

物理学报.2012, 61(20): 200207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.200207>

高应变率压缩下纳米孔洞对金属铝塑性变形的影响研究

第伍旻杰¹⁾ 胡晓棉^{2)†}

1) (中国工程物理研究院研究生部, 北京 100088)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理国家重点实验室, 北京 100088)

(2015年2月24日收到; 2015年5月7日收到修改稿)

本文利用分子动力学模拟方法研究了含纳米孔洞金属铝在[110]晶向高应变率单轴压缩下弹塑性变形的微观过程. 对比单孔洞和完整单晶的模型, 讨论了多孔金属的应力应变关系及其位错发展规律. 研究表明, 对于多孔模型的位错积累过程, 位错密度随应变的增加可大致分为两个线性阶段. 由同一个孔洞生成的位错在相互靠近过程中, 其滑移速度越来越小; 随着位错继续滑移, 源自不同孔洞的位错之间开始交叉相互作用导致应变硬化. 达到流变峰应力之后又由于位错密度增殖速率升高发生软化. 当应变增加到11.8%时, 所有孔洞几乎完全坍塌, 并观察到在此过程中有棱位错生成.

关键词: 分子动力学, 纳米孔洞, 纳米多孔, 位错

PACS: 02.70.Ns, 61.72.Lk, 61.72.Qq, 62.20.F-

DOI: 10.7498/aps.64.170201

1 引言

弹塑性本构参数及动态响应特性, 特别是高压、高应变率下的塑性变形机理, 是金属材料工程应用的重要性能指标之一. 超强激光加载实验可达到 10^9 s^{-1} 数量级应变率^[1]. 研究表明金属材料的弹塑性变形特性与材料的微介观结构密切相关. 材料的辐照^[2,3]、脉冲离子束注入^[4]、退火等过程会导致材料内产生孔洞等缺陷, 因此需要研究小孔洞对这一过程的影响规律. 在纳观尺度和超短(ps)时长的时空尺度下研究孔洞在应力作用下的生长或者坍塌过程主要还是通过数值模拟.

对微结构变形过程的研究常常采用分子动力学方法. 分子动力学方法因其特点对于在微、纳米尺度研究孔洞演化的内在机理的研究更为直观. 对体心立方(bcc)及面心立方(fcc)结构金属中含有单纳米孔洞的研究表明, 在晶体塑性变形过程中, 纳

米孔洞是位错成核源, 孔洞生长的机理是位错发射^[1,5-9]. 目前对于纳米多孔结构材料力学行为的分子模拟研究则较为有限. Seppälä等^[10]研究了拉伸断裂过程中Cu (fcc)内相邻孔洞的生长和贯通现象, 发现随着孔洞的生长当孔洞间距约为一个孔洞半径时, 开始发生孔洞贯通. 邓小良等^[11]在对冲击加载下孔洞贯通的微观机理的研究中发现, 多孔结构金属中孔洞生长和坍塌的原因同样是位错发射. Sun等^[12]研究了纳米尺度的开放多孔Au (fcc)的拉伸变形(孔洞体积分数在0.64—0.76之间), 发现在拉伸变形过程中部分骨架结构发生颈缩和断裂, 导致材料的失效. Erhart等^[13]发现纳米多孔(孔洞率 $\leq 12\%$) Cu和Al (fcc)在冲击波加载下, 孔洞导致在金属内部产生纳米多晶结构, 降低位错均匀成核的条件. 在塑性变形过程中晶界形成的同时, 孔洞作为位错源最终在金属内部积累大量的位错. 最近Rueste^[14,15]和Rodriguez-Nieva^[16]等分别研究了在沿[001]晶向的单轴高应变率(10^9 s^{-1})压缩

† 通信作者. E-mail: hu_xiaomian@iapcm.ac.cn

加载下, 低孔洞率($\sim 5\%$)的多孔 Ta (bcc) 和 Au 单晶的力学行为和塑性变形过程中位错的演化. 孔洞的分布不仅改变了局部的应力状态, 也为生成的位错环之间相互作用和交叉提供了条件, 形成位错林并导致应变硬化. 有相关研究^[17,18]表明, 在含纳米孔洞 fcc 金属的变形过程中, 加载的方向对于孔洞和位错环的演化起着非常重要的作用. 关于多孔金属在动态载荷下的行为, 目前的研究多以 $\langle 100 \rangle$ 晶向为单轴加载方向, 其他晶向加载下的行为未见报道.

本文以 Al 为例, 利用分子动力学模拟计算了纳米多孔单晶 fcc 金属受到沿 $[110]$ 晶向单轴压缩塑性形变过程, 重点研究了在塑性变形过程中的位错演化, 分析不同加载方向对孔洞和位错行为的影响, 进一步认识动态载荷下纳米多孔金属的塑性变形机理.

2 模拟方法

计算模型为 $40.7 \text{ nm} \times 40.1 \text{ nm} \times 40.5 \text{ nm}$ 的立方体单晶, 总共有约 4.0×10^6 个 Al 原子 (完整单晶). 为满足物理分析的需要, 本文设置两类模型, 即单孔洞模型和多孔洞模型. 对于多孔洞模型, 如图 1 所示, 在计算区域内, 随机放置了 8 个半径为 $4.05 \text{ nm} = 10a$ ($a = 0.405 \text{ nm}$, 为晶格常数) 的球形孔洞. 这样孔洞之间的平均 (球心到球心) 距离约为 20.3 nm , 模拟区域晶体的孔洞率则约为 3.3% . 作为对比分析, 设置位于计算区域中心、半径分别为 4.05 nm 和 8.10 nm 的两种单孔洞模型. 与多孔的模型相比, 前者的孔洞尺寸与之相同, 后者则有相近的孔洞体积分数.

在模拟的各个方向均采用周期性边界条件. 在加载之前对模型在 300 K 的条件下进行等温等压 (NPT 系综) 热浴, 消除模型内部和表面的应力. 热浴完成后, 模型的外部尺寸变为 $40.8 \text{ nm} \times 40.2 \text{ nm} \times 40.6 \text{ nm}$.

对模型沿 $[110]$ 晶向进行单轴压缩加载. 模拟的时间步长设为 1 fs , 每次变形弛豫 1000 步也就是 1 ps , 应变约 0.002 , 如此反复压缩 100 ps , 平均应变率为 $2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. 变形过程中采用微正则系综 (NVE) 对上述各模型进行绝热压缩, 不对温度进行控制, 以便分析温度的变化所引起的一些效应.

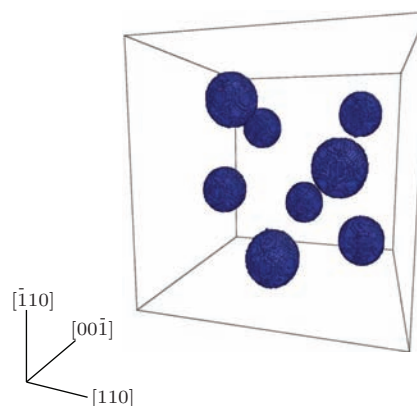


图 1 多纳米孔洞模型图, 只显示了孔洞表面的原子
Fig. 1. The simulation lattice box containing 8 nanosized voids. Only atoms on the void surfaces are visible.

本文采用 LAMMPS^[19] 分子动力学模拟代码和 Mishin 嵌入原子势^[20] 进行计算. 对原子轨迹文件用 Atomeye^[21] 进行可视化处理. 可视化过程中用中心对称系数的方法对原子进行着色, 显示出晶体中局部缺陷. 例如位错、堆垛层错、孔洞表面等. 再限制参数的上下限隐藏 fcc 原子只显示缺陷原子. 另外, 利用位错抽取算法 (Dislocation eXtraction Algorithm, DXA)^[22] 可以更清楚的显示出以上提到的缺陷, 处理的结果可以用 ParaView 软件显示出来.

3 结果分析

3.1 不同孔隙微结构对应力应变的影响

单孔洞和多孔洞模型的计算结果表明, 孔洞大小和不同分布, 会导致不同的应力应变关系, 特别是屈服强度, 会随微结构的变化而发生改变. 图 2 所示为理想单晶、单孔和多孔模型的应力应变曲线. 压缩的初始阶段 (应变 < 0.02), 不同模型的应力均与应变呈线性. 其中多孔模型和含半径为 8.1 nm 的单孔洞模型的孔洞率和弹性系数都十分接近. 随着应变量的增加, 理想单晶出现不断硬化而没有发生屈服, 而含孔洞模型则随着应变量的增加表现出流变软化行为. 由于很难定义其屈服应力, 故在此取变形过程中的流变峰应力进行比较. 其中, 高孔隙率模型对应较低的流变峰应力; 在相同孔隙率下, 多孔模型比单孔洞模型的流变峰应力值略低, 应力衰减更快.

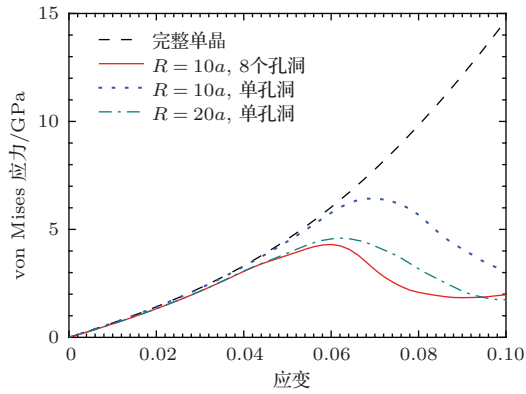


图2 (网刊彩色) 不同孔洞设置下的应力应变曲线. R 表示各个模型中孔洞的半径.

Fig. 2. (color online) Stress-strain curves of samples with different void configurations. Where R represents the radius of the voids in each sample.

Wu 和 Markenscoff 计算了单轴拉伸加载下, 两个邻近孔洞对于局部应力的影响^[23]. 给出的结果是

$$\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\infty}} \approx \frac{1.94 \mp \sqrt{1/2}}{\sqrt{d/2R}}, \quad (1)$$

σ_{\max} 是孔洞表面应力的最大幅值, σ_{∞} 是无穷远处的应力, d 是孔洞壁之间的最短距离, R 表示孔洞半径, 若用 λ 来表示孔洞的中心距离, 那么 $d = \lambda - 2R$. (1) 式右边的减号对应的是应力沿孔洞连线方向加载, 而加号则对应的是加载应力方向垂直于孔洞连线的情形 (如图 3). 以分子模拟中的参数代入计算可得到 $\sigma_{\max}^- \sim 1.01\sigma_{\infty}$ 和 $\sigma_{\max}^+ \sim 2.16\sigma_{\infty}$, 分别对应于平行加载和垂直加载的情形. 于是据此可以推断, 如果是多孔洞随机分布, σ_{\max} 的取值范围应在 σ_{\max}^- 和 σ_{\max}^+ 之间.

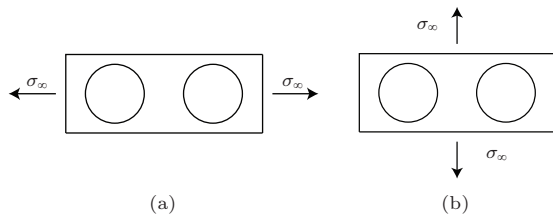


图3 Wu-Markenscoff 二维模型的示意图 (a) 平行于孔洞连线方向加载; (b) 垂直于孔洞连线方向加载 (σ_{∞} 是无穷远处的应力)

Fig. 3. The Schematic of 2D Wu-Markenscoff model subjected to (a) longitudinal or (b) transverse tension. Where σ_{∞} is the remote stress.

在上述压缩过程中, 完整单晶仅发生弹性变形, 没有位错等结构产生, 该模型随着体积的减小表现出硬化趋势. 在含有孔洞的模型中, 观察到孔

洞表面的位错成核, 导致金属的屈服, 进入以位错为主要载体的塑性变形阶段. 孔洞半径为 $10a$ 的两个模型均在应变达到 3.8% 的时候开始在孔洞表面产生位错. 此时单孔洞模型和多孔洞模型对应的 von Mises 应力分别 3.08 GPa 和 2.87 GPa, 二者的比值为 1.073, 这符合 Wu-Markenscoff 模型^[23] 的结果. 也就是说相较于单孔的情况, 多孔的结构会加强小孔局部应力集中的效应, 从而导致在远场应力相对较低的情况下位错发射提前发生.

3.2 位错的演化

面心立方结构晶体在 $[110]$ 晶向加载下, 有 4 个 $\{111\}\langle 110 \rangle$ 滑移系统: $(111)[10\bar{1}]$, $(111)[01\bar{1}]$, $(11\bar{1})[101]$ 和 $(11\bar{1})[011]$, 它们对应最大的 Schmid 因子为 0.408^[17]. 也就是说在单轴变形的条件下, 以上滑移系统的分解剪切应力最大, 最容易导致位错的产生和滑移.

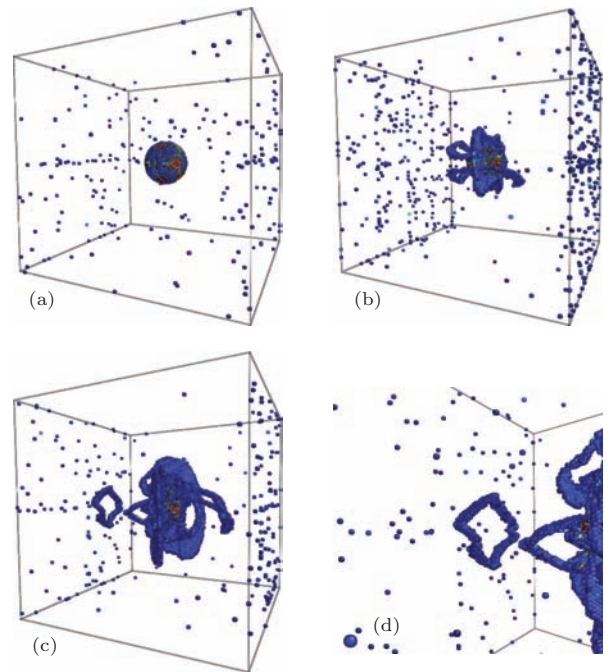


图4 单孔洞 (半径为 4.05 nm) 模型中位错的产生和演化 (a) $\varepsilon = 3.8\%$, 位错环开始在孔洞表面成核; (b) $\varepsilon = 5.4\%$; (c) $\varepsilon = 6.4\%$; (d) 为 (c) 中的棱型位错放大图
Fig. 4. Dislocation nucleation and evolution in single void ($R = 10a$) model: (a) $\varepsilon = 3.8\%$ (dislocation nucleation); (b) $\varepsilon = 5.4\%$; (c) $\varepsilon = 6.4\%$; (d) a zoom to show the prismatic loop.

单孔和多孔模型的模拟结果都表明塑性变形的机理是位错在孔洞表面成核和发射. 单孔洞和多孔洞模型中位错的演化过程分别如图 4 和图 5 所示. 从中可以看出, 应变为 3.8% 时, 位错环开始在

孔洞表面成核, 沿着{111}晶面滑移运动, 堆垛层错紧随其后在晶体中生成. 单孔洞模型中, 位错可以没有阻碍地滑移; 然而多孔洞模型中随着位错的继续滑移运动, 源自不同孔洞位错环之间开始交叉, 形成位错林. DXA分析的结果表明, 位错成核时生成的位错环全部为Shockley偏位错. 这些偏位错环为先导偏位错. 如图5(c)和图6(a)所示, 应变为6.4%源自不同孔洞的位错开始交叉时的Shockley偏位错占到全部位错的82.4%, 剩下的部分fcc全位错占11.1%, Frank偏位错占2.4%, 再其他类型的约占4%. 如图6(b)当应变继续增大达到 $\varepsilon = 11.8\%$ 时孔洞几乎完全坍塌.

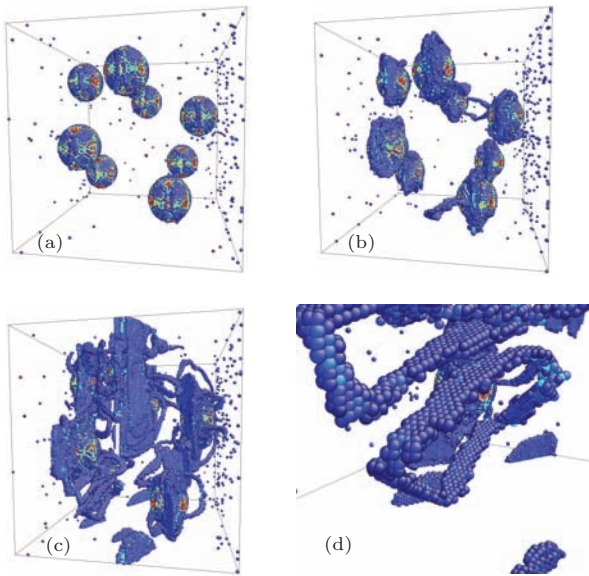


图5 多纳米孔洞模型中位错的产生和演化 (a) $\varepsilon = 3.8\%$, 位错环开始在孔洞表面成核; (b) $\varepsilon = 5.4\%$; (c) $\varepsilon = 6.4\%$; (d) 为(c)中的棱型位错放大图

Fig. 5. Dislocation nucleation and evolution in model configured with multiple voids: (a) $\varepsilon = 3.8\%$ (dislocation nucleation); (b) $\varepsilon = 5.4\%$; (c) $\varepsilon = 6.4\%$; (d) a zoom to show the prismatic loop.

在本文含孔洞单晶Al的模拟中没有发现孪晶, 与对纳米多孔Au的研究结果相同^[16]. 有研究发现纳米晶Al中会出现变形孪晶^[24,25], 变形孪晶的生成与纳米晶中的晶界有关^[26]. 在本文模拟中的建模过程均采用了在单晶Al中构造纳米孔洞的方法, 类似于粗晶与纳米晶不同. 目前尚未见到关于在粗晶Al中出现变形孪晶的报道, 这可能与Al的堆垛层错能较高有关^[25].

本文的模拟中可以看到有棱位错环生成(如图5(c), (d)和图6(a)). Rueste和Rodriguez-Nieva等^[14-16]的研究中未发现棱位错环生成. 如

图4棱位错环是由剪切位错环伸展、相互反应而形成的. 棱位错环生成以后沿单轴加载的方向([110]晶向)滑移. 如图5, 多孔模型中发射出棱位错的孔洞恰好在[110]方向与相邻孔洞距离较大, 有较为充分的空间, 使得剪切位错环能够发展为棱位错环.

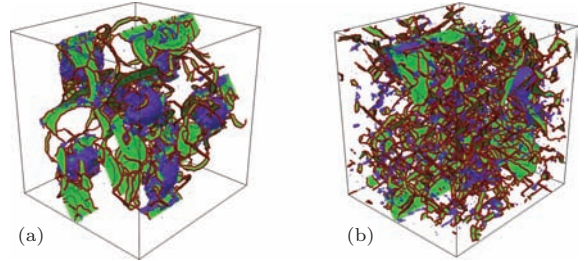


图6 (网刊彩色) 多孔模型不同应变对应的DXA分析图 (a) $\varepsilon = 6.4\%$; (b) $\varepsilon = 11.8\%$ (蓝色表示孔洞的表面, 红色表示位错线, 绿色表示堆垛层错)

Fig. 6. (color online) DXA analysis of the nanoporous sample at different strains: (a) $\varepsilon = 6.4\%$; (b) $\varepsilon = 11.8\%$. Where the void surfaces, dislocation and stacking faults are respectively presented in blue, red and green.

3.3 位错密度

位错密度的定义是总位错线长度 l 除以总体积 V , 即

$$\rho_d = \frac{l}{V}. \quad (2)$$

位错线的长度可以利用DXA算法得到. 图7所示为不同应变下的位错密度变化. 位错密度的增长在塑性变形的早期是一个分段线性的过程: $0.038 < \varepsilon < 0.054$, $d\rho_d/d\varepsilon \approx 1.07 \times 10^{18} \text{ m}^{-2}$; $0.056 < \varepsilon < 0.08$, $d\rho_d/d\varepsilon \approx 5.36 \times 10^{18} \text{ m}^{-2}$. 如图6中的DXA结果的可视化图像, 在应变为 $\varepsilon = 5.4\%$ 时, 尾随偏位错开始生成, 成为新的位错来源, 致使位错生成速率大幅提升. 当应变增大到约0.08时位错密度达到稳定值, 在晶体内部生成了位错林.

塑性变形的过程可以用塑性功来定量描述. 塑性变形和可动位错密度 ρ_m 的关系为

$$\dot{\varepsilon} = \rho_m b v_d, \quad (3)$$

其中 b 是晶体的Burgers矢量, 对铝 $b = 0.286 \text{ nm}$; v_d 是可动位错的滑移速率. 温度 T 的变化和塑性变形的关系则可以表示为^[27]

$$dT = \frac{\beta}{C_\rho} \sigma d\varepsilon, \quad (4)$$

C 为材料的热容(纯铝的热容为 $903 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$); ρ 为密度; σ 为剪切应力, 根据Schmid法则 $\sigma = 0.408\sigma_{\text{vM}}$ (σ_{vM} 表示 von Mises 应力); β 是一个由实验确定的经验参数, 表示塑性变形产热留在材料内部那部分的分, 本文选取 $\beta = 0.3$ [28]. 根据 (3), (4) 两式可得可动位错密度的表达式

$$\rho_{\text{m}} = \frac{C\rho}{\sigma\beta b\bar{v}} \frac{dT}{dt}, \quad (5)$$

式中的 dT/dt 表示的是温度的改变速率, \bar{v} 是平均位错速度. 由 (5) 式根据温度的变化可以大致估算出可动位错密度.

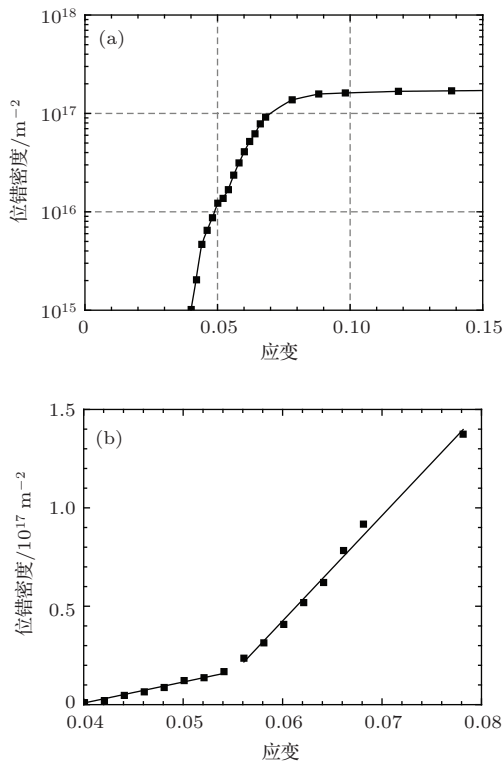


图7 多孔洞模型变形过程中的位错密度 (a) 对数视图; (b) 线性视图
Fig. 7. Dislocation density of the sample with multiple voids plotted as a function of strain: (a) Log-liner plot; (b) liner-liner plot.

根据各个时刻位错的位置, 可以计算出位错滑移的速度. 相近孔洞率的模型在弹性阶段和塑性形变的早期表现出相似的应力应变行为. 根据位错运动的阻尼机理 [29,30], 故有相近的位错滑移速度. 图8所示为含单个半径为8.1 nm孔洞模型(孔洞体积分数与多孔模型相同)中的位错在不同时刻的位置. 取三次多项式拟合曲线的斜率为位错速度, 结果表明位错滑移的速度在 $1.4 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 到 $2.8 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 之间是一个变数. 图9所示为含单个孔洞的fcc晶

体在 $\langle 110 \rangle$ 晶向加载下位错成核和滑移的二维示意图. $\{111\}$ 滑移面和 $[110]$ 单轴应变的加载方向的夹角为 54.7° . 位错在孔洞表面生成之后沿着 $\{111\}$ 滑移面滑移运动. 孔洞的上下分别生成一对位错环, 各对位错环先是沿 $\{111\}$ 面滑移靠近, 分别汇聚在A或A'. 靠近的过程中相互作用越来越强(在这里表现为排斥作用), 位错减速滑动. 每对位错环中的一个从中分离继续沿原滑移面运动, 和其他相邻孔洞的位错环交叉相互作用. 与之不同的是, fcc金属在 $\langle 100 \rangle$ 或 $\langle 111 \rangle$ 晶向加载下 [17], 剪切位错环在成核之后, 只会呈放射状沿着 $\{111\}$ 晶面向晶体内部滑移, 位错首次交叉的滑移距离也比 $\langle 110 \rangle$ 晶向加载下要远. 在此过程中源自同一个孔洞位错环之间的距离较远, 相互作用较弱, 因此位错滑移速度也更为稳定.

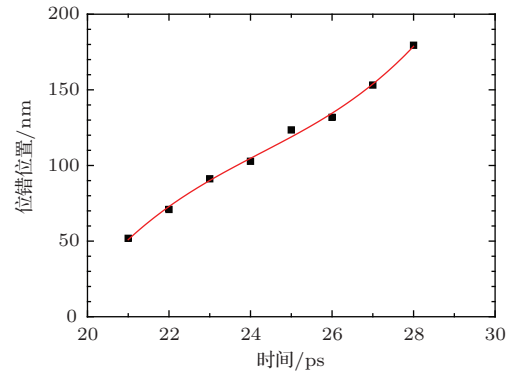


图8 孔洞半径为8.1 nm的单孔洞模型的位错位置时间图
Fig. 8. The position of dislocation emitted from the surface of the singular pore in radius of 8.1 nm plotted as a function of time.

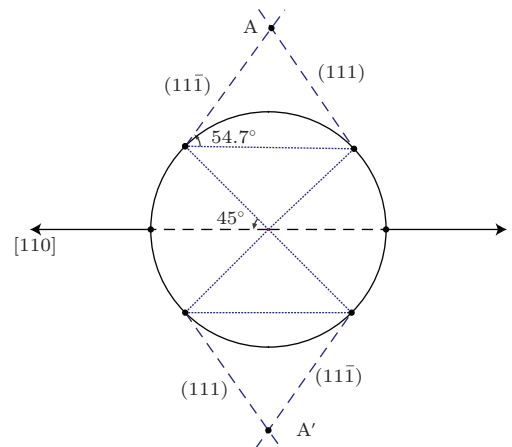


图9 $[110]$ 加载下单孔洞位错滑移示意图
Fig. 9. The schematic exhibits the glide of dislocations emitted from the surface of a void subjected to $[110]$ loading.

图 10 中所示为多孔模型在变形过程中温度的变化情况. 从中得出各个时刻温度对时间的导数 dT/dt , 再结合 (5) 式可得出可动位错的密度 (如图 11, 取平均位错速度为 $2 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$). 可动位错密度与总位错密度随应变变化的对比发现: 在

$0.04 < \varepsilon < 0.09$ 应变范围内, 可动位错密度总体上呈上升趋势, 比总的位错密度小一个数量级; 随着应变继续增大 ($\varepsilon > 0.09$), 可动位错密度开始减小. 可以推断是位错林的产生对位错的运动起到了阻碍的作用, 导致了其中可动位错成分减少.

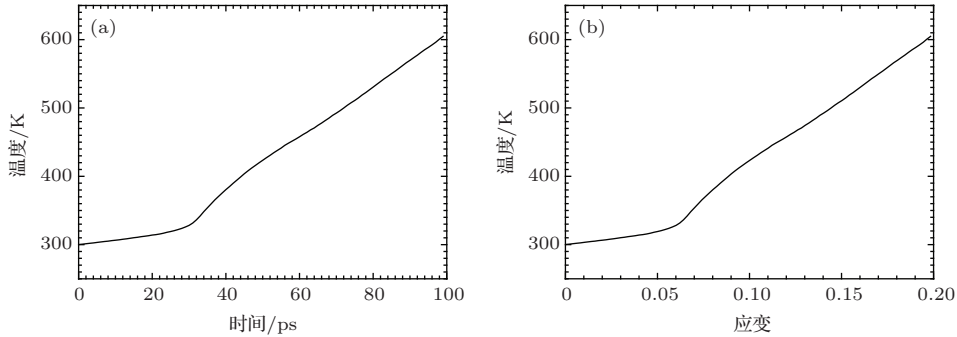


图 10 多孔模型在变形过程中温度变化 (a) 随时间以及 (b) 随应变的变化

Fig. 10. The temperature of the model configured with multiple porous (a) plotted as a function of time; (b) plotted as a function of strain.

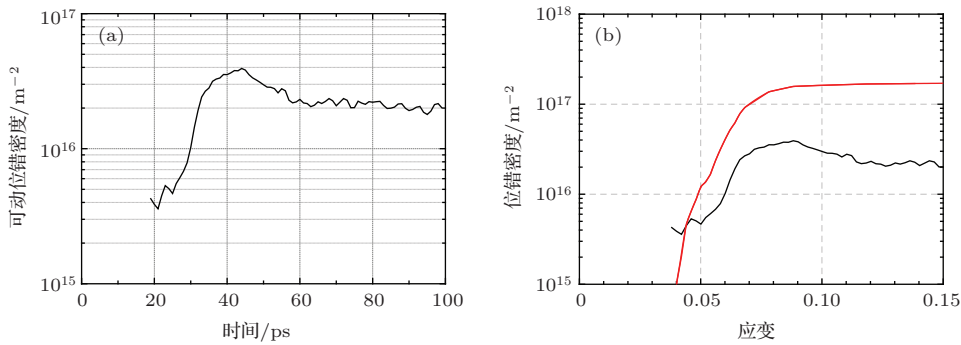


图 11 (网刊彩色) 多孔模型中 (a) 可动位错密度随时间的变化; (b) 可动位错密度 (黑色) 与总位错密度 (红色) 随应变的变化

Fig. 11. (color online) (a) Mobile dislocation density plotted as a function of time; (b) Mobile dislocation density (black) and total dislocation density (red) plotted as a function of strain of the sample with multiple voids.

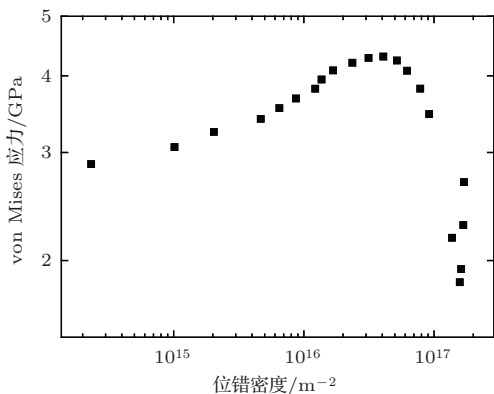


图 12 塑性变形过程中 von Mises 应力与位错密度之间的关系

Fig. 12. The von Mises stress plotted as a function of the total dislocation density.

已有的实验中发现, 塑性变形过程中位错的产生和积累导致 Cu, Al 等 fcc 金属的应变硬化现

象 [31,32]. 应力随位错密度的变化如图 12 所示: 先是 von Mises 应力随着位错密度增大而增大; 当应力达到最大值之后随着位错密度的进一步升高, 开始呈现出软化现象, 应力数值大幅下降. 这一过程的最高应力即流变峰应力约为 4.3 GPa, 对应的应变为 0.06 (如图 2 所示) 位错密度开始进入快速增殖的阶段 (如图 7 (b)). 由此可以推断: 由于孔洞表面产生了大量的新的位错环, 以及这些位错环的滑移运动, 释放了一部分剪应力而导致了软化.

4 结 论

本文基于 EAM 模型的大规模分子动力学模拟表明, 纳米多孔结构会导致 fcc 金属的弹性模量和流变峰应力的降低. 在 [110] 晶向单轴压缩加载下,

4个 $\{111\}\langle 110\rangle$ 滑移系统($(111)[10\bar{1}]$, $(111)[01\bar{1}]$, $(11\bar{1})[101]$ 和 $(11\bar{1})[011]$)将被激活, 导致在孔洞表面发生剪切位错环发射, 开始发生塑性变形, 致使应力应变曲线出现软化. 因此, 位错动力学过程可以描述为: 1) 从同一个孔洞发射的位错相互作用(表现为斥力)导致位错滑移减速; 2) 位错继续滑移, 不同孔洞产生的位错相互作用, 并且位错密度同时增大, 阻碍了位错的运动, 引起应变硬化现象; 3) 随着应变增大, 新产生的位错和它的滑移运动分别释放一部分剪切应力, 导致了软化. 对位错密度-应变图的研究显示: 1) 位错成核之前, 位错密度为0; 2) 位错积累过程(位错密度达到平衡值之前)可分为低速增殖和高速增殖两个阶段.

感谢挪威科技大学结构工程系博士研究生赵凯以及北京应用物理与计算数学研究所邵建立副研究员的讨论.

参考文献

- [1] Lubarda V, Schneider M, Kalantar D, Remington B, Meyers M 2004 *Acta Mater.* **52** 1397
- [2] Shikama T, Pells G 1983 *Philos. Mag. A* **47** 369
- [3] Russell K 1978 *Acta Metall.* **26** 1615
- [4] Yang J H, Zhang T H 2005 *Chin. Phys.* **14** 556
- [5] Marian J, Knap J, Ortiz M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 165503
- [6] 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]
- [7] Rudd R E 2009 *Philos. Mag.* **89** 3133
- [8] Tang Y, Bringa E M, Remington B A, Meyers M A 2011 *Acta Mater.* **59** 1354
- [9] Bhatia M, Solanki K, Moitra A, Tschopp M 2013 *Metall. Mater. Trans. A* **44** 617
- [10] Seppälä E, Belak J, Rudd R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 245503
- [11] Deng X L, Zhu W J, Song Z F, He H L, Jing F Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4772 (in Chinese) [邓小良, 祝文军, 宋振飞, 贺红亮, 经福谦 2009 物理学报 **58** 4772]
- [12] Sun X Y, Xu G K, Li X, Feng X Q, Gao H 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 023505
- [13] Erhart P, Bringa E M, Kumar M, Albe K 2005 *Phys. Rev. B* **72** 052104
- [14] Ruestes C, Bringa E, Stukowski A, Rodríguez Nieva J, Tang Y, Meyers M 2014 *Comp. Mater. Sci.* **88** 92
- [15] Ruestes C, Bringa E, Stukowski A, Rodríguez Nieva J, Bertolino G, Tang Y, Meyers M 2013 *Scripta Mater.* **68** 817
- [16] Rodríguez-Nieva J, Ruestes C, Tang Y, Bringa E 2014 *Acta Mater.* **80** 67
- [17] Bringa E M, Traiviratana S, Meyers M A 2010 *Acta Mater.* **58** 4458
- [18] Zhu W, Song Z, Deng X, He H, Cheng X 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024104
- [19] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [20] Mishin Y, Farkas D, Mehl M, Papaconstantopoulos D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393
- [21] Li J 2003 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **11** 173
- [22] Stukowski A, Albe K 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 085001
- [23] Wu L, Markenscoff X 1996 *J. Elast.* **44** 131
- [24] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, Mukherjee A K, Gleiter H 2002 *Nature Mater.* **1** 45
- [25] Liao X, Zhou F, Lavernia E, He D, Zhu Y 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 5062
- [26] Yuan L, Jing P, Liu Y H, Xu Z H, Shan D B, Guo B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 016201 (in Chinese) [袁林, 敬鹏, 刘艳华, 徐振海, 单德彬, 郭斌 2014 物理学报 **63** 016201]
- [27] Higginbotham A, Bringa E M, Marian J, Park N, Suggit M, Wark J S 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 063530
- [28] Hodowany J, Ravichandran G, Rosakis A, Rosakis P 2000 *Exp. Mech.* **40** 113
- [29] Ferguson W, Kumar A, Dorn J 1967 *J Appl Phys* **38** 1863
- [30] Gorman J, Wood D, Vreeland Jr T 1969 *J Appl Phys* **40** 833
- [31] Simar A, Bréchet Y, De Meester B, Denquin A, Pardoën T 2007 *Acta Mater.* **55** 6133
- [32] Hordon M, Averbach B 1961 *Acta Metall.* **9** 237

Plastic deformation in nanoporous aluminum subjected to high-rate uniaxial compression

Diwu Min-Jie¹⁾ Hu Xiao-Mian^{2)†}

1) (Graduate School, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China)

2) (National Lab of Computational Physics, Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

(Received 24 February 2015; revised manuscript received 7 May 2015)

Abstract

The mechanical behavior of nanoporous monocrystal aluminum subjected to uniaxial compressive loading at a rate of $2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ along [110] crystallographic orientation is studied using molecular dynamics simulations. Subjected to such a loading, nanovoids act as the effective sources of dislocation nucleation and emission, four of the twelve {111}<110> slip systems may be activated. With the same strain of 3.8%, dislocation nucleation will occur in both the sample of multiple voids and that with a single void. The configuration of multiple voids decreases the required stress for the onset of dislocation nucleation and emission in comparison with the sample with an isolated void of the same size. Because of the emission of trial partials, the accumulation of dislocation density can be changed into a piecewise linear process by the dislocation density propagation rate $d\rho_d/d\varepsilon$: in the initial stage of plastic deformation we obtain $d\rho_d/d\varepsilon \approx 1.07 \times 10^{18} \text{ m}^{-2}$, but this changes to $d\rho_d/d\varepsilon \approx 5.36 \times 10^{18} \text{ m}^{-2}$ at higher deformation. The velocity of dislocation is calculated to be subsonic and is a variable value during the plastic deformation. Dislocation loop pairs emit from the same void, glide and approach to each other, leading to the reduction of dislocation velocity. Then one loop of each pair continues to glide to intersect mutually and finally interact with the loops emitted from other voids, causing a strain hardening to reach the peak flow stress of 4.3 GPa. There is a post-yield softening corresponding to the onset of rapid dislocation density proliferation at higher dislocation densities. With the temperature evolution of the sample with multiple voids during plastic deformation, the density of mobile dislocations is calculated to be one magnitude lower than the total dislocation density. There is a decrease of mobile dislocation densities at large strains, showing that the mobile dislocation are diminished by the formation of dislocation forest and junctions. At the onset of their nucleation, the dislocations are all Shockley partials, however, when dislocation intersection happens, the majority are still Shockley partials, while the rest consists of Frank partials, perfect fcc dislocations and other dislocation ingredients. Voids collapse at the strain of 11.8%. No twins are found in the present simulation due to the high stacking-fault energy of aluminum. Prismatic dislocation loop emission is observed in this simulation.

Keywords: molecular dynamics, nanovoid, nanoporous, dislocation

PACS: 02.70.Ns, 61.72.Lk, 61.72.Qq, 62.20.F–

DOI: 10.7498/aps.64.170201

† Corresponding author. E-mail: hu_xiaomian@iapcm.ac.cn