

单晶铜在动态加载下空洞增长的 分子动力学研究*

罗 晋¹⁾²⁾ 祝文军²⁾³⁾† 林理彬¹⁾ 贺红亮²⁾ 经福谦²⁾³⁾

¹⁾ 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

²⁾ 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)

³⁾ 四川师范大学高压物理研究中心, 成都 610068)

(2004 年 7 月 29 日收到 2004 年 11 月 8 日收到修改稿)

冲击载荷下延性材料的损伤是材料中微空洞的产生和长大演化的结果. 利用分子动力学模拟方法对延性金属单晶铜中单个空洞在动态加载下的演化发展进行了研究, 得到了空洞增长过程中的应力分布及空洞增长演化随冲击强度变化的规律. 模拟结果表明, 动态加载下的前期压缩过程对后期拉伸应力场作用下的空洞增长演化特征有不可忽视的影响, 微空洞增长的阈值则与单晶实验中中层裂强度随拉伸应力作用时间减少而增加的趋势相一致.

关键词: 层裂, 分子动力学, 动态加载, 空洞

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

1. 引 言

当冲击或爆炸产生的入射压缩波到达样品(或靶)和飞片的自由面之后, 将反射两个相向而行的稀疏波, 这两束稀疏波在靶中相遇后将导致样品内出现局域的拉伸应力区. 当该拉伸应力区中的应力幅度及宽度满足一定的条件后, 样品将在该处被拉断, 并在靶的背面形成痂片(scab)飞出, 这种动态断裂方式亦称之为层裂(spallation). 它是动态损伤研究的一项重要内容.

对层裂现象的研究历来已久. 早在 1914 年, Hopkinson 就从实验上观察并研究了层裂现象^[1]. 早期的研究认为, 层裂破坏可用简单的拉伸应力判据, 即达到一定阈值应力时会发生层裂现象^[2,3]. 后来, 又逐渐认识到层裂的发生不仅与应力阈值有关, 还与应变率或应力梯度有关^[4-7]. 再后, 又发展到与加载时间长短有关的认识^[8], 也就是提出了损伤累积的新概念.

1976 年 Seaman 等人^[9]通过对软铝和铜等延性金属材料的软回收样品进行了显微观察, 揭示出其

断裂是大量准球形空洞成核和长大的结果. 发现单位体积的空洞数目与应力成指数关系, 空洞体积变化与应力也成指数关系, 从而提出一种考虑微空洞成核和长大效应的微观统计断裂模型——NAG (nucleation and growth) 模型. NAG 模型对微损伤的演化发展进行了较好的描述, 使层裂的唯象研究由宏观转入到介观尺度. 但 NAG 模型所包含的待定参数较多, 各参数的确定需要通过大量的实验数据统计后得到, 同时因为实验条件的限制, NAG 模型对微米尺度以下的微空洞没能进行考虑.

在理论上, 以 Rice 和 Tracey^[10], Carroll^[11], Gurson^[12]以及 Johnson 等人^[13,14]为代表, 在连续损伤力学理论基础上, 采用含空洞的理想弹塑性体在各向同性拉伸应力作用下的物理模型, 通过考虑拉伸应力做功和由空洞体积变化带来的表面能变化的关系, 得到了空洞增长的控制方程, 其中还考虑了材料粘性、塑性功产生热、应变率的影响等因素. 随后, 国内邢修三^[15-17]、白以龙等人^[18]从微观统计理论方法出发, 推导出以裂纹发展的脆性断裂过程中的损伤演化方程. 1997 年, 封加波等人^[19]利用上述统计理论方法, 推导出延性材料中空洞增长的损伤度函数,

* 国家自然科学基金 NSAF 联合基金重点项目(批准号:10476027)和中国工程物理研究院科学技术基金项目(批准号:20030104)资助的课题.

† E-mail: wjzhu@263.net

建立了一个新的动态延性损伤模型. 统计方法的引入, 使得联系微损伤的微观动力学过程和受损伤材料的宏观力学性质成为可能. 这些理论模型希望通过定义损伤内变量, 从损伤的微观机制上建立损伤内变量与加载条件等宏观力学环境的关系, 来描述微损伤成核、长大、及连通过程, 将受损材料的宏观力学性质与微损伤过程联系起来. 但是从目前的研究进展情况看, 建立这种联系还存在一定的困难. 因为目前对微损伤过程的动力学规律还不十分清楚, 微损伤成核、长大的数据还不完备、不充分. 对延性材料来讲, 空洞增长理论模型的建立都是在一定的近似和假设的基础上, 与真实的物理过程相差比较大, 模型中的有关参数也需要用实验来确定. 另外, 用一个损伤内变量来完全反映复杂的微结构损伤的复杂过程还有困难, 比如单个空洞模型还无法考虑空洞增长过程中相互作用以及空洞与其它缺陷的相互作用等.

随着计算机技术的快速发展, 各种数值模拟方法也有了很大的发展. 在数值模拟方法中, 有从研究原子尺度的分子动力学到研究微米或微米以上尺度的离散模型. 特别是分子动力学模拟方法, 在得到原子间相互作用势的条件下, 研究材料动态响应特性时不需要引入任何经验参数, 因而用于对微观尺度物理过程的研究越来越得到广泛的应用^[20-22].

为了研究单晶在动态加载下各向异性的弹塑性响应, Nemat-Nasser 已经在实验和连续介质理论模型上对单晶中空洞和空柱的压缩特性进行了研究^[23], 得到了空洞和空柱在压缩过程中出现的局域塑性流特征. 1998 年, Belak^[24]用分子动力学方法研究了单晶铜及纳米多晶铜在高应变率下空洞的成核和长大情况, 但他在计算模型中简单地施加了各向同性的拉伸应变, 与所模拟的一维碰撞实验有一定差别, 同时还忽略了一维碰撞的前期压缩过程对后期拉伸应力场作用下空洞演化的影响.

本文中, 我们用分子动力学模拟方法, 构筑了一个一维平面碰撞模型, 用于研究纳米空洞在动态加载情况下的演化过程. 在这个复杂应力时变场的作用下, 研究了相关物理量对微空洞长大的影响, 从而在微观尺度上研究微空洞的增长规律. 本文的碰撞模型中也包含了前期压缩过程对后期拉伸应力场作用下微空洞演化的影响. 文中研究了不同加载强度下微空洞增长的规律, 包括空洞增长速度与加载强度关系, 空洞附近应力场分布情况, 及拉伸加载时间

对空洞增长的影响.

2. 数值模拟方法

在本文的分子动力学计算中, 原子间相互作用采用 Mishin 等人^[25]的原子嵌入势模型(EAM), 相互作用势与原子间距离关系见方程(1). 势参数拟合除了满足铜的晶格常数、结合能、体模量、弹性系数、缺陷能和声子谱外, 还对铜的物态方程进行了拟合, 因此适合高速碰撞这样的高压过程模拟. 我们对 Mishin 等人的 EAM 势参数都进行了验证, 然后再用于空洞增长的模拟.

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum_i F(\sum_{j \neq i} \phi(r_{ij})). \quad (1)$$

在本文计算中, 我们模拟了飞片和靶(飞片和靶都是 FCC 结构的铜)平面正碰的过程. 由于碰撞过程很短暂, 在模拟时间的 10 ps 内, 系统和外界交换热能可以认为很小, 因而认为整个模拟系统是绝热的, 初始温度设为 0 K. 如图 1(a)所示, 我们把单晶的 [100] 方向作为碰撞方向, 即图中的 x 方向, 使用自由边界条件. 垂直于碰撞方向的 [010] 和 [001] 方向使用周期性边界条件, 即图中所示 y 和 z 方向. 为保证模拟系统在飞片飞行前原子处在平衡态, 我们先弛豫了 500 步(时间步长为 0.001 ps). 然后给飞片在 x 方向上一特定的初始速度, 让飞片撞击靶, 模拟一维平面正碰过程. 模拟中, 通过改变飞片的初始速度来控制拉伸应力的强度.

在许多前人提出的模型中, 将损伤度定义为空洞和样品基体的体积比. 一般认为^[26], 初始损伤度的量级为 10^{-3} — 10^{-4} . 由此我们构造的样品如下: 样品靶尺寸是 $10.85 \text{ nm} \times 9.04 \text{ nm} \times 9.04 \text{ nm}$, 飞片尺寸是 $5.42 \text{ nm} \times 9.04 \text{ nm} \times 9.04 \text{ nm}$, 并在靶的中心预置一个直径为 1.08 nm 的空洞(是去除 87 个原子后形成的), 计算的总原子数为 111163 个. 我们的研究只考虑了空洞在第一次拉伸应力波作用下的长大情况. 根据我们构造的样品尺寸, 我们对不同初始速度的飞片平面正碰设定的计算步数都是 10000 步, 步长为 1 fs, 总的模拟时间为 10 ps. 模型中, 将飞片和靶的尺寸设为 1:2 的比例(x 方向上), 是由于理论上在此比例下相撞后产生的拉伸应力区首先产生在靶的中心, 以便确保我们预置在靶中心的空洞会首先受到拉伸应力波的作用.

3. 计算结果和讨论

在模拟计算中,我们通过改变飞片的速度设定了 5 种不同的加载条件,研究在上述的不同加载条件下空洞的演化情况. 设定的飞片速度分别为 0.8 km/s, 1 km/s, 1.2 km/s, 1.5 km/s 及 1.8 km/s. 在飞片碰撞靶以后,在飞片和靶的撞击面上形成两个反向传播的压缩波,分别向飞片自由面和靶自由面传播. 当压缩波分别到达两个自由面后,在自由面上反射两个相向而行的稀疏波,向靶的中心部位传播. 当两稀疏波在靶的中心部位相遇后,形成拉伸应力区,然后拉伸应力区向两个自由面方向上延拓. 在它们到达自由面后再反射,相向而行的压缩反射波再次相遇后便结束了靶中心部位的拉伸应力状态. 在 10 ps 的模拟时间内,我们都可以看到不同碰撞速度下的上述拉伸波作用的完整过程.

当飞片速度以 0.8 km/s 的速度与靶正碰后,可以明显看到空洞在压缩波作用下被压变小,空洞表面两层原子出现混乱结构,表面上有少量原子出现“脱落”情况. 当两稀疏波相遇后产生较大的拉伸应力,空洞在拉伸应力作用下逐渐变大,几乎恢复原来的形状,当第二次压缩波来临时候,空洞再次受到压缩. 空洞的形状几乎是可恢复的,没有看到明显增长.

当飞片速度为 1 km/s 时,空洞首先在压缩波作用下减小,空洞表面失去晶体结构的原子层比 0.8 km/s 碰撞时增多,随后空洞在拉伸应力的作用下不断增大,最后超过预置的体积,即空洞发生了不可恢复的变形.

当飞片速度为 1.2 km/s 时,在压缩波作用下的空洞完全闭合,不过在原始空洞所在空间的原子都处于非晶的混乱结构,随后又在拉伸波作用下,在原来空洞中心位置上开始出现空洞,空洞增长速度明显比 1 km/s 碰撞速度条件下快. 图 1 给出了飞片速度为 1.2 km/s 几个不同时刻的靶中原子位置的计算图形. 图中每个小黑点代表一个原子在靶或飞片中的位置. 图中颜色深的代表规则的晶体结构,颜色变浅代表了原子结构混乱程度的加剧. 图 1(a)所示是计算的初始状态, $t = 0$ ps; 图 1(b)表示飞片和靶撞击后, $t = 2$ ps 时靶被压缩及靶中空洞被压小的情形; 图 1(c)是 $t = 4$ ps 时靶继续被压缩及靶中空洞几乎消失的情形; 图 1(d)是 $t = 5$ ps 时在拉伸应力

作用下空洞逐渐长大的情形; 图 1(e)是 $t = 6$ ps 时在拉伸应力逐渐达到峰值作用下空洞继续长大的情形.

当我们把飞片速度加大到 1.5 km/s 时,空洞被压缩和长大的速度更快. 不仅预置的初始空洞在拉伸应力的作用下迅速长大,而且还在预置的初始空洞旁边产生了四个新的空洞,见图 2 所示. 随后,在拉伸应力的继续作用下,这些新的空洞与预置空洞出现部分贯通,形成更大的空洞. 在飞片与靶以 1.8 km/s 速度碰撞时,出现了靶的断裂现象.

为了描述空洞附近结构变化的特征,我们利用键对分析技术(pair analyze)^[27]对每一个原子进行标识. 如果原子处于 FCC 结构时,在图 1 中用黑色表示,如果原子失去 FCC 结构则用浅色表示. 这样,我们可以观测到在不同加载速度下空洞周围原子的结构特征变化的情形. 在不同的加载强度下,我们都观察到在空洞周围出现失去 FCC 结构的原子,形成局域塑性流(图 1 浅灰色区域). 随着加载强度的增加,局域塑性流区域增大. 在图 1 中,我们观测到在压缩过程中在垂直于加载方向上的空洞表面四个顶端处,沿 $\langle 211 \rangle$ 方向滑移(图 1(c)深灰色区域)释放应力,位错线的方向为 $\langle 110 \rangle$,如图 1(c)被放大区域所示沿 $[\bar{1}21]$ 方向发射位错,位错线的方向为 $[\bar{1}01]$,位错滑移面是 $(\bar{1}11)$ 面. 这个结果和 Nemat-Nasser 等人^[23]关于单晶空柱塌缩实验结果是一致的. 通过切片分析,我们还可以看到位错的滑移面正好在 $\{111\}$ 这一族面上,这是因为 FCC 结构的 $\{111\}$ 族面是密排面,位错在这族面上移动所需要克服的势垒是最低的^[28]. 在拉伸过程(见图 1(d) & (e)),空洞增长时并没有出现明显的位错发射现象,这和 Belak 的分子动力学模拟结果是不同的. 在 Belak^[24]的空洞增长模型中,由于没有考虑压缩对空洞的影响,故在空洞增长时空洞表面的原子都处于 FCC 结构,空洞表面积扩张主要以位错发射机制为主. 在我们的模拟过程中,因为压缩过程造成的塑性流局域化,在空洞周围的原子排布已经失去了规则的晶体结构,无法产生晶面滑移的位错机制,从而表现出在后继拉伸应力作用下原子间的解离的增长机制. 因此原子间首先解离的区域明显发生在压缩时空洞发射位错区,这些区域的原子混乱程度比其它区域强,在后面的应力分析中我们同时发现这些区域的应力比较集中.

在层裂研究中,应力随时间变化的历史过程对于损伤的发生有重要作用. 我们通过 Virial 定理^[29],

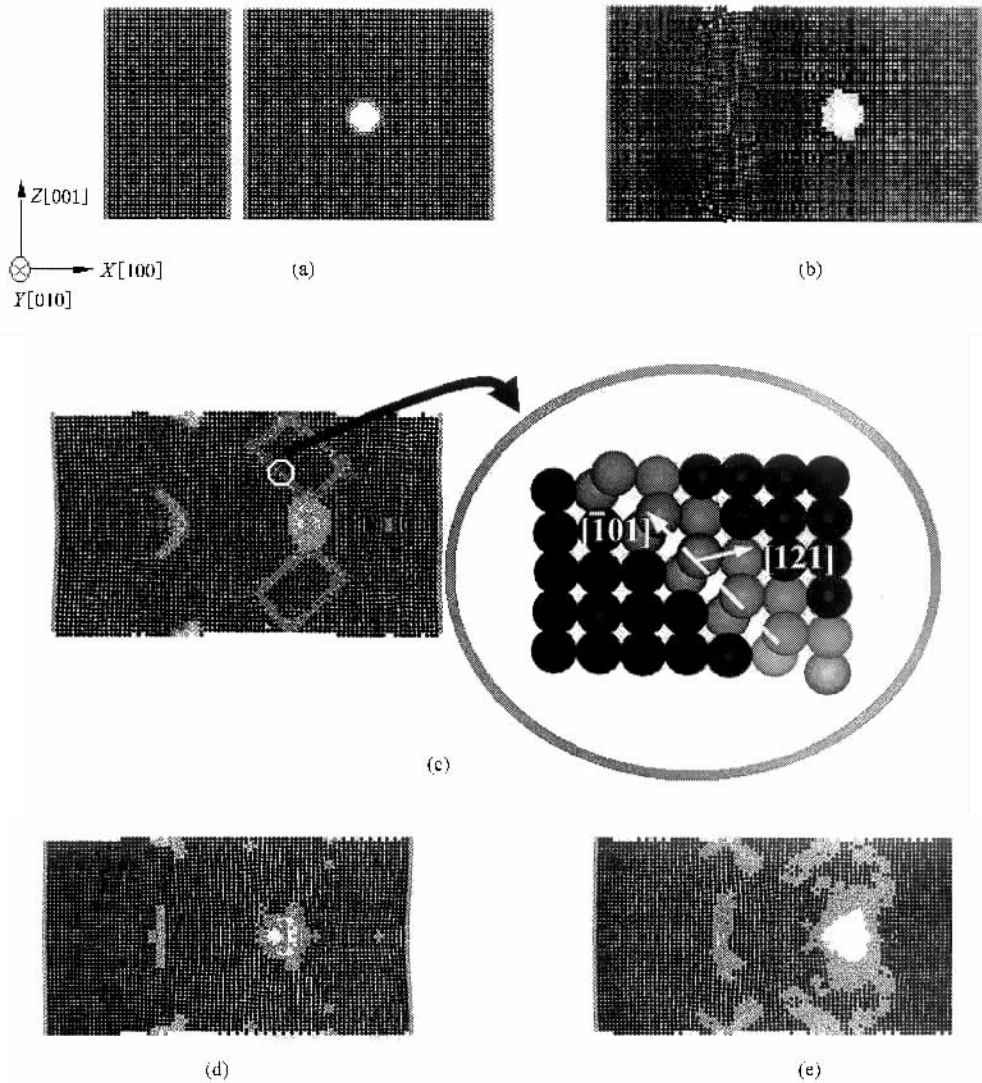


图1 碰撞速度为 1.2 km/s 时,不同时刻 xz 平面上原子位置(包含3个原子层的切片)的计算图形.浅灰色是非晶区;深灰色是位错区;黑色是晶体区 (a) $t=0 \text{ ps}$ (b) $t=2 \text{ ps}$ (c) $t=4 \text{ ps}$ (d) $t=5 \text{ ps}$ (e) $t=6 \text{ ps}$

可以得到应力分布随时间变化的关系.图3是碰撞速度为 1.2 km/s 时,时间在 6 ps 时刻的应力分布图,图中应力单位为 GPa .在不同加载速度下,空洞被压缩的过程中,都可以发现空洞塌缩现象.由图3可以看出,四个应力最集中的区域出现在通过空洞中心的 $[010]$ 和 $[001]$ 轴与空洞相交的空洞表面附近.这反映了晶体在一维碰撞下弹塑性各向异性的响应特征,也是空洞在这四个区域发射位错的原因所在.在拉伸状态时,空洞表面附近的这四个区域也是拉伸应力最集中的地方.因此空洞增长时,位于这四个区域的原子也是解离最多的区域.由于这样的应力分布,造成空洞增长的形状不是球形而像一个椭球.因为飞片压缩时,压缩波先经过空洞左面,因此造成的空洞周围的塑性流局域区并不对称,在随后对称拉

伸波作用下,使空洞的增长形状并不是一个理想的椭球形(见图1(e)).应力分布造成的空洞增长大致呈椭球形状这一现象,说明了空洞最容易在垂直于加载方向上发生连接,也说明了为什么实验中发现层裂方向总是在垂直于加载方向的事实.由于空洞表面是自由面,而且空洞在压缩和拉伸过程中形状要变化,空洞表面上反射的应力波造成整个模拟空间的应力分布非常复杂,应力分布示意图见图3,并不是象 Belak^[24]模型中的各向同性的应力分布.在没有缺陷存在情况下,拉伸应力场在两个拉伸应力波阵面之间是均匀应力场,应力波的幅值和碰撞速度呈正比关系.因为缺陷与拉伸应力波相互作用,从图3可以看出在空洞附近,应力场非常复杂,不过在离开空洞一段距离,我们仍然可以找到比较均匀的

拉伸应力场,也称远场应力.如图3(a)所示,两虚线间的区域即为该加载强度下的远场应力区,远场应力峰值是在这个区域所取最大值.我们找到了冲击加载方向上远场拉伸应力峰值以及空洞附近局域应力峰值与飞片的初始速度的关系,如表1所示.由表1,我们可以看出飞片的速度越大,产生的远场拉应力也随之变大,空洞长大速率也随之变大.在加载强度没有到达出现多个空洞时,局域峰值应力也随加载强度增加而增加.但在碰撞速度为1.8 km/s时,局域峰值拉伸应力反而比碰撞速度为1.5 km/s的情况下下降,这是因为此时原来空洞附近以及飞片靶碰撞界面上出现多个空洞,使整个空洞附近局域应力松弛的原因.

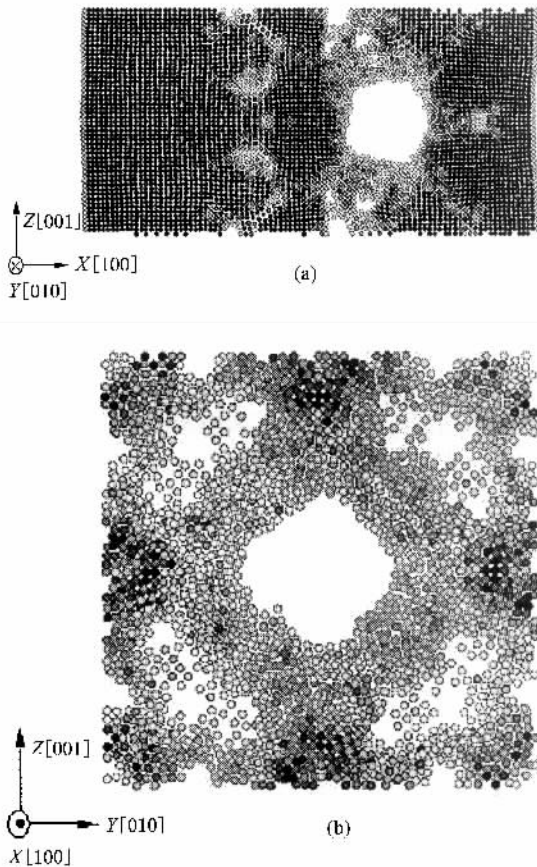


图2 碰撞速度为1.5 km/s, $t = 6$ ps时原子位置(包含3个原子层的切片)的计算图形 (a) xz 平面 (b) yz 平面

在1.0 km/s的碰撞速度下,我们明显观测到空洞增长超过原来体积的现象.这时候远场应力峰值是12.5 GPa,这虽然比把一层原子面完全截断所需要的应力约30 GPa小得多,但是比目前测得的多晶铜的层裂强度0.62—2.3 GPa^[30]大得多.也比Kanel等人^[31]等测得的单晶铜层裂强度4 GPa大很多.我

们分析其原因主要有以下几个:虽然我们的计算模型中是在单晶铜中预置了一个空洞,还没有考虑空洞之间以及其它晶界、位错间的相互作用,而多晶铜中这些扩展缺陷大量存在,因此单晶铜的层裂强度在实验中明显比多晶铜高;在Kanel等人^[31]的单晶铜层裂实验中,因为加工的原因不能保证单晶样品中没有少量缺陷的存在,因此这些缺陷的相互作用的影响很难排除,而且因为层裂强度的实验数据是由测自由面速度间接得到的,其中模型的影响也不可忽视,例如早期单晶铜层裂实验^[32]的层裂阈值超过20 GPa;另外一个重要的原因是损伤累积时间的影响,我们的样品厚度只有约10 nm,这样拉伸应力作用时间只有约2 ps,比已有的单晶实验小3—6个数量级^[31].1991年Kanel等人^[31]通过大量实验数据比较得出了单晶铜的层裂强度远大于多晶铜,而且得到样品的厚度越小层裂强度越大的趋势.因此我们计算的层裂强度的趋势是合理的.但是目前还没有这样薄的样品,应力阈值的准确性还需要等待进一步实验验证.

空洞体积增长随时间和加载条件变化的关系,是损伤力学里非常关心的问题.为了得到不同时刻

表1 飞片的初始速度与加载方向上远场拉应力峰值以及空洞附近局域拉应力峰值的关系. σ_{1max} 是远场拉伸应力峰值, σ_{2max} 是空洞附近局域拉伸应力峰值.

$V_0/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	σ_{1max}/GPa	σ_{2max}/GPa
0.8	11.5	15.3
1.0	12.5	17.5
1.1	13.0	18.5
1.2	14.5	19.5
1.3	15.0	20.2
1.5	16.5	21.6
1.8	17.5	19.5

空洞的体积,我们先将模拟盒子分割成一个个立方小格子,小格子的体积是固定不变的,是铜一个晶胞的大小.然后对于靶中每个这样的小格子,判断是否有原子在里面.最后对那些没有原子的小格子进行判断,是否确实是属于空洞的一部分.由于立方小格子很可能恰好处于靶中没有原子的间隙,这样处于间隙的立方小格子虽然没有原子,但并不是属于空洞的一部分,所以还必须对那些没有原子的小格子进行判断.如果没有原子的小格子周围临近的26个小格子中,任意有一个小格子也同样没有原子,那这

两个没有原子的小格子就是空洞的一部分. 通过这样的方法判断出空洞所在的位置, 并计算属于空洞的小格子的数目, 从而确定空洞的体积. 我们计算了每个时刻空洞的体积, 空洞体积随时间变化的关系曲线如图 4 所示. 从图 4 可以明显看出空洞增长率随加载强度增强而加快.

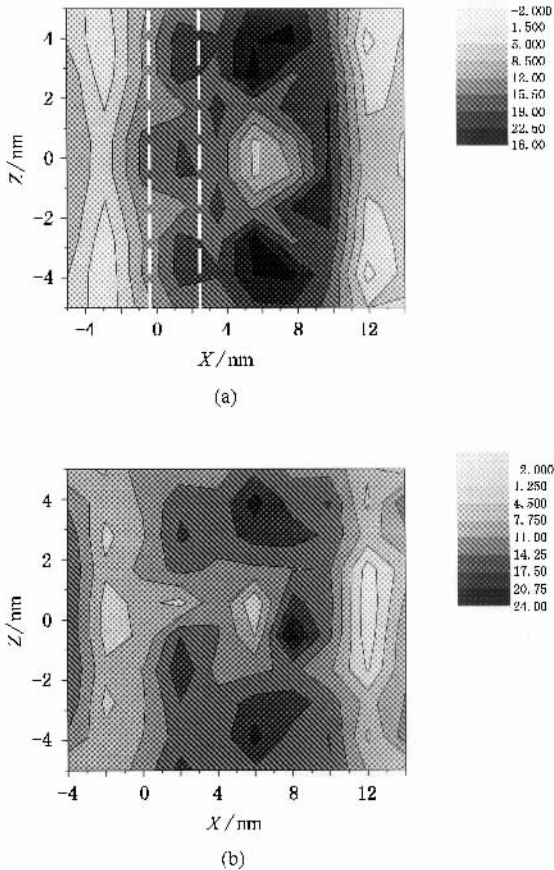


图 3 碰撞速度为 1.2 km/s, $t = 6$ ps 时, xz 平面上应力分布 (a) σ_{xz} 分布 (b) σ_{yy} 分布

我们对空洞体积和时间以及不同加载强度下的远场拉应力峰值的关系数据进行拟合, 得到它们之间的关系式

$$V = -2V_0 + 45e^{(t+t_0) \times 0.26\sigma - 2.55}, \quad (2)$$

其中 t_0 是与模拟开始时刻相关的时间常数, σ 是计算中不同加载条件下加载方向上的最大拉应力, V_0 是空洞的预置体积.

从公式 (2) 中, 我们发现单晶中空洞的体积增长与拉伸应力呈指数关系, 这与 Seaman, Curran 和 Shockley^[9] 显微分析得到的多晶铜中空洞增长规律是

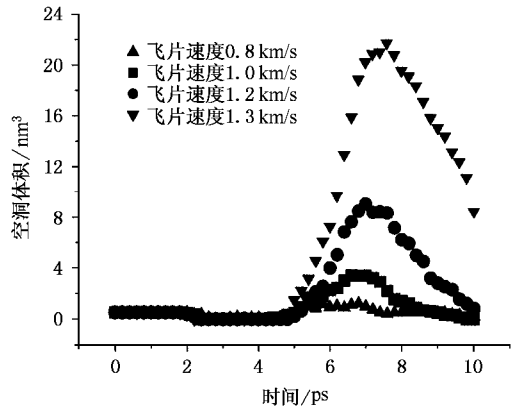


图 4 空洞体积随时间的变化

一致的. 不过 Seaman 等人发现的规律因为实验条件的限制, 是在微米以上的空洞增长过程中观察到的. 在本文研究中, 我们发现这种空洞增长规律在微米以下的尺度依然存在. 在碰撞过程中, 塑性变形做功会产生温升. 已有的实验研究表明在我们所研究的 20 GPa 应力范围, OCPH 铜的温升小于 200 K^[33], 温升比较小, 在本文中暂不讨论温度效应对空洞增长的影响.

4. 结 论

本文用飞片和靶平面正碰且靶中心预置一个空洞的模型, 利用分子动力学方法, 研究了空洞在一维应变情况下的微观增长过程. 在一个完整的压缩和拉伸过程中, 纳米尺度的空洞增长的规律与拉伸应力关系呈指数关系, 与宏微观尺度的实验规律一致. 特别是我们发现动态加载的前期压缩过程对于空洞的增长及增长形貌有不可忽视的作用. 同时, 我们分析了空洞在一维加载情况下, 在增长过程中的复杂应力分布情况, 从微观尺度给出了空洞增长过程中加载条件与空洞增长的关系, 为建立真实和更少经验参数的延性材料的动态损伤模型提供了进一步的信息. 在本文的研究中, 对于压缩和拉伸过程中温度效应并还没有考虑. 实际情况中空洞间的连接或者贯通是层裂产生的重要因素. 我们将在进一步的研究模型中, 考虑这些因素的影响.

感谢中国工程物理研究院计算机研究所张亚林在程序并行编码过程中提供的帮助.



- [1] Hopkinson B 1914 *Roy. Soc. Phil. Trans. A* **213** 437
- [2] Rinehart J S 1951 *J. Phys.* **22** 131
- [3] Rinehart J S 1952 *J. Phys.* **23** 1229
- [4] Whiteman P 1962 *Atomic Weapons Research Establishment Report*, UNDEX : 445
- [5] Bread B R, Mader C L and Venable D 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 3271
- [6] Butcher B M, Barker L M, Munson D E and Lundergan C D 1964 *AIAA J.* **2** 977
- [7] Tuler F R and Butcher B M 1968 *Inter. J. Fract. Mech.* **4** 431
- [8] Barbee T W, Seaman L, Crewdson R and Curran D 1972 *J. Mater.* **7** 393
- [9] Seaman L, Curran D R and Shockey D A 1976 *J. Appl. Phys.* **47** 4814
- [10] Rice J R and Tracey D M 1969 *J. Mech. Phys. Solids* **17** 201
- [11] Carroll M M and Holt A C 1972 *J. Appl. Phys.* **43** 1626
- [12] Gurson A L 1977 *J. Eng. Mater. Tech.* **99** 2
- [13] Johnson J N 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 2812
- [14] Johnson J N and Addressio F L 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6699
- [15] Xing X S 1980 *Acta Phys. Sin.* **29** 718 (in Chinese) [邢修三 1980 *物理学报* **29** 718]
- [16] Xing X S 1986 *Acta Phys. Sin.* **35** 741 (in Chinese) [邢修三 1986 *物理学报* **35** 741]
- [17] Xing X S 1991 *Acta Mech. Sin.* **23** 123 (in Chinese) [邢修三 1991 *力学学报* **23** 123]
- [18] Bai Y L, Ke F J and Xia M F 1991 *Acta Mech. Sin.* **23** 290 (in Chinese) [白以龙、柯孚久、夏蒙芬 1991 *力学学报* **23** 290]
- [19] Feng J P, Jing F Q and Zhang G R 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 2575
- [20] Ma X L and Yang W 2003 *Acta Mechanica Sinica* **19** 485
- [21] Xu Y, Pan Z Y and Wang Y X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 88 (in Chinese) [徐 毅、潘正瑛、王月霞 2001 *物理学报* **50** 88]
- [22] Chen J, Jing F Q, Zhang J L and 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]
- [23] Nemat-Nasser S, Okinaka T, Nesterenko V and Liu M 1998 *Philosophical Magazine A* **78** 1151
- [24] Belak L 1998 *Journal of Computer-Aided Materials Design* **5** 193
- [25] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F and Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [26] Nemes J A, Effitis J and Randles P W 1990 *J. Appl. Mech.* **57** 282
- [27] Honeycutt J D and Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [28] Callister W D, Jr 2000 *Materials Science and Engineering* (New York : John Wiley & Sons, Inc.) p158
- [29] Hoover Wm G 1991 *Computational Statistical Mechanics* (Netherlands : Elsevier Science Publishers B.V.) p140
- [30] Davision L and Graham R A 1977 *Phys. Rep.* **55** 255
- [31] Kanel G I, Rasorenov S V and Fortov V E In Meyers M A, Murr L E and Staudhammer K P (Eds.) 1991 *Shock-Wave and High-Strain-Rate Phenomena in Materials* (New York : Marcel Dekker) p775
- [32] McQueen R G and Marsh S P 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 654
- [33] Hayes D, Hixson R S and McQueen R G In Furnish M D, Chhabildas L C and Hixson R S (Eds.) 2000 *Shock Compression of Condensed Matter-1999* (Meville New York : American Institute of Physics) p483

Molecular dynamics simulation of void growth in single crystal copper under uniaxial impacting^{*}

Luo Jin^{1,2)} Zhu Wen-Jun^{2,3)†} Lin Li-Bin¹⁾ He Hong-Liang²⁾ Jing Fu-Qian^{2,3)}

¹⁾ Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

²⁾ Lab of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621900, China)

³⁾ Center of High Pressure Physics Research, Sichuan Normal University, Chengdu 610068, China)

(Received 29 July 2004 ; revised manuscript received 8 November 2004)

Abstract

The evolution of micro-voids under dynamic loading mainly contributes to the dynamic damage of ductile materials. In this work, the evolution of a preexisting nano-void in single crystal copper is investigated by means of molecular dynamics (MD) simulation. The relation between the time evolution of complicated stress distribution and the void growth is obtained. The precompression process before the tension process has strong influence to the void growth. That high threshold makes the void grow coincides with the trend that a shorter tension duration will lead to a higher spallation strength, which was found in latest single crystal spallation experiment.

Keywords : spallation, molecular dynamics, dynamic loading, void

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

^{*} Project supported by Joint Fund of NSFC and the China Academy of Engineering Physics (Grant No. 10476027) and by Science and Technology Fund of China Academy of Engineering Physics (Grant No.20030104).

[†]E-mail : wjzhu@263.net