

冲击条件下含纳米空洞的单晶铜的塌缩*

杨其利¹⁾ 张广财²⁾ 许爱国²⁾ 赵艳红²⁾ 李英骏^{1)†}

1) 中国矿业大学(北京), 北京 100083)

2) 北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

(2007 年 3 月 4 日收到, 2007 年 7 月 6 日收到修改稿)

利用分子动力学方法研究了单晶铜中不同大小的球形空洞在冲击波下的演化过程. 模拟结果表明不同大小空洞的塌缩过程不同. 模拟中冲击波由空洞左边扫向空洞右边. 在较大尺寸的空洞塌缩过程中会产生系列的位错环. 当空洞半径较小时, 先在空洞的右侧形成位错环, 当空洞半径增大到某一临界大小时, 在空洞左右两侧同时产生位错环, 当空洞半径较大时, 先在空洞左侧形成位错环. 当空洞左右两侧的位错环均形成以后, 其右侧位错环前端的生长速度大于其左侧的. 空洞半径增大, 相应的位错环前端的生长速度变化不大. 当空洞半径增大时, 空洞中心指向位错源的矢量方向与冲击方向的夹角逐渐增大.

关键词: 纳米空洞, 位错环, 冲击波, 塑性变形

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

1. 引 言

研究表明辐照损伤材料的硬化与材料内部微结构对位错线的钉扎效应有关^[1]. 准断裂金属材料的电子显微镜观察发现, 断裂是材料中微损伤(微空洞、微裂纹等)的累积所导致的^[2]. 金属的层裂是材料在卸载稀疏波作用下微空洞的成核、生长和贯通的微观过程. 固体炸药起爆首先发生在受到冲击波作用的固体炸药颗粒间隙塌缩形成的热点处^[3]. 冲击波加载的金属材料在自由面附近出现的微物质喷射现象也与表面近处微空洞及杂质有关^[4]. 金属材料在加工过程中或经过长时间的辐照后, 在其内部会形成大量缺陷结构, 包括位错、层错四面体、微晶粒、晶界以及微空洞. 这些微结构对于材料的高压状态方程影响主要是疏松效应, 材料的弹塑性本构及断裂性质对这些微结构很敏感, 因此从微观尺度研究纳米空洞问题对于理解材料的破损机理及提高材料性能方面有重要的意义. 静态应力加载下, 金属的塑性变形可以用位错运动来描述, 但由于位错动力学没有考虑位错的惯性运动, 应用位错动力学研究像冲击加载这类问题并不是最好的方法, 目前最好

的方法还是分子动力学方法. 应用分子动力学可以研究动态加载下, 位错的产生发展过程及位错动态变化的典型特征.

常压下金属晶体中空洞生长是一个缓慢的过程, 涉及到微秒、秒甚至更长的时间尺度, 但在较强的冲击过程中, 空洞生长可缩短到皮秒量级. 从另一方面来说, 用实验方法观测到像冲击这类瞬态过程还比较困难, 虽然应用透射电子显微镜对材料断裂的研究已取得了很大进展, 但是通过电子显微镜技术获得的照片所分辨的尺度仍受到一定的限制, 基于这一点, 如从原子尺度研究材料的破损机理, 电子显微镜技术仍有一定的局限性. 因此无论从研究的时间尺度和研究对象来说, 分子动力学模拟方法对于从微观上研究材料动态破坏机理都是一种较有力的工具. 到目前为止, 国内外的许多学者应用分子动力学方法模拟了金属中空洞在静压及动态拉伸、冲击作用下的生长规律^[5-8], 但很少有人对空洞塌缩问题做较细致的分析. Davila 等人^[9]证实了在空洞塌陷中不断释放剪切形的位错环而不是菱形的位错环, 并给出了空洞塌缩的阈值和空洞大小之间的关系. 罗晋等人^[6]重点研究了动态加载下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

* 国家自然科学基金(批准号: 10135010)和国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 2005CB221500)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: lyj@aphy.iphy.ac.cn

规律.本文采用分子动力学的方法对单晶铜中空洞在冲击压缩下的演化过程进行了研究,但与其他学者研究的重点不同,我们关注的是不同大小空洞的塌缩特征及位错源的位置,以及空洞塌缩过程中所形成的位错环的生长速度.

2. 模拟方法

2.1. 势函数

本文采用了分子动力学的模拟方法,该方法中通过数值求解以下牛顿方程来模拟系统分子的运动:

$$M_i \ddot{R}_i = F_i. \quad (1)$$

模拟中所选用的金属为单晶铜,因为单晶铜是典型的面心立方结构的金属,也是较常见的一种金属,所以对它的模拟相对多一些,这样也便于我们把模拟得到的结果和其他学者得到的结果相比较,以验证所采用程序的正确性.自 Daw 和 Baskes 提出了原子嵌入模型(EAM)^[10]以来,越来越多的人在分子动力学方法中引用这种形式的势函数,因为这样所模拟出的结果与实验得到结果符合得很好,本文也应用到这种形式的势函数,其基本表达式为

$$U = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (2)$$

上式右边第一项为对势,反映了离子实间的相互作用,第二项为镶嵌能,反映了离子实和电子之间的短程作用.其中 r_{ij} 是第 i 个原子和第 j 个原子间的相对位移, $\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij})$ 为除第 i 原子以外的所有其他原子的核外电子在第 i 个原子处所产生的电子密度之和.应用模拟程序中的势参数计算出势函数中各

量之间的关系(如图 1 和图 2).

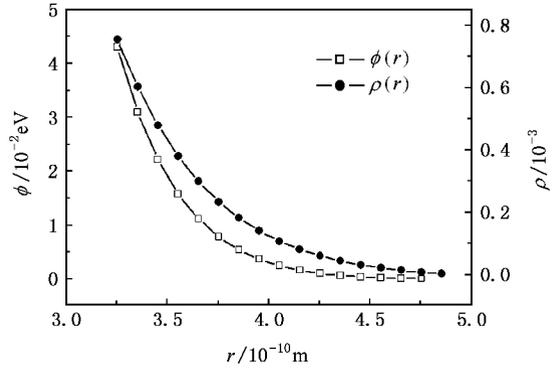


图 2 对势及电子云密度和原子间距关系图

程序中势参数的验证如下:首先依据程序中金属铜的势参数计算出铜的弹性常数,再与《物理学常用数表》^[11]中弹性常数作比较(如表 1 所示).由表 1 中数据可看出,计算出的弹性常数值与其参考值符合的很好,证明了模拟程序的正确性.

表 1 模拟中势参数的验证(参考值指由《物理学常用数表》中查到的弹性常数值,计算值指由程序中势参数计算出的弹性常数值)

	$C_{11}/10^{10}$ Pa	$C_{12}/10^{10}$ Pa	$C_{44}/10^{10}$ Pa
参考值	16.84	12.14	7.54
计算值	16.72	12.40	7.64

晶格常数的验证:应用分子动力学的模拟程序计算了铜的晶格常数和晶体中原子结合能的关系(如图 3 所示),得到铜在常态下的晶格常数为 0.3615 nm,原子结合能为 -3.54 eV.

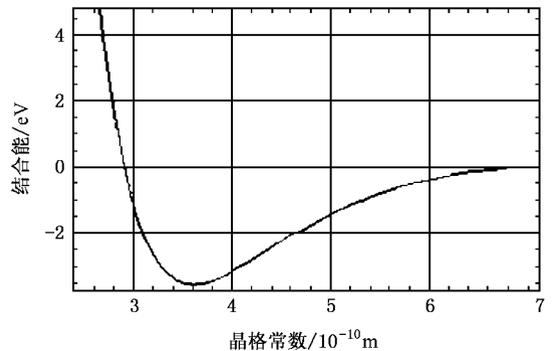


图 3 晶格常数和结合能关系图

金属铜的状态方程的验证:应用分子动力学的模拟程序得到了绝对零度下同一晶体的体积和压力变化关系图,如图 4 所示, V_0 为晶体晶格常数为 0.3615 nm 时的体积, V 为晶体被压缩后的体积,得

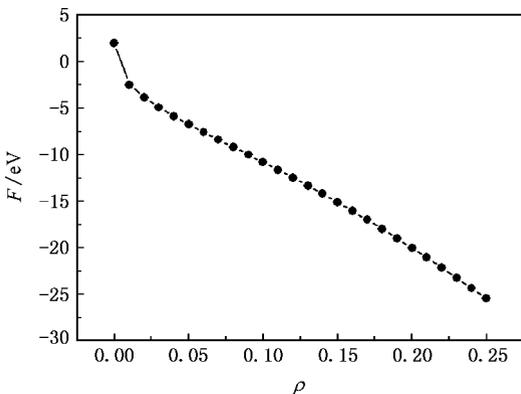


图 1 镶嵌能和电子云密度关系图

到的曲线图和 Mishin 等人^[12]的计算结果符合的很好.

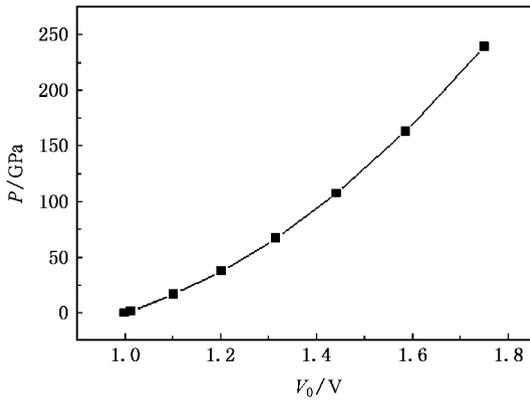


图4 模块体积和压力变化关系图

2.2. 物理模型的构建

本文设置的模型可分为三部分:飞片尺寸为 $15a \times 30a \times 30a$ (a 为常温常压下单晶铜的晶格常数,其大小为 0.3615 nm),靶的尺寸为 $30a \times 30a \times 30a$,在靶的中心分别预置半径不同的球形空洞,靶和飞片中原子均作面心立方结构排列;飞片在靶的左侧,飞片冲击靶的方向为 $[100]$ 方向,即 x 方向.当飞片和靶碰撞后,它们必定一起共同向右运动一段距离,所以在靶的右侧预留部分空间,其尺寸为 $30a \times 30a \times 30a$.由于辐照老化早期形成的空洞大小都在纳米量级,故选定空洞半径分别为 $0.5a, 1.0a, 2a, 2.5a, 3a, 3.5a$ 构建六种不同的模型,分别进行模拟.五种条件下飞片的速度大小均为 1.085 km/s ,冲击波速度大小为 4.75 km/s ,冲击强度为 23 GPa $[010]$ 和 $[001]$ 方向分别为 y, z 方向,在这三个方向上均使用周期性边界条件.

3. 模拟结果分析

研究缺陷金属的塌缩问题和研究连续介质不同,研究塌缩问题须从金属的微观结构出发分析塑性形变区的位错结构.本文中应用键对分析技术^[13]找出发生位错的原子(本文图形中标志出的原子均为发生位错的原子),对不同时刻的位错结构和位错运动过程分析得到空洞塌缩的细致物理过程.

通过模拟发现,当冲击波和空洞相互作用时,伴随空洞的塌缩会产生大量的位错,在已滑移区和未滑移区的边界形成位错环,且对于大小不同的空洞

来说,产生的位错特征是不同的.

3.1. 冲击波下空洞及位错演化过程

飞片以 1.085 km/s 的速度撞向靶,在靶和飞片的两撞击面将产生两方向相反的冲击波,靶中冲击波由空洞的左边扫向右边,冲击波到达空洞所用时间恰可作为空洞的弛豫时间,对应不同大小的空洞,这段时间为 1 ps 左右.本文仅考虑冲击波与空洞的作用过程,对后期稀疏波的影响暂不研究.

3.1.1. 点缺陷与冲击波作用过程

当冲击波到达点缺陷时,其附近原子仍作规则排布(如图5(a)).当冲击波和点缺陷发生相互作用时,其附近原子仅在冲击波作用下被压缩(如图5(b)).冲击波扫过点缺陷后,点缺陷周围原子恢复为原来的规则结构(如图5(c)),在整个过程中没有出现塑性形变,仅是出现了在弹性限度内的变形.

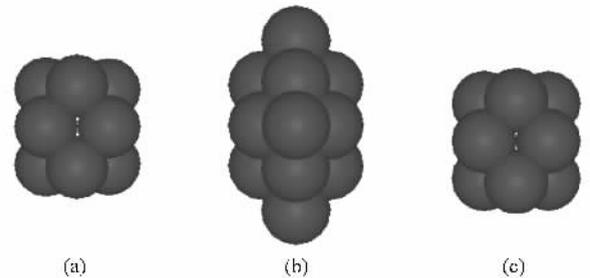


图5 点缺陷附近原子在冲击波作用下的演化图 (a) $t = 1.1 \text{ ps}$ (b) $t = 1.5 \text{ ps}$ (c) $t = 1.7 \text{ ps}$

3.1.2. 空洞的塌缩过程

当半径为 $2a$ 的空洞与冲击波相互作用时,空洞周围位错区如图6所示.图6(a)为冲击波刚到达空洞情况,空洞仍为球状.图6(b)为冲击波刚扫过空洞的情况,空洞已经开始塌缩,但仅是空洞周围原子发生位错,远离空洞的原子仍作规则面心立方结构的排列,位错环首先在空洞的右侧形成,在四个密堆积面上形成四条 Burger 矢量为 $211/6$ 的一系列的位错环(图6(b)和(c)中黑色边缘).随后在空洞的左侧产生类似的4条位错环,在空洞的左右两侧均形成“漏斗状”的层错区(如图6(c)灰色区域).这与 Davila 等人^[9]的研究结果有所不同,他们模拟了冲击波强度为 8 GPa ,空洞半径为 $1.5a$ 的情况,其模拟结果为:在空洞与冲击波先接触的一侧产生位错环,随后在空洞的另一侧产生位错环.随时间的演化,伴随有层错区域扩展、位错环生长的现象.面心立方结构的一层 (111) 面原子滑移了 $1/6 [2\bar{1}\bar{1}]$,就

形成了一层层错,晶体的能量增加了层错能,若层错能较小,则滑移原子处于亚稳态^[14],已滑移和未滑移的边界即是 Shockley 分位错。

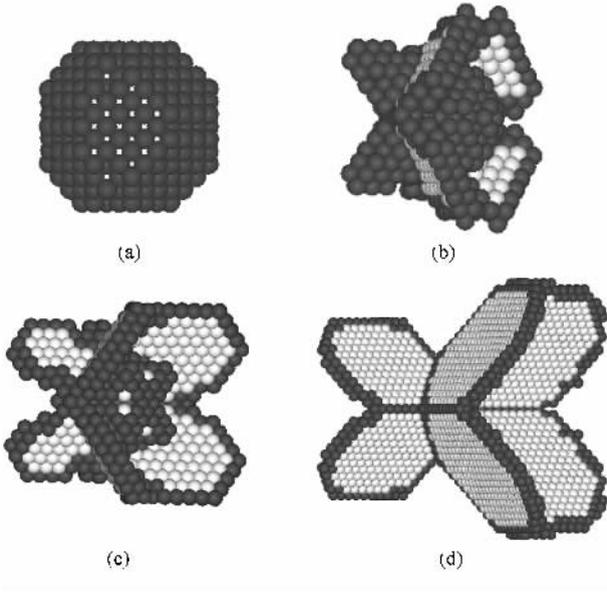


图6 空洞位错演化图

在更大尺寸的空洞的塌陷过程中,形成的位错结构与小尺寸的略微不同.如图7所示,图7(a)和(b)分别为空洞半径为 $2a$ 、 $3a$ 时的位错图,半径为 $2a$ 的空洞的左侧仅有一层层错区,而半径为 $3a$ 的空洞左侧出现了两层层错,这主要由于空洞较大时,空洞塌缩形成一层层错后,空洞内部仍有多余空间可供空洞附近原子滑入,形成另一层新的层错.空洞半径越大,形成的层错层数越多。

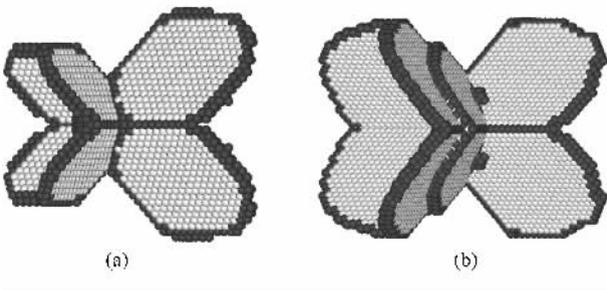


图7 空洞半径为 $2a$ (a)和 $3a$ (b)时的位错结构比较图

3.2. 空洞大小对位错对称性的影响

当不同大小空洞与冲击波相互作用时,冲击波首先从空洞的左侧进入,随后在空洞左右两侧都形成漏斗状的层错区.通过比较发现,在冲击强度为 23GPa 的条件下,当空洞半径较小时,在空洞的右侧先生长出位错环,如图8(a)和(b)所示,图中可看出

空洞右侧位错较大.宋振飞等人^[15]在研究单晶铜中空洞周围位错演化发现,对于面心立方结构的晶体,当滑移面和 x 轴方向的夹角为 35° 时,最大剪应力出现的位置恰为本文中尺寸较小空洞塌缩形成位错环的位置.当空洞半径增大到一定的临界值(空洞半径为 $2.5a$)时,两侧同时产生位错环,如图8(c)所示,空洞左右位错环对称性较好.这主要因为空洞半径达到某一值时,空洞表面每个原子周围原子的密度变小,空洞左侧原子对冲击强度的抵抗性变弱,和右侧同时出现塌缩现象.当空洞半径大于此临界值时,空洞左侧先长出位错环,如图8(d)所示,图中显示左侧位错环较大。

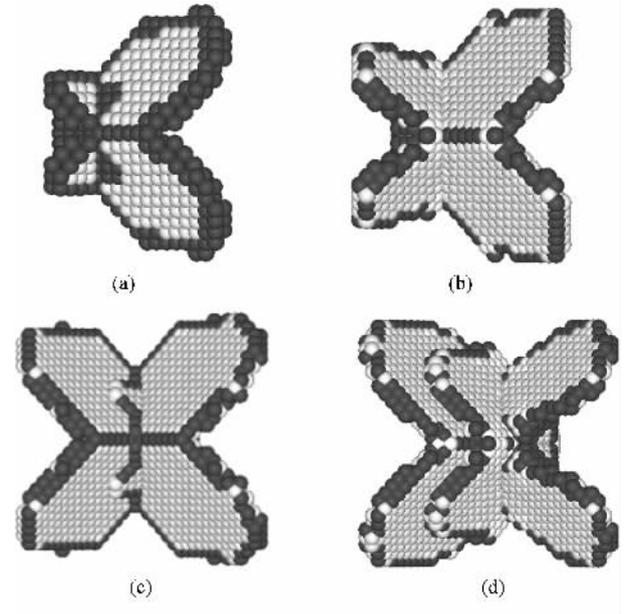


图8 层错区域的不对称性 图中所示为不同半径的空洞与冲击波作用时间均为 2ps 时形成的位错图形 (a) $r = 1.5a$ (b) $r = 2a$ (c) $r = 2.5a$ (d) $r = 3a$

3.3. 位错源位置

当应力集中于纳米空洞附近时,在空洞附近容易产生位错,我们通过确定不同大小空洞的位错源位置来研究空洞大小和位错源位置的关系.由于在空洞左右两侧均产生位错环,故对应每一个空洞均有两个位错源,且位错源分布于球面上.文中通过球心指向位错源的矢量方向与冲击波方向(即 x 轴)的夹角来确定位错源的位置.球心指向空洞右侧位错源的矢量方向与 x 轴的夹角为 θ ,球心指向空洞左侧位错源的矢量方向与 x 轴的夹角为 φ ,如图9所示,我们计算了空洞半径分别为 $2a$ 、 $3a$ 、 $3.5a$ 时对应的 θ 和 φ 值,计算表明,随着空洞半径的增大, θ

和 φ 的值逐渐增大(如表 2 所示),位错源位置趋向于冲击波和空洞最先接触的位置移动.

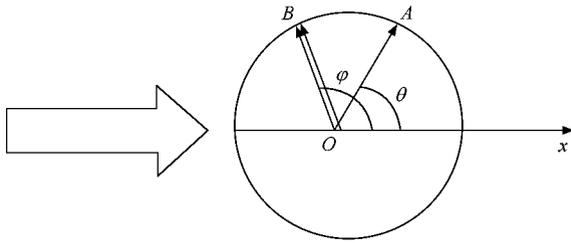


图 9 球形空洞沿[001]方向的剖面图 右侧大箭头所指方向为冲击波方向,O点为球心,圆中箭头所指A,B点分别为前后位错源的位置, θ 和 φ 分别为矢量OA,OB与x轴方向的夹角

表 2 当空洞半径分别为 $2a$ $3a$ $3.5a$ 时对应的 θ 和 φ

	$r = 2a$	$r = 3a$	$r = 3.5a$
θ	83.90°	101.1°	105.2°
φ	109.5°	116.4°	120.3°

3.4. 位错环的生长速度

对于不同大小的空洞,其塌缩的速度反映在位错环的生长速度,由于原子发生位错时没有攀移,只是滑移,位错运动只发生在平面上,所以可将位错环原子坐标投影在原子滑移面中的一个二维坐标系里.由于位错环生长具有对称性,对应大小不同的空洞,本文均选择(111)面及(1 $\bar{1}\bar{1}$)面上的位错环作为研究对象,(111)面位错环位于空洞的左侧,(1 $\bar{1}\bar{1}$)面位错环位于空洞的右侧.在(1 $\bar{1}\bar{1}$)面建立新二维坐标系,其横轴为[0 $\bar{1}\bar{1}$]方向,纵轴为[2 $\bar{1}\bar{1}$]方向.在(111)面建立新二维坐标系,其横轴为[0 $\bar{1}\bar{1}$]方向,纵轴为[2 $\bar{1}\bar{1}$]方向.分别将(111),(1 $\bar{1}\bar{1}$)面上位错环原子坐标向新坐标系投影,如图10所示.图中显示了空洞半径为 $2a$ (1 $\bar{1}\bar{1}$)面位错环原子坐标在 1.6, 1.7, 1.8 和 1.9 ps 这四个时刻在新坐标系中的投影.本文研究了在新坐标系中横坐标为零的点对应的生长速度,文中称其为位错环前端的生长速度,研究表明,空洞右侧位错环前端的生长速度大于其左侧的,如图11所示,图中比较了空洞左右位错环前端在 1.6, 1.7, 1.8, 1.9, 2.0, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 和 2.6 ps 时的生长速度,在这几个时刻,空洞右侧位错环前端生长速度总是大于左侧的.随着空洞半径的增大,位错环前端的生长速度变化不大,如图12所示,图12中显示了空洞半径分别为 $2a$ 和 $3a$ 时,空

洞右侧位错环前端在不同时刻的生长速度,对应不同时刻,其生长速度相差不大.

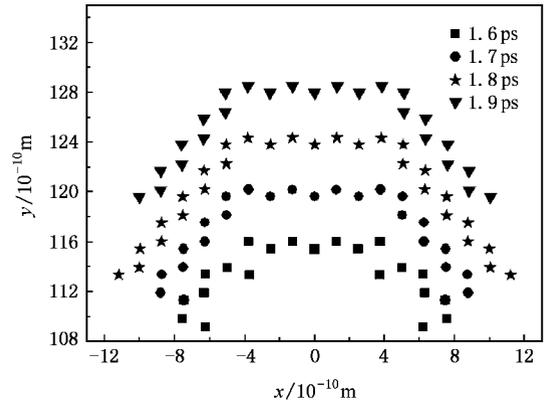


图 10 (1 $\bar{1}\bar{1}$)面位错环在新坐标中的投影图 横轴 x 代表 [0 $\bar{1}\bar{1}$]方向 纵轴 y 代表 [2 $\bar{1}\bar{1}$]方向

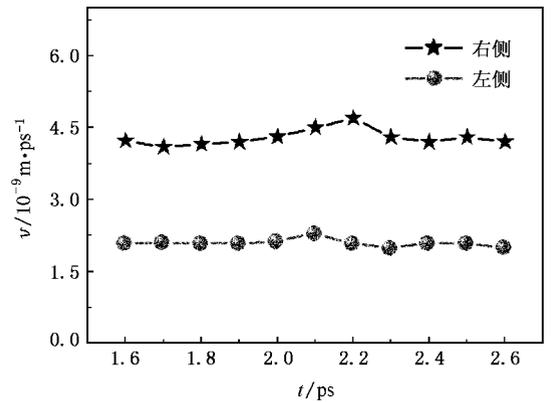


图 11 空洞左右两侧位错环前端在 1.6, 1.7, 1.8, 1.9, 2.0, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 和 2.6 ps 时刻的生长速度比较图

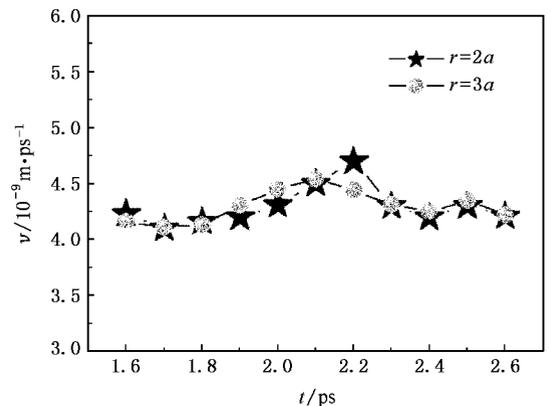


图 12 不同大小空洞对应的位错环前端的生长速度比较图

4. 结 论

本文采用分子动力学的方法,并借助于键对分析技术对冲击条件下金属铜中不同尺寸空洞的塌缩过程作了详细描述,发现空洞的塌缩过程与空洞的大小有关,空洞大小不同所形成位错的特征不一样.在高压负载下,影响缺陷材料屈服强度的因素主要有空洞的尺寸效应、动态效应、温度.由于本文研究的是缺陷(点缺陷、空洞)在零温下与冲击波的作用过程,所以温度效应影响不大.对于点缺陷来说,缺陷周围的剪切力小,难以形成位错.而对于空洞来

说,由于其尺寸效应的影响,其周围形成的剪切力大,材料内部易于产生塑性变形.空洞塌陷过程中,伴随有位错环生长的现象,随着位错环的生长,材料中的塑性区域不断扩展,因此研究位错环的生长速度对确定材料发生塑性变形的快慢有重要的作用,对同一半径的球形空洞来说,空洞右侧位错环前端的生长速度比左侧的快.空洞半径增大,其位错环前端的生长速度变化不大.

在文章撰写期间,北京应用物理与计算数学研究所的付立斌老师、郑辉老师提出许多启发性的建议,在此表示感谢.还要感谢甘延标、卢果等同学积极参与文章讨论.

-
- [1] Takahiro H ,Hideki M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 94105
- [2] Aftabzadeh A R ,Lakshmikantham V 1981 *Nonlinear Anal.* **5** 1173
- [3] Howe P M 2000 *Progress in Astronomics and Aeronautics* **185** 141
- [4] Chen J ,Jing F Q ,Zhang J L ,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]
- [5] Belak J 2004 *Phys. Rev. L* **93** 245503
- [6] Luo J ,Zhu W J ,Lin L B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2791 (in Chinese)[罗 晋、祝文军、林理彬 2005 物理学报 **54** 2791]
- [7] Paul H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 52104
- [8] Dear J P ,Field J E ,Walton A J 1988 *Nature (London)* **332** 505
- [9] Davila L P 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 161902
- [10] Daw M S ,Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [11] Fan T X Y 1987 *Usual Numerical Tables in Physics* (Beijing Science Press) p24 (in Chinese)[饭田修一 1987 物理学常用数表 (北京 科学出版社) 第 24 页]
- [12] Mishin Y 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [13] Honeycutt D J ,Anderson H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [14] Pan J S 1998 *Materials Science* (Beijing :TingsHua University Press) p278 (in Chinese)[潘金生 1998 材料科学基础 (北京 清华大学出版社) 第 278]
- [15] Song Z F ,Zhu W J ,Deng X L ,He H L 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 3041

Molecular dynamics simulation of shock-induced collapse in single crystal copper with nano-void inclusion^{*}

Yang Qi-Li¹⁾ Zhang Guang-Cai²⁾ Xu Ai-Guo²⁾ Zhao Yan-Hong²⁾ Li Ying-Jun^{1)†}

¹⁾ *China University of Mining and Technology (Beijing), Beijing 100083, China*

²⁾ *Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*

(Received 4 March 2007; revised manuscript received 6 July 2007)

Abstract

The evolution of preexisting nano-voids of different size in single crystal copper is investigated by means of molecular dynamics (MD) simulations. The results show that void collapse depends upon the size of the void. Numerous dislocation loops emerge for large void and phase transformation takes place in the sample. When the shock wave passes the void from left to right, dislocation loop emerges in the right of the void first for small void. However loops emerge in the right and the left at the same time when the size of the void increases to a critical size, which is decided by the distribution of the stress near the void. Once dislocation loop emerges and grows, the frontal dislocation loop in the right of void grows faster than that in the left for the same void. When the size of the void increases, the velocity of frontal dislocation loops is essentially unvaried and the angle between the direction leading from the centre of the void to the initial position of collapse and the direction of impact increases.

Keywords : nano-void, dislocation loop, shock wave, plastic deformation

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

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10135010) and by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2005CB221500).

[†] Corresponding author. E-mail: lyj@aphy.iphy.ac.cn