

## 冲击速度对单晶镍层裂行为的影响规律及作用机制\*

王路生<sup>1)</sup> 罗龙<sup>1)</sup> 刘浩<sup>1)</sup> 杨鑫<sup>2)</sup> 丁军<sup>1)</sup>宋鵬<sup>1)</sup> 路世青<sup>1)</sup> 黄霞<sup>1)†</sup>

1) (重庆理工大学机械工程学院, 重庆 400054)

2) (西南科技大学环境与资源学院, 绵阳 621000)

(2024 年 2 月 4 日收到; 2024 年 7 月 7 日收到修改稿)

为了阐明冲击速度对单晶镍冲击层裂行为的影响机理, 采用非平衡分子动力学方法获得了不同冲击速度下单晶镍自由面的速度、径向分布函数、原子晶体结构、位错和孔洞演化过程. 结果表明单晶镍层裂行为的临界冲击速度为 1.5 km/s, 当冲击速度  $U_p \leq 1.5$  km/s 时, 层裂机制为经典层裂损伤, 而  $U_p > 1.5$  km/s 时表现出微层裂损伤. 相比经典层裂, 微层裂下孔洞数量显著增加, 分布更为分散, 应力区域宽. 分析了冲击速度对经典层裂损伤行为 ( $U_p \leq 1.5$  km/s) 的影响, 并获得了相应的层裂强度, 当  $U_p = 1.3$  km/s 时, 发生层裂强度突变. 单晶镍的层裂强度与层错、相变和位错机制共同作用. 随着位错形核和发射位错数量增加, 导致层裂强度先下降. 当冲击速度  $U_p < 1.3$  km/s 时, 层裂损伤主要由层错作用影响; 当  $U_p = 1.3$  km/s 时, 层裂强度主要受到层错与相变共同竞争作用; 当冲击速度  $U_p > 1.3$  km/s, 层裂强度主要由 BCC 相变机制影响, 其相变机制为相变路径为 FCC→BCT→BCC 的马氏体相变机制. 本文揭示了冲击速度对层裂损伤和断裂影响规律及作用机制, 可为镍基材料在极端冲击条件下的防护应用提供理论基础.

关键词: 冲击速度, 单晶镍, 层裂, 相变, 分子动力学

PACS: 46.35.+z, 46.50.+a, 73.61.At, 33.15.Vb

DOI: 10.7498/aps.73.20240244

## 1 引言

金属材料在冲击加载下的动态行为涵盖了高压物理、武器装备、材料加工制造等领域, 如穿甲/破甲及其冲击防护、爆炸、冲压和锻造成形、冲击合成、弹丸撞击等<sup>[1-3]</sup>, 是涉及多学科交叉的重要研究热点. 强冲击加载环境往往伴随着高温、高压、高应变率, 此时金属材料的破坏方式依赖于材料内部和表界面处的微结构, 如晶界、孔洞、杂质、表面缺陷等<sup>[4,5]</sup>. 同时, 冲击作用下金属材料的破坏过程往往伴随着相变、层裂、复杂破碎、破碎物质输运

及混合等复杂科学问题, 而层裂行为是金属材料在冲击作用下失效的典型和重要形式<sup>[6,7]</sup>. 因此, 强冲击作用下的金属材料层裂行为及作用机理成为了冲击物理领域热点.

数十年来, 针对金属材料冲击层裂问题开展了大量实验研究. 通过实验手段“冻结”损伤演化的各个时刻, 并通过对大量的回收样品进行显微观察来研究动态载荷下的损伤演化行为, 提出了微孔洞成核-生长的模型 (NAG 模型), 发现孔洞的成核、生长是材料发生塑性变形和断裂的主要机制<sup>[8-12]</sup>. 在冲击加载下, 冲击波在金属材料内部传播, 到达自由面后发生反射, 反射的稀疏波与加载波相互作用, 产生逆向拉应力, 金属在拉应力的作用下发生

\* 国家自然科学基金青年基金 (批准号: 12202081)、重庆市自然科学基金面上项目 (批准号: CSTB2023NSCQ-MSX0363) 和重庆市教委科学技术研究计划青年项目 (批准号: KJQN202301117) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [huangxia@cqut.edu.cn](mailto:huangxia@cqut.edu.cn)

断裂破碎, 也就是层裂现象<sup>[13]</sup>. 对于金属来说, 层裂破坏的主要机理是空化效应, 即孔洞的成核、生长和聚集<sup>[14-16]</sup>. 冲击速度对金属材料层裂行为影响显著, 当冲击波速度较低时, 金属材料靶材在冲击载荷下压缩和卸载的整个过程中一直保持固体状态, 拉应力会导致一些固态碎片从自由面喷射, 其损伤行为与传统层裂过程一致<sup>[17]</sup>, 该层裂行为被称为经典层裂. 当冲击速度不断升高时, 金属材料靶材会发生卸载熔化甚至冲击熔化, 在层裂破坏之前发生固-液转变, 此时拉伸应力出现在熔化后的材料中, 导致从自由面形成的细小碎片云的膨胀, 该层裂行为被称为微层裂<sup>[18]</sup>. 在层裂实验中, 主要利用自由表面速度曲线来解释材料的层裂行为<sup>[19]</sup>. 但受限于时间和尺度都极小, 难以通过实验表征深入揭示金属材料的冲击层裂作用机制, 导致冲击层裂机理仍缺乏深入理解.

得益于分子动力学模拟理论、方法以及计算机技术的发展, 分子动力学模拟已经成为继实验和理论手段之后, 揭示材料在原子尺度上的力学行为和塑性变形机理<sup>[20-22]</sup>的重要手段. Liao 等<sup>[23]</sup>采用分子动力学模拟研究了不同冲击速度下纳米晶铝的微层裂的动力学演化过程, 发现微层裂的微观机制是由于空穴的成核、生长与聚集. 经典层裂与微层裂之间的主要区别在于空隙的数量和空隙成核位点的分布, 并分析了孔洞形成与热耗散之间的关系. Li 和 Yao<sup>[24]</sup>通过分子动力学的方法研究了单晶 SiC 的冲击层裂现象, 发现不同冲击速度下的冲击响应可分为弹性、塑性、结构相变和过驱动结构相变; 随着冲击速度的增大, 层裂行为从经典层裂变为微层裂. He 等<sup>[25]</sup>通过分子动力学模拟了单晶铝的层裂行为, 研究发现冲击速度  $U_p < 2.0$  km/s 时为经典层裂,  $U_p > 2.0$  km/s 时为微层裂, 经典层裂与微层裂都经历了孔洞成核、生长和聚集, 但在经典层裂过程中, 孔洞成核发生在局部区域, 而微层裂过程中孔洞成核分布在较大的区域. Chen 等<sup>[26]</sup>通过分子动力学模拟研究了镍基高温合金在冲击载荷作用下的动力学响应和微观结构演化, 研究结果表明当冲击速度 ( $U_p \leq 0.75$  km/s), 冲击载荷作用下的变形机理是肖克利位错剪切进入  $\gamma'$  相, 但只是在一定程度上受到界面位错网络的阻碍, 界面位错网络主要以位错滑移和拖曳为主. 当冲击速度  $U_p \geq 1$  km/s 时, 冲击载荷直接引起位错网络的破坏甚至消失, 原子结构逐渐变得无

序, 微观结构变形主要是结构相变. Jiang 等<sup>[27]</sup>采用分子动力学研究了单晶铝的层裂损伤, 研究揭示了冲击引起的微观结构在原子尺度上对层裂损伤与层裂强度的重要影响, 结果表明纳米孔洞在弹性变形或相变区域均匀成核, 导致更高的层裂强度. 然而, 纳米孔洞在位错和堆垛层错区域均匀成核, 导致层裂强度突然降低, 层裂强度呈现不连续变化. Xie 等<sup>[28]</sup>通过非平衡分子动力学模拟研究了等原子 FeNiCrCoCu 高熵合金晶向和冲击速度对冲击诱导相变的影响, 发现在 [001] 晶向由于单轴压缩和晶格旋转, 面心立方 $\rightarrow$ 体心立方相变容易沿取向出现冲击, 促进激活位错成核以释放剪切应力. 随着冲击速度的增大, 微观变形机制从位错机制主导转变为相变机制主导, 促进了较高应变下的应力快速松弛, 有助于冲击波的衰减, 从而削弱冲击损伤. 以上研究表明冲击速度会导致层裂演化机制不同 (经典层裂和微层裂机制), 并会导致层裂强度突变. 然而, 冲击速度对单晶镍的层裂行为及层裂强度突变的影响规律和作用机制仍缺乏深入理解. 因此, 深入研究冲击速度对单晶镍层裂行为的影响机制, 对理解镍基材料在极端条件下的失效机理和冲击防护具有重要意义.

综上所述, 针对镍基金属材料冲击层裂行为的冲击速度效应仍缺乏深入和系统的研究. 本文采用非平衡分子动力学模拟研究单晶镍在冲击载荷下的层裂行为, 分析冲击速度对层裂行为和机制的影响规律, 揭示冲击速度对层裂强度的依赖性和动态损伤演化的影响机理, 为镍基冲击材料的设计和防护提供理论指导.

## 2 模型与方法

单晶镍<sup>[29]</sup>为典型的面心立方结构 (FCC), 其晶格常数  $a$  为  $3.52 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ). 为简化分析, 模型的  $X$  轴、 $Y$  轴和  $Z$  轴分别对应 [100], [010] 和 [001] 晶体取向, 沿  $X$ ,  $Y$  和  $Z$  轴包含  $400a \times 30a \times 30a$ , 因此模拟的单元尺寸为  $10.56 \text{ nm} \times 10.56 \text{ nm} \times 140.8 \text{ nm}$ , 初始模型共计含有 1440000 个原子, 模型示意图及加载方向如图 1 所示. 模型可分为两部分: 虚拟活塞和靶材, 冲击加载方向沿  $Z$  轴方向. 为了消除模拟体系残余应力效应, 在所有 3 个方向上周期性边界条件下的等压等温 (NPT) 系综<sup>[30]</sup>中以 1 fs 的时间步长充分弛豫 30 ps, 使模拟体系

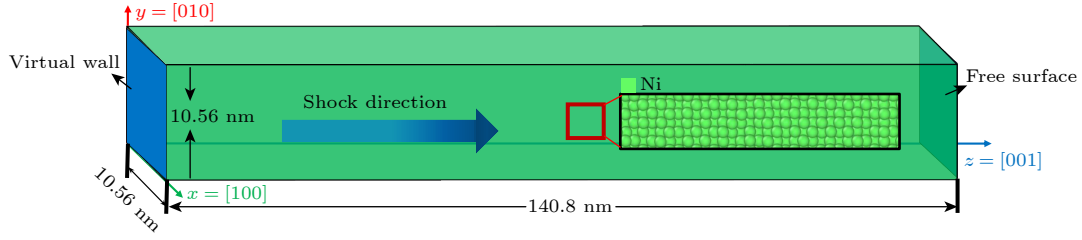


图 1 单晶镍冲击加载模型

Fig. 1. Impact loading model of single crystal nickel.

温度保持在 300 K 且零压力. 在加载阶段, 改变  $Z$  轴方向的周期性边界为自由边界条件, 采用多尺度冲击技术 (MSST)<sup>[31]</sup> 对虚拟活塞沿  $Z$  轴施加恒定冲击速度  $U_p$ , 单晶镍靶材保持静止状态, 然后通过移除活塞实现卸载过程. 在加载和卸载过程中的时间步长为 1 fs. 冲击速度  $U_p$  在 1—3 km/s 范围, 为了减少计算时间, 总模拟时间为 100 ps 以观察完整的层裂过程<sup>[24,32]</sup>. 此外, 为进一步分析层裂损伤行为, 采用分箱分析方法以确定不同的物理量 (如密度、速度、压力和温度)<sup>[17,25]</sup>, 靶材沿  $Z$  方向被分为一定数量的区域 (bin), 为得到更准确的数据, 每个 bin 的宽度为一个晶格常数 (3.52 Å), 则可以计算得到最后一个 bin 的速度, 该速度可作为自由表面速度. 基于大规模原子模拟 LAMMPS 平台开展单晶镍冲击层裂的分子动力学模拟<sup>[33]</sup>.

采用 Zhou 等<sup>[34]</sup> 开发的嵌入原子势函数描述冲击作用下原子间的相互作用, 该势函数很好地描述了金属的晶格常数、弹性常数等力学性质<sup>[35–37]</sup>. 为了进一步验证该势函数的适用性和可靠性, 计算得到了模拟时间  $t = 5$  ps 时, 冲击波速度  $U_s$  和加

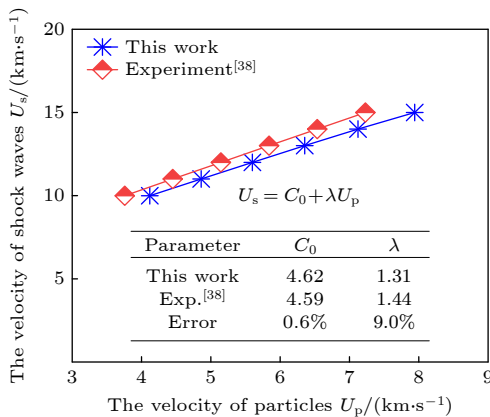
载冲击速度  $U_p$  之间的线性关系 ( $U_s = C_0 + \lambda U_p$ , 其中  $C_0$  为声速,  $\lambda$  是材料常数), 如图 2 所示. 计算得到的声速  $C_0$  与实验获得的声速  $C_0$  符合良好 (相对误差约为 1%), 材料参数  $\lambda$  符合较好 (相对误差约为 9%)<sup>[38]</sup>, 表明该势函数能够较准确地描述单晶镍的冲击行为.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 单晶镍经典层裂和微层裂的临界冲击速度

图 3 给出了不同冲击速度加载下单晶镍孔洞演化过程. 随着冲击速度的增大, 冲击层裂区域显著增宽, 且势能明显增大, 层裂损伤加剧. 在形成的层裂区域, 冲击速度的增大, 孔洞成核位点增多, 并且孔洞形核区域增宽. 在较低冲击速度下 (1.0—1.5 km/s), 单晶镍的冲击层裂行为以有限的孔洞成核、生长、聚集贯通为主; 在较高冲击速度下 (2.0—3.0 km/s), 孔洞成核位点增多, 孔洞之间相互作用增强, 新孔洞的出现会导致孔洞之间存在竞争机制, 导致部分孔洞之间相互聚集贯通, 而部分孔洞则会消失. 值得注意的是, 当冲击速度为  $U_p = 3.0$  km/s 时, 撤去加载后左端面变为自由面, 左侧极少数原子脱离材料基体, 且当冲击波到达右自由端面时也发生原子脱离基体现象<sup>[21,39]</sup>, 这是由于较大的冲击速度诱导粒子喷射所导致.

自由面的速度演化过程是确定层裂损伤行为的重要手段. 图 4 给出了不同冲击速度下单晶镍自由面的速度实时演化过程. 当  $U_p = 1.0—2.5$  km/s 时, 自由面速度达到峰值后, 自由面速度出现锯齿状的振荡. 当模拟体系为固液共存状态时, 反射波将在新的自由表面上 (层裂面) 形成压缩波, 从而导致自由面速度出现振荡, 产生速度回跳<sup>[40,41]</sup>. 当冲击波到达自由面时, 材料内部完全熔化, 导致冲

图 2 数值模拟和实验获得的单晶镍的冲击波速度  $U_s$  与加载速度  $U_p$  的线性关系Fig. 2. Linear relationship between the shock wave velocity  $U_s$  and the loading velocity  $U_p$  of single crystal nickel.



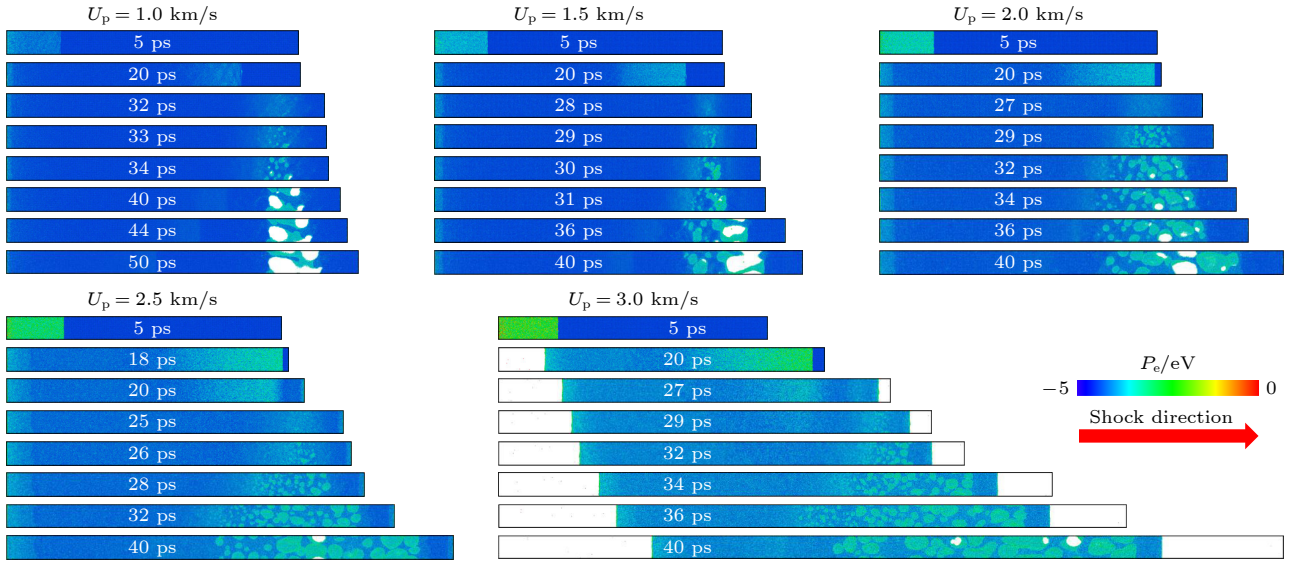


图 3 不同冲击速度下单晶镍的孔洞演化过程

Fig. 3. Void evolution of single crystal nickel at different impact velocities.

击波无法传播, 进而无法形成压缩波所导致. 当  $U_p = 3.0$  km/s 时, 自由面速度到达峰值后, 速度不再明显变化 (表现为平稳台阶), 表现出微层裂损伤特征. 因此, 自由面速度演化结果表明, 当冲击速度为 3 km/s 时, 单晶镍发生微层裂损伤行为.

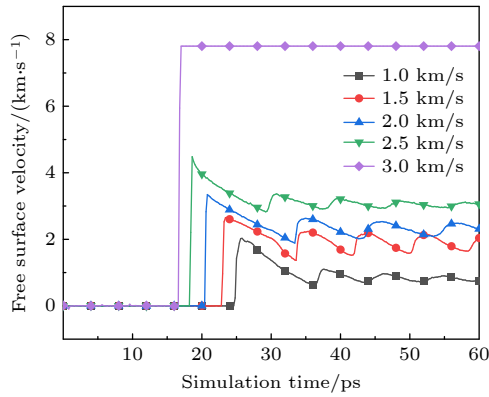


图 4 不同冲击速度下单晶镍自由面的速度随时间演化曲线  
Fig. 4. Time evolution between simulation time and free surface velocity for the single crystal nickel under different impact velocities.

自由面速度曲线虽然可以确定单晶镍完全转化为液态 (完全熔化) 的冲击速度, 但不能识别单晶镍是否为固体状态 (没有熔化) 或固液共存状态 (部分熔化), 进而无法确定经典层裂和微层裂损伤行为的临界冲击速度. 因此, 需要进一步对冲击过程中单晶镍的状态进行观察. 径向分布函数 (radial distribution function, RDF) 是表征结构相变和识别熔化的有效方法 [42]. 固态金属的 RDF 中

会表现出明显局域特征 (存在尖峰), 而液态金属的 RDF 表现出短程有序与长程无序的综合特征 [43]. 图 5 是不同冲击速度下单晶镍对应初始时刻 ( $t = 0$ )、压缩时刻 ( $t = 8$  ps) 和拉伸时刻 ( $t = 30$  ps) 的 RDF. 当冲击速度  $U_p = 1.0$  km/s 和 1.5 km/s 时, 相比初始时刻, 压缩和拉伸时刻的 RDF 的形状保持良好, 局域性较高, 表现出良好的晶体结构特征, 表明此时模拟体系全部为固态, 没有发生融化. 当冲击速度  $U_p = 2.0$  km/s 和 2.5 km/s 时, RDF 曲线特征在加载的过程中呈现尖峰和弥散峰共存, 在压缩阶段变化较小, 但拉伸时刻与初始时刻相比存在明显差异, RDF 的峰值下降, 峰宽变大, 局域性下降, 表明发生固-液转变, 此时处于部分融化状态. 当速度  $U_p = 3.0$  km/s 时, 第一峰值呈现降低趋势, 拉伸阶段第一峰值比压缩阶段降低了 20.4%, 而压缩阶段较初始阶段下降了 42%, 其 RDF 曲线特征显示在拉伸阶段出现第一个峰值后, 基本无波动, 表明在此时全部为液态, 系统在该速度下压缩阶段部分融化, 在拉伸阶段完全熔化.

综上所述, 自由面速度曲线和 RDF 曲线表明: 当冲击速度  $U_p \leq 1.5$  km/s 时, 单晶镍没有发生固液相变, 表现为经典层裂损伤机制; 然而,  $U_p > 1.5$  km/s 时, 发生微层裂损伤. 值得注意的是, 当  $1.5$  km/s  $< U_p \leq 2.5$  km/s 时, 单晶镍发生固液相变, 模拟体系处于部分融化状态; 当  $U_p = 3$  km/s 时, 自由面速度曲线的速度波动由于材料完全融化而消失, 自由面速度达到稳定状态.

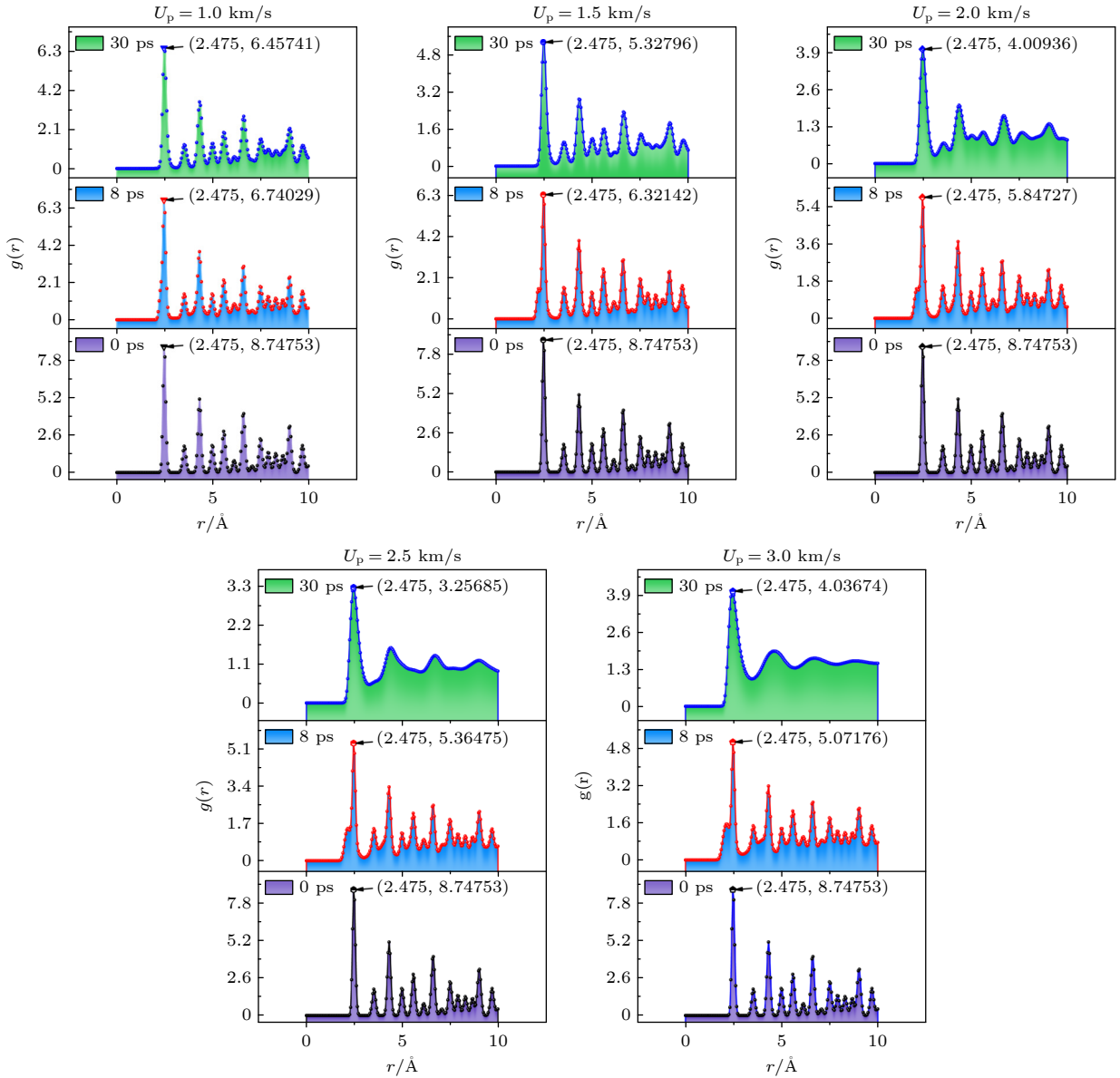


图 5 不同冲击速度下单晶镍对应初始时刻、压缩时刻、拉伸时刻的 RDF

Fig. 5. RDF of single crystal nickel corresponding to the initial time, compression time and tensile time at different impact velocities.

### 3.2 冲击速度对层裂强度的影响

表征材料的动态抗拉强度的层裂强度是表征经典层裂损伤行为的重要判据. 层裂强度  $\sigma_{sp}$  可由基于自由面速度的声学近似方法表示 [44]:

$$\sigma_{sp} = \frac{1}{2} \rho_0 C_b \Delta U, \quad (1)$$

式中,  $\rho_0$  和  $C_b$  分别为初始密度和体波声速,  $\rho_0 = 8.902 \text{ g/cm}^3$ ,  $C_b = 4.59 \text{ km/s}$ ;  $\Delta U = U_{\max} - U_{\min}$  为自由表面速度演化中峰值速度与第 1 个回跳点速度之差.

为了进一步理解单晶镍的经典层裂损伤行为, 计算得到的不同冲击速度下 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5 \text{ km/s}$ )

的自由面速度曲线和层裂强度如图 6 所示. 所有模型的自由面速度都出现明显波动, 表现出经典层裂损伤特征, 如图 6(a) 所示. 随着冲击速度的增大, 层裂强度先减小后增大, 表明层裂强度不随冲击速度呈线性变化. 值得注意的是, 当冲击速度为  $1.3 \text{ km/s}$  时, 冲击加载下单晶镍发生层裂强度突变. 这与 Mescheryakov 等 [45] 采用实验研究高强度钛合金的冲击层裂行为所观察到的层裂强度突变现象相符合.

已有研究表明, 位错和相变等行为对层裂强度扮演着重要的角色 [38,46]. 为探究单晶镍层裂强度突变的影响机制, 在  $t = 5 \text{ s}$  时, 不同冲击速度下单

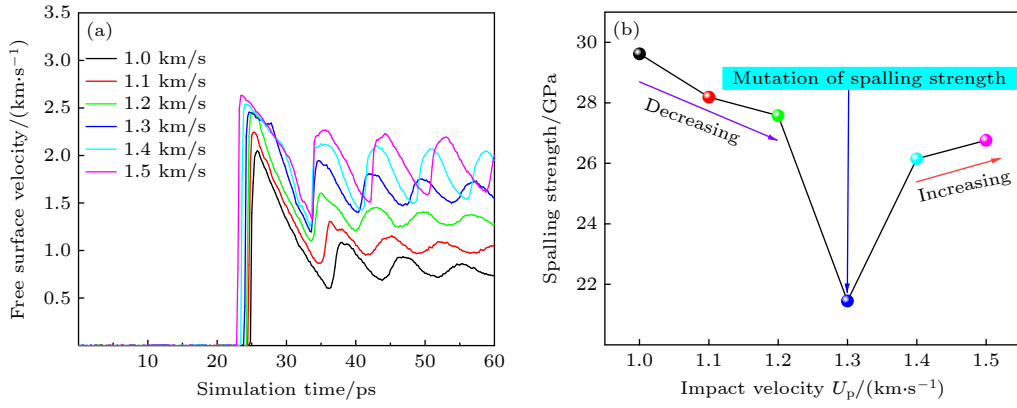

 图 6 冲击速度为  $U_p = 1.0\text{--}1.5$  km/s 时的自由面速度曲线和层裂强度

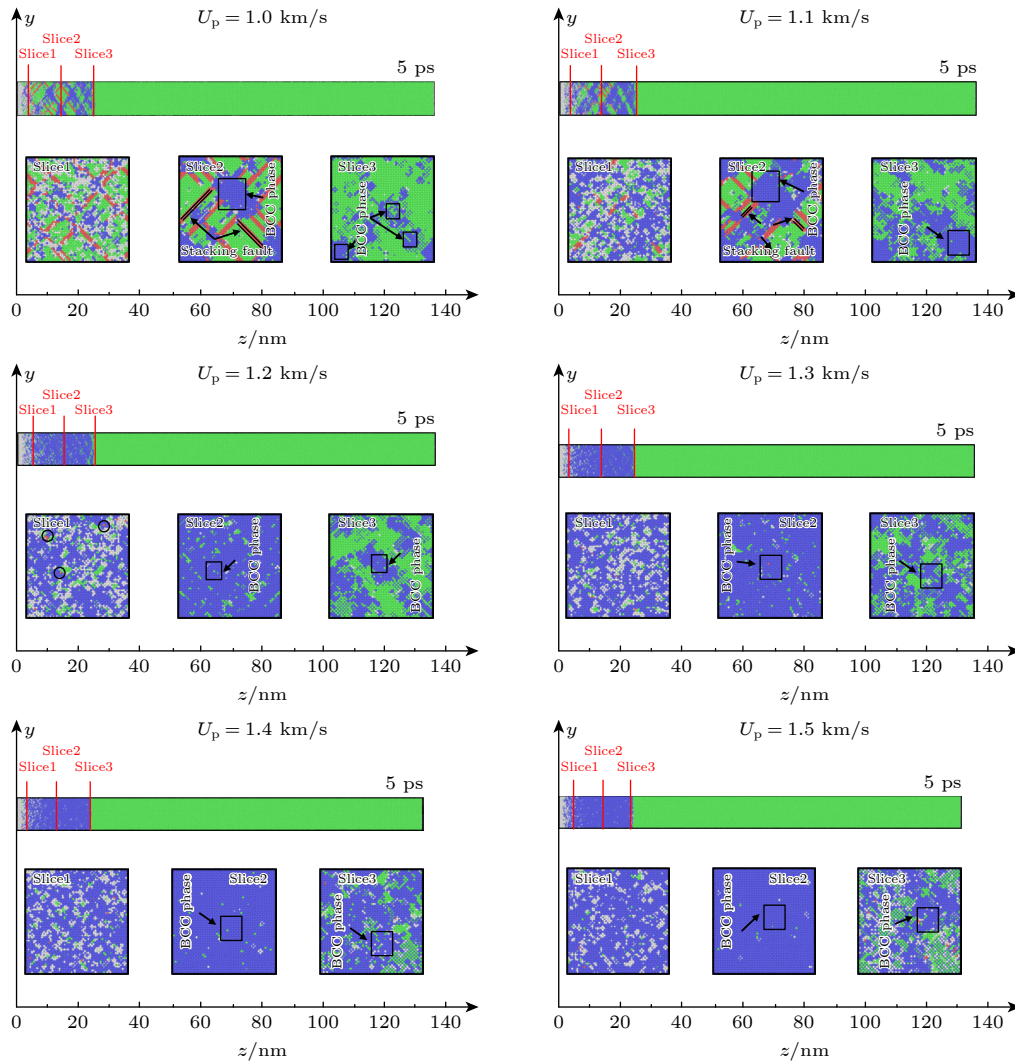
 Fig. 6. Free surface velocity curve and spalling strength when the impact velocity is  $U_p = 1.0\text{--}1.5$  km/s.

 图 7 模拟时间  $t = 5$  ps 时, 不同冲击速度 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5$  km/s) 下单晶镍的截面微观原子构型 (CNA 表征)

 Fig. 7. Microscopic atomic configuration (colored by CNA) of single crystal nickel at different impact velocities ( $U_p = 1.0\text{--}1.5$  km/s) at simulation time  $t = 5$  ps.

晶镍的临近列表分析 (common neighbor analysis, CNA) 微观构型如图 7 所示. 需要指出的是, 我们

模拟中采用的非物理“冷”活塞可能会影响冲击端附近的材料<sup>[47]</sup>, 但不会影响整个模拟过程以及研

究结果. 在加载时间内, 冲击波前沿经历由面心立方 (FCC) 晶体结构→体心立方 (BCC) 晶体结构→密排六方 (HCP) 晶体结构的转变, 并且随冲击速度增大产生更多的 BCC 中间相. 冲击速度为 1.0—1.2 km/s 时, 冲击波传播伴随层错和 BCC 相的产生, 随着冲击波速度的增大 HCP 晶体结构逐渐减少, BCC 晶体结构增多, 当速度达到 1.2 km/s 时候, 观察到冲击波后的 Slice1 切面存在少量的 HCP 晶体结构, Slice2 中的切面观察到更多的 BCC 晶体结构. 当速度范围在 1.3—1.5 km/s 之间, 发现在 3 个切面上没有观察到 HCP 晶体结构, 在冲击加载区域内只看到了 BCC 晶体结构.

为了进一步理解冲击速度对层裂强度的影响机制, 模拟时间  $t = 5$  ps 时, 不同冲击速度下单晶镍晶体结构的定量统计如图 8 所示. 所有冲击速度条件下, 都形成了大量无序结构 (OTHER), 且其随着冲击速度增大, 先增大再逐渐减小, 结合原子构型可知 (图 7), 该部分 OTHER 结构主要由点缺陷或位错组成. 当冲击速度小于 1.2 km/s 时, HCP 晶体结构含量较高, 结合原子构型可知 (图 7), HCP 结构主要为层错, 这有利于保持层裂强度. 当冲击速度大于 1.2 km/s 时, BCC 结构显著增大, 表明冲击诱导发生 BCC 相变, 这也将促进层裂强度保持.

为了进一步分析位错、层错和相变等微观机制对层裂强度的影响, 不同冲击速度下单晶镍的 CNA 和位错分析方法 (dislocation analysis, DXA) 微观演化过程如图 9 所示. 当冲击速度小于 1.2 km/s 时, 冲击波的 BCC 相与层错交叉区域发生损伤. 但当冲击速度为 1.2 km/s 时, 由于马氏体滑移相变诱导的 BCC 完全相变影响出现部分无损伤区域 (黄色方框). 当冲击速度大于 1.2 km/s 时, BCC 完全相变区域随着速度增加逐渐变宽, 但在 BCC 相与层错交叉的区域仍发生损伤. 综上所述, 从层错和相变作用来看, 当冲击速度  $U_p < 1.3$  km/s 时, 层裂损伤主要由层错作用影响; 当  $U_p = 1.3$  km/s 时, 层裂强度主要受到层错与相变共同竞争作用, 发生层裂强度突变; 当  $U_p > 1.3$  km/s, 层裂强度主要由 BCC 相变机制影响.

为了进一步探究压缩、拉伸阶段对层裂强度的影响规律, 不同冲击速度下单晶镍的位错演化过程如图 10 所示. 当应力波通过自由面形成反射波后, 发现由压缩过程产生的微损伤区域恢复到完美晶

体, 变为无损伤区域, 只留下少量的微缺陷为拉伸应力提供成核位置. 不同冲击速度下位错形核的时间分别为 27.4 ps, 26.6 ps, 26.2 ps, 26.8 ps, 26.6 ps, 26.6 ps. 在  $U_p = 1.0—1.2$  km/s 时, 位错形核的时间随冲击速度增大而降低, 冲击速度为  $U_p = 1.3—1.5$  km/s 时, 位错形核时间先减小再不变, 这对应压缩下大量 BCC 相变冲击范围. 值得注意的是, 在  $U_p = 1.0—1.2$  km/s 时, 位错形核时的位错数量逐渐增加, 并且在冲击速度为 1.0 km/s, 1.1 km/s 时位错形核还存在由压缩阶段产生的微缺陷, 这些缺

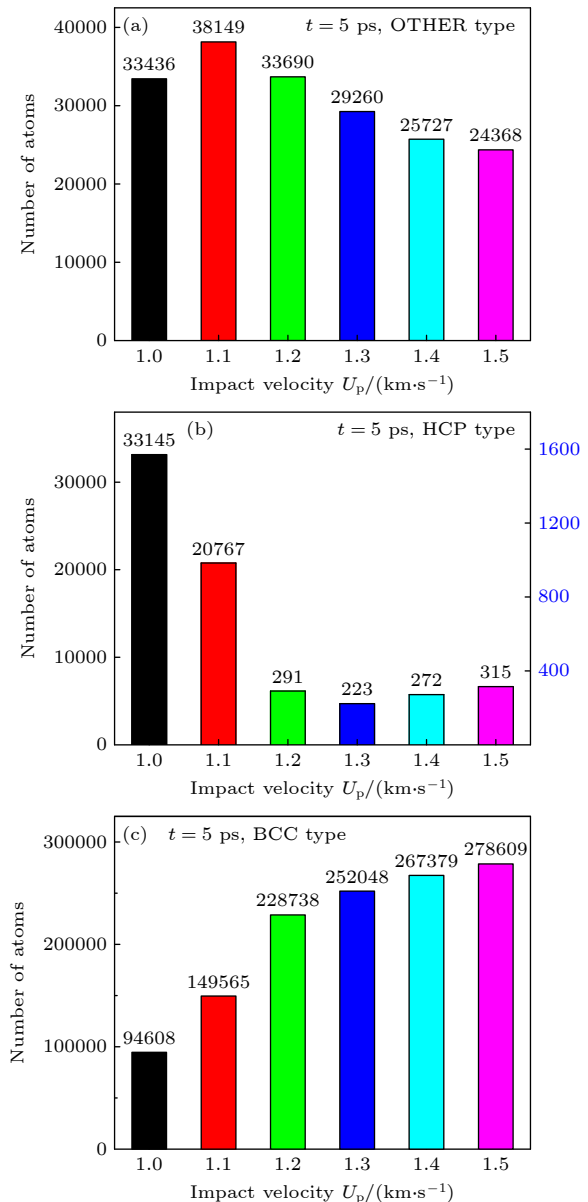


图 8 模拟时间  $t = 5$  ps 时, 不同冲击速度 ( $U_p = 1.0—1.5$  km/s) 下单晶镍晶体结构的原子数目定量统计

Fig. 8. Number of crystal structure atoms for the single crystal nickel under different impact velocity ( $U_p = 1.0—1.5$  km/s) at simulation time of 5 ps.



陷随着拉伸过程逐渐消失. 在  $U_p = 1.3\text{--}1.5\text{ km/s}$  时, 位错形核时的位错数量逐渐减小. 位错形核和

发射对层裂强度有显著影响, 位错形核和发射位错数量增加, 会使层裂强度降低.

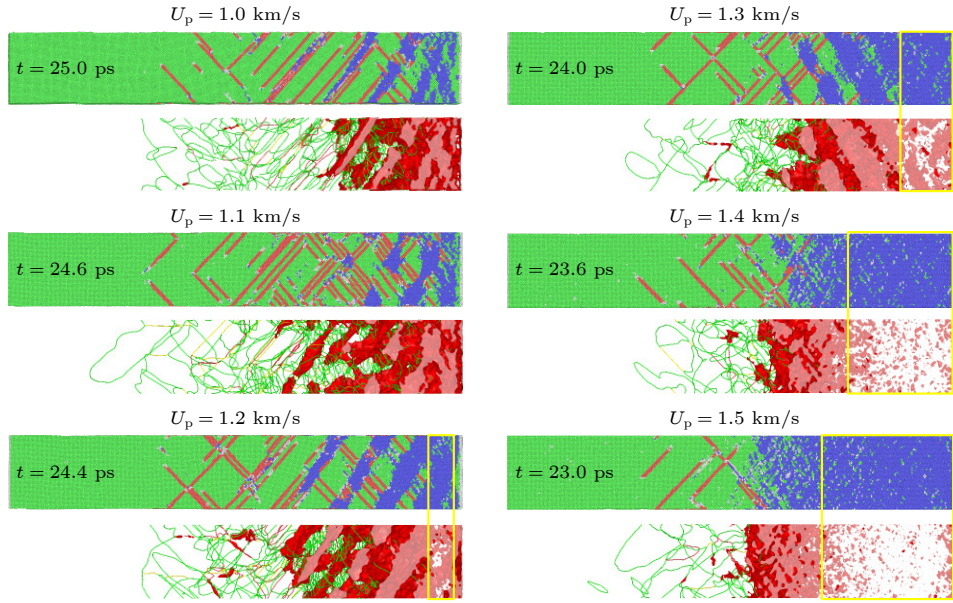


图 9 不同冲击速度 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5\text{ km/s}$ ) 下冲击波到达单晶镍自由面时的原子晶体构型和位错构型

Fig. 9. Atomic crystal configuration and dislocation configuration when the shock wave reaches the free surface of single crystal nickel at different impact velocities ( $U_p = 1.0\text{--}1.5\text{ km/s}$ ).

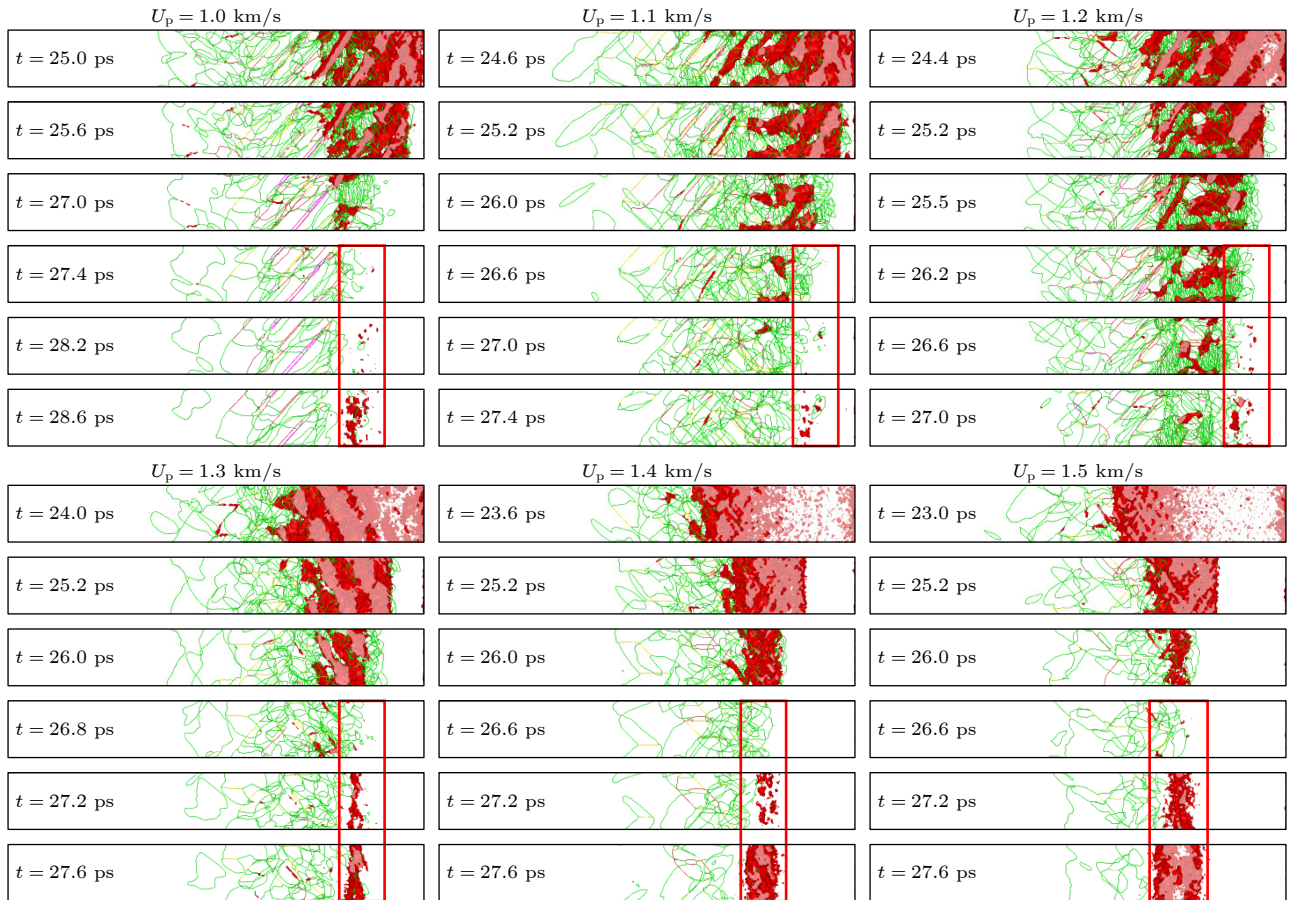


图 10 不同冲击速度 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5\text{ km/s}$ ) 下单晶镍的位错演化过程

Fig. 10. Dislocation evolution of single crystal nickel at different impact velocities ( $U_p = 1.0\text{--}1.5\text{ km/s}$ ).



### 3.3 单晶镍经典层裂损伤断裂评估判据

层裂损伤是影响材料断裂行为的重要因素之一, 而冲击速度是影响层裂损伤演化的主要因素之一. Tuler 和 Butcher<sup>[48]</sup> 发现拉伸阶段时间对断裂影响显著, 并通过引入应力阈值 (加载应力阈值与加载速度相关<sup>[49]</sup>), 提出了断裂时间和加载应力的幂指数型断裂判据关系式:

$$\int_0^{t_f} (\sigma - \sigma_0)^\lambda dt = K, \quad (2)$$

其中  $t_f$  为断裂时间,  $\sigma_0$  为材料开始破坏的应力阈值,  $\lambda$  和  $K$  为材料常数. Davison 和 Stevens<sup>[50]</sup> 基于连续介质损伤累积的物理思想, 通过数值模拟得出断裂时间和加载应力幅值的关系曲线. 基于层裂过程中动力学不变量 ( $P^\alpha = \text{常数}$ , 其中  $P$  为加载应力,  $t$  为断裂时间)<sup>[51]</sup>, 白以龙等<sup>[52]</sup> 针对铝合金动态断裂实验表征提出了对应断裂判据形式:

$$\left(\frac{\sigma}{\sigma_0} - 1\right)^{n_1} t = K, \quad (3)$$

式中,  $\sigma_0$  是冲击速度为 0.7 km/s 时单晶镍刚好发

生层裂时的加载应力<sup>[53]</sup>, 加载应力与冲击速度密切相关, 其计算形式为

$$\sigma = \rho_0 Dv = \rho_0 (C_0 + \lambda v)v, \quad (4)$$

式中,  $\rho_0$  和  $C_0$  分别为初始密度和材料零压下声速,  $\rho_0 = 8.902 \text{ g/cm}^3$ ,  $C_0 = 4.6 \text{ km/s}$ .

根据 (4) 式计算得到不同冲击速度下的加载应力. 断裂时间的开始以拉伸时刚开始形核作为起始点, 断裂时间的结束是当孔洞表面之间融合致使材料之间出现贯通视为材料断裂, 则不同冲击速度下两者的差值为断裂时间  $t_f$ , 如图 11 所示. 计算得到的断裂时间和加载应力见表 1. 单晶镍的断裂时间随加载应力的升高而减小. 由 (3) 式可得  $n_1 = 1.1$ , 相比铝合金 ( $n_1 = 0.97$ ) 略有增大, 这是因为单晶镍晶格常数比铝小, 原子成键强度大所导致.

表 1 冲击速度为  $U_p = 1.0\text{--}1.5 \text{ km/s}$  时的加载应力和断裂时间

Table 1. Loading stress and fracture time under the impact velocity of  $U_p = 1.0\text{--}1.5 \text{ km/s}$ .

冲击速度 $U_p/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	加载应力 $P/\text{GPa}$	断裂时间 $t_f/\text{ps}$
1.0	53.67	3.8
1.1	60.46	3.2
1.2	67.49	2.4
1.3	74.78	1.8
1.4	82.33	1.4
1.5	90.13	1.2

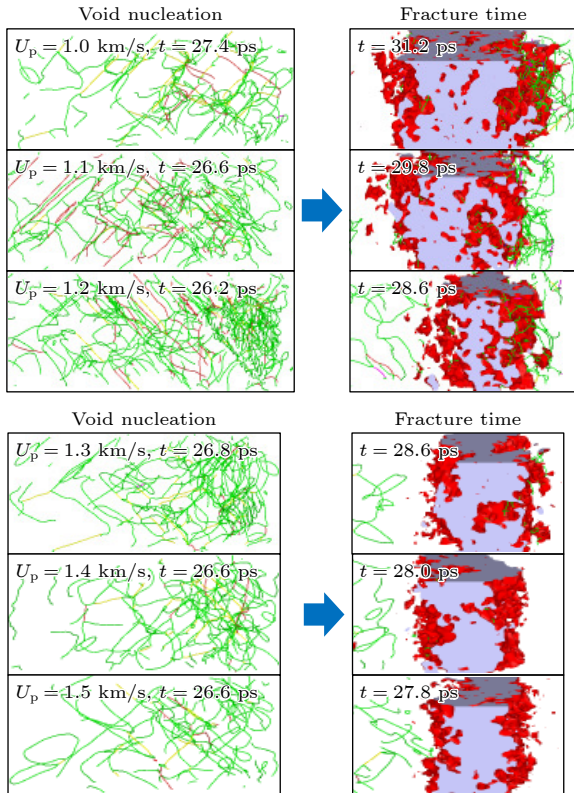


图 11 不同冲击速度 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5 \text{ km/s}$ ) 下的孔洞成核与断裂微观图

Fig. 11. Micrographs of void nucleation and fracture under different impact velocities ( $U_p = 1.0\text{--}1.5 \text{ km/s}$ ).

为了验证拟合所得到的  $n_1$  值的准确性, 分别选取冲击速度为 1.25 km/s 和 0.9 km/s 进行分子动力学模拟. 当冲击速度为 1.25 km/s 时, 通过分子动力学模拟得到的断裂时间为 2.0 ps, 通过公式进行计算得到的断裂时间为 2.06 ps, 误差为 3%, 内测结果良好. 当冲击速度为 0.9 km/s 时, 通过分子动力学模拟得到的断裂时间为 5.2 ps, 通过公式进行计算得到的断裂时间为 5.93 ps, 误差不超过 15%, 外推结果较好. 进行验证的孔洞成核与断裂微观图见图 12 和表 2.

表 2 冲击速度分别为 0.9 km/s 和 1.25 km/s 时的加载应力和断裂时间

Table 2. Loading stress and fracture time under the impact velocity of 0.9 km/s and 1.25 km/s.

冲击速度 $U_p (\text{km/s})$	加载应力 $P/\text{GPa}$	断裂时间 $t_f/\text{ps}$
0.9	47.13	5.2
1.25	69.93	2.0

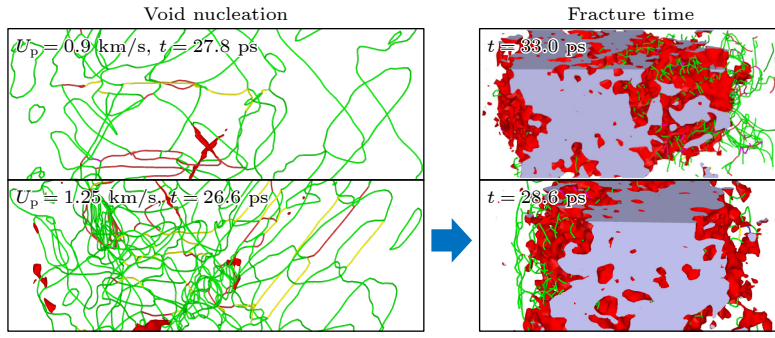


图 12 冲击速度分别为 0.9 km/s 和 1.25 km/s 时的孔洞成核与断裂微观图

Fig. 12. Micrographs of void nucleation and fracture at impact velocities of 0.9 km/s and 1.25 km/s.

### 3.4 经典层裂下的相变机制和层裂机制

相变机制是单晶镍冲击层裂行为的重要影响因素, 理解其形成机制有助于深入理解单晶镍的层裂行为. 当冲击速度为 1 km/s 时, 单晶镍的原子构型如图 13 所示. 需要指出的是, 绿色原子代表 FCC 晶体结构, 蓝色原子为 BCC 晶体结构, 红色为 HCP 晶体结构, 围绕两个或多个 FCC 晶体结构原子层的一层 HCP 原子层是一个孪晶界, 两个相邻的 HCP 晶体结构原子层构成内层错, 两个 HCP 晶体结构层中间夹 FCC 晶体结构层构成外层错, 白色原子为 OTHER 晶体结构 (称为无序结构)<sup>[32]</sup>, 无序结构的产生是由于冲击过程中产生大量的扩展位错, 进一步提高位错滑移的阻力, 从而促进位错的进一步增值, 而高密度位错使周边晶格发生畸变, 导致原子排列呈无序化<sup>[54]</sup>. 整个冲击层裂过程可以分为压缩、释放和拉伸阶段. 在变形初期, 巨大的冲击载荷诱导位错形核, 并形成大量层错和 BCC 相变. 在压缩变形时, 冲击波尾部形成大量层错, 而冲击波头部发生 FCC→BCC 转变. 在冲击波释放阶段, 冲击波在右自由面发生反射, 随后反射后的稀疏波在与衰减冲击波尾部的稀疏波相遇形成拉应力区域, 靶材先释放到原长, 材料进入拉伸阶段, 特别注意到, 在释放阶段与拉伸阶段时, 反射后的稀疏波与衰减冲击波尾部的稀疏波相遇时, 冲击波前的形成的 BCC 相结构和层错结构减少, 这是因为 BCC 相结构不稳定, 以及 FCC 和 BCC 两相间能垒随着压缩应力的减小而减小所造成. 图 14 给出了冲击载荷作用下单晶镍的 FCC→BCC 转变过程. 在冲击波作用下, FCC 排列的原子发生切向滑移而发生马氏体滑移相变, 导致 FCC 结构转变为体心正方 (BCT) 中间结构, 并

在后续的变形下逐渐转变为 BCC 结构. 值得注意的是, 由于反向拉伸应力作用, BCC 结构会进一步滑移, 转变为更加稳定的层错结构.

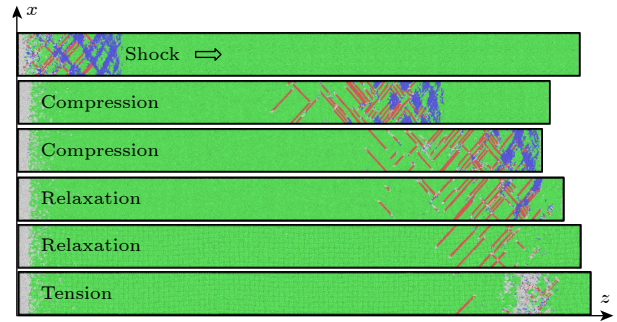


图 13 冲击速度为 1 km/s 时, 单晶镍的原子构型演化过程 (CNA 表征)

Fig. 13. Evolution of atomic configuration of single crystal nickel at impact velocity of 1 km/s (CNA characterization).

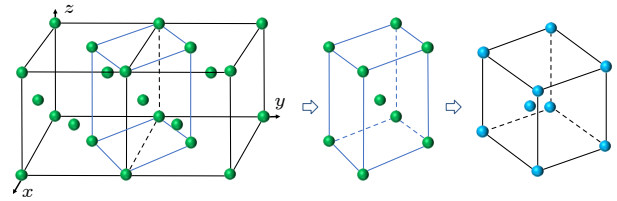


图 14 冲击作用下单晶镍中 FCC→BCT→BCC 晶体转变原理

Fig. 14. Principle of FCC→BCT→BCC crystal transition in single crystal nickel under impact loading.

## 4 结 论

本文采用非平衡分子动力学模拟较为系统地研究了冲击速度  $U_p$  对单晶镍冲击层裂行为的影响规律及作用机制, 分析了冲击速度诱导位错、层错和相变等微观机制对层裂类型、层裂强度的影响规律, 应用了经典层裂损伤下冲击速度诱导加载应力

与断裂时间的预测模型. 得到的主要结论如下.

1) 当冲击速度  $U_p \leq 1.5$  km/s 时, 单晶镍表现为经典层裂损伤, 当  $U_p > 1.5$  km/s 时, 表现为微层裂损伤. 单晶镍的层裂损伤机制均以孔洞成核、生长为主, 但相比经典层裂损伤机制, 微层裂下孔洞数量显著增加, 分布更为分散, 应力区域宽.

2) 在经典层裂损伤范围下 ( $U_p = 1.0\text{--}1.5$  km/s), 当冲击速度为 1.3 km/s 时, 发生层裂强度突变. 单晶镍的层裂强度由层错、相变和位错机制共同作用. 位错形核和发射位错数量增加导致层裂强度下降. 当速度  $U_p < 1.3$  km/s 时, 层裂损伤主要由层错作用影响; 当冲击速度  $U_p > 1.3$  km/s, 层裂强度主要由 BCC 相变机制影响; 当  $U_p = 1.3$  km/s 时, 层裂强度主要受到层错与相变共同竞争作用, 发生层裂强度突变.

3) 冲击作用下单晶镍的 BCC 相变为马氏体滑移相变, 相变路径为 FCC $\rightarrow$ BCT $\rightarrow$ BCC $\rightarrow$ HCP 层错. 应用了单晶镍加载应力与断裂时间的关联模型, 单晶镍的断裂时间随加载应力的升高而减小. 单晶镍的  $n_1$  值为 1.1, 相比铝合金 ( $n_1 = 0.97$ ) 略有增大, 这是因为单晶镍晶格常数比铝小, 原子键强大所导致.

## 参考文献

- [1] Tang Y, Wang R X, Xiao B, Zhang Z R, Li S, Qiao J W, Bai S X, Zhang Y, Liaw P K 2023 *Prog. Mater. Sci.* **135** 101090
- [2] Arcade S, Paul J H, Juan P E, Wang H X, Oromiehie E, Prusty G B, Phillips A W, John N A S 2023 *Compos. Part A-Appl. S* **173** 107674
- [3] Wang P F, Xu S L 2022 *Advances in Experimental Impact Mechanics* (Elsevier) pp41–74
- [4] Yu W T, Huang P Z 2018 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **50** 828 (in Chinese) [余文韬, 黄佩珍 2018 *力学学报* **50** 828]
- [5] Mukherjee T, Elmer J W, Wei H L, Lienert T J, Zhang W, Kou S, DebRoy T 2023 *Prog. Mater. Sci.* **138** 101153
- [6] Ogorodnikov V A, Mikhailov A L, Burtsev V V, Lobastov S A, Erunov S V, Romanov A V, Rudnev A V, Kulakov E V, Bazarov Y B, Glushikhin V V, Kalashnik I A, Tsyganov V A, Tkachenko B I 2009 *J. Exp. Theor. Phys.* **109** 530
- [7] Huang L Q, Wang J, Momeni A, Wang S F 2021 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **31** 2116
- [8] Curran D R, Seaman L, Shockey D A 1987 *Phys. Rep.* **147** 253
- [9] Ren K R, Liu H Y, Ma R, Chen S, Zhang S Y, Wang R X, Chen R, Tang Y, Li S, Lu F Y 2023 *J. Mater. Sci. Tech.* **161** 201
- [10] Luo Q S, Kitchen M, Li J B, Li W B, Li Y Z 2023 *Wear* **523** 204779
- [11] Zhang W L, Kennedy G B, Muly K, Li P J, Thadhani N N 2020 *Int. J. Impact Eng.* **146** 103725
- [12] Cheng J C, Chai H W, Fan G L, Li Z Q, Xie H L, Tan Z Q, Bie B X, Huang J Y, Luo S N 2020 *Carbon* **170** 589
- [13] Ren Y, Li Z, Zhang Z Y, Zhang Z Y, Chen R, Li Z Y, Tan C W, Chen P W 2022 *Mater. Sci. Eng. A* **860** 144320
- [14] Molinari A, Wright T W 2005 *J. Mech. Phys. Solids* **53** 1476
- [15] Luo S N, An Q, Germann T C, Han L B 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 013502
- [16] Liao Y, Xiang M Z, Li G M, Wang K, Zhang X Y, Chen J 2018 *Mech. Mater.* **126** 13
- [17] Wang Y T, Zeng X G, Yang X, Xu T L 2022 *Comput. Mater. Sci.* **201** 110870
- [18] Liao Y, Xiang M Z, Zeng X G, Chen J 2014 *Comput. Mater. Sci.* **95** 89
- [19] Schuler H, Mayrhofer C, Thoma K 2006 *Int. J. Impact Eng.* **32** 1635
- [20] Li P, Wang L S, Yan S L, Meng M, Zhou Y F, Xue K M 2021 *Int. J. Refract. Met. H.* **94** 105376
- [21] Xiang M Z, Hu H B, Chen J, Long Y 2013 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **21** 055005
- [22] Kadai K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
- [23] Liao Y, Xiang M Z, Zeng X G, Chen J 2015 *Mech. Mater.* **84** 12
- [24] Li W H, Yao X H 2016 *Comput. Mater. Sci.* **124** 151
- [25] He L, Wang F, Zeng X G, Yang X, Qi Z P 2020 *Mech. Mater.* **143** 103343
- [26] Chen B, Li Y L, Şopu D, Eckert J, Wu W P 2023 *Int. J. Plasticity* **162** 103539
- [27] Jiang D D, Shao J L, Wu B, Wang P, He A M 2022 *Scripta Mater.* **210** 114474
- [28] Xie H C, Ma Z C, Zhang W, Zhao H W, Ren L Q 2024 *J. Mater. Sci. Tech.* **175** 72
- [29] Cheng Z D, Zhu J, Sun T Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 037504 (in Chinese) [程志达, 朱静, 孙铁昱 2011 *物理学报* **60** 037504]
- [30] Xu S N, Zhang L, Zhang C B, Qi Y 2007 *Acta Metall. Sin.* **43** 379 (in Chinese) [徐送宁, 张林, 张彩磊, 祁阳 2007 *金属学报* **43** 379]
- [31] Liu B B, Chen Y C, Guo L, Li X F, Wang K, Deng H Q, Tian Z, Hu W Y, Xiao S F, Yuan D W 2023 *Int. J. Mech. Sci.* **250** 108330
- [32] Du X, Yuan F P, Xiong Q L, Zhang B, Kan Q H, Zhang X 2022 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **54** 2152 (in Chinese) [杜欣, 袁福平, 熊启林, 张波, 阚前华, 张旭 2022 *力学学报* **54** 2152]
- [33] Chen B, Wu W P, Chen M X 2022 *Comput. Mater. Sci.* **202** 111015
- [34] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G 2004 *Phys. Rev. B* **69** 144113
- [35] Kedharnath A, Kapoor R, Sarkar A 2021 *Comput. Struct.* **254** 106614
- [36] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Wagner G J, Gullett P M 2006 *Int. J. Plasticity* **22** 257
- [37] Wang W D, Yi C L, Fan K Q 2013 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **23** 3353
- [38] Zhou Y, Cai Y, Lu L 2022 *J. Exp. Mech.* **37** 183 (in Chinese) [周延, 蔡洋, 卢磊 2022 *实验力学* **37** 183]
- [39] Jian W R, Xie Z C, Xu S Z, Yao X H, Beyerlein I J 2022 *Scripta Mater.* **209** 114379
- [40] Wang Y T, Zeng X G, Chen H Y, Yang X, Wang F, Qi Z P 2021 *Explo. Shock Waves* **41** 139 (in Chinese) [王云天, 曾祥国, 陈华燕, 杨鑫, 王放, 祁忠鹏 2021 *爆炸与冲击* **41** 139]
- [41] Yang X, Zhao Han, Gao X J, Chen Z L, Wang F, Zeng X G 2023 *Explo. Shock Waves* **43** 29 (in Chinese) [杨鑫, 赵晗, 高学军, 陈臻林, 王放, 曾祥国 2023 *爆炸与冲击* **43** 29]
- [42] Zhou T T, He A M, Wang P, Shao J L 2019 *Comput. Mater.*



- Sci.* **162** 255
- [43] Thirmer D, Zhao S T, Deluigi O R, Stan C, Alhafez I A, Urbassek H M, Meyers M A, Bringa E M, Gunkelmann N 2022 *J. Alloys Compd.* **895** 162567
- [44] Wang J N, Wu B, He A M, Wu F C, Wang P, Wu H A 2021 *Chin. J. High Pressure Phys.* **35** 4 (in Chinese) [王嘉楠, 伍鲍, 何安民, 吴凤超, 王裴, 吴恒安 2021 高压物理学报 **35** 4]
- [45] Mescheryakov Y I, Divakov A K, Zhigacheva N I 2000 *Shock Waves* **10** 43
- [46] Tang J F, Xiao J C, Deng L, Li W, Zhang X M, Wang L, Xiao S F, Deng H Q, Hu W Y 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 28039
- [47] Wang K, Zhu W J, Xiang M Z, Xu Y, Li G M, Chen J 2019 *Modell. Simul. Mater. Sc.* **27** 015001
- [48] Tuler F R, Butcher B M 1984 *International Journal of Fracture* **26** 322
- [49] Pei X Y, Peng H, He H L, Li P 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 034601 (in Chinese) [裴晓阳, 彭辉, 贺红亮, 李平 2015 物理学报 **64** 034601]
- [50] Davison L, Stevens A L 1972 *J. Appl. Phys.* **43** 988
- [51] Kanel G I, Rasorenov S V, Utkin A V 1996 *High-Pressure Shock Compression of Solids II* (New York: Springer-Verlag) pp1-24
- [52] Bai Y L, Ke F J, Xia M F 1991 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **23** 290 (in Chinese) [白以龙, 柯孚久, 夏蒙芬 1991 力学学报 **23** 290]
- [53] Qiu T, Xiong Y N, Xiao S F, Li X F, Hu W Y, Deng H Q 2017 *Comput. Mater. Sci.* **137** 273
- [54] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sc.* **20** 085007

# Law and mechanism of impact velocity on spalling and fracture behavior of single crystal nickel\*

Wang Lu-Sheng<sup>1)</sup> Luo Long<sup>1)</sup> Liu Hao<sup>1)</sup> Yang Xin<sup>2)</sup> Ding Jun<sup>1)</sup>  
Song Kun<sup>1)</sup> Lu Shi-Qing<sup>1)</sup> Huang Xia<sup>1)†</sup>

1) (College of Mechanical Engineering, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China)

2) (School of Environment and Resource, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621000, China)

(Received 4 February 2024; revised manuscript received 7 July 2024)

## Abstract

In order to reveal the influence of impact velocity ( $U_p$ ) on the spalling and fracture behavior of single crystal nickel, a non-equilibrium molecular dynamics approach is adopted to investigate the free surface velocity curve, radial distribution function, atomic crystal structures, dislocations, and void evolution process. The results show that the critical impact velocity  $U_p$  for spalling behavior in single crystal nickel is 1.5 km/s, and when  $U_p \leq 1.5$  km/s the spallation mechanism is classical spallation damage and when  $U_p > 1.5$  km/s it behaves as micro-spallation damage. The pore number and distribution area, and stress distribution area under micro-spallation damage are much higher than those under classical spallation damage. The influence of impact velocity on the classical spalling damage behavior ( $U_p \leq 1.5$  km/s) is analyzed and the corresponding spalling strength is obtained, indicating that an accident of spalling strength occurs when  $U_p$  is 1.3 km/s. The spalling strength of single crystal nickel is influenced by the combined effects of stacking faults, phase transformation, and dislocation. As the nucleation and emission of dislocations increase, the spalling strength decreases. When  $U_p < 1.3$  km/s, the spalling damage is mainly due to stacking faults. When  $U_p = 1.3$  km/s, the spalling strength is mainly affected by the competition between stacking faults and phase transformation. When  $U_p > 1.3$  km/s, spalling strength is predominantly influenced by the body-centered cubic (BCC) phase transformation mechanism (transformation path: FCC  $\rightarrow$  BCT  $\rightarrow$  BCC). This study reveals the impact velocity-dependent patterns, mechanisms, and effects on spalling damage and fracture, providing a theoretical basis for realizing the protective application of nickel-based materials under extreme impact conditions.

**Keywords:** impact velocity, single crystal nickel, spallation, phase transition, molecular dynamics

**PACS:** 46.35.+z, 46.50.+a, 73.61.At, 33.15.Vb

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240244

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12202081), the National Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant No. CSTB2023NSCQ-MSX0363), and the Science and Technology Research Program of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant No. KJQN202301117).

† Corresponding author. E-mail: [huangxia@cqut.edu.cn](mailto:huangxia@cqut.edu.cn)

## 冲击速度对单晶镍层裂行为的影响规律及作用机制

王路生 罗龙 刘浩 杨鑫 丁军 宋鹏 路世青 黄霞

## Law and mechanism of impact velocity on spalling and fracture behavior of single crystal nickel

Wang Lu-Sheng Luo Long Liu Hao Yang Xin Ding Jun Song Kun Lu Shi-Qing Huang Xia

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 164601 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240244

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240244>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 层错四面体对单晶铜层裂行为影响的分子动力学研究

Effect of stacking fault tetrahedron on spallation of irradiated Cu via molecular dynamics study

物理学报. 2020, 69(3): 036201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191425>

#### 单晶Ce冲击相变的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of shock-induced isostructural phase transition in single crystal Ce

物理学报. 2020, 69(11): 116202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200323>

#### 热峰作用下单斜ZrO<sub>2</sub>相变过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of phase transition by thermal spikes in monoclinic ZrO<sub>2</sub>

物理学报. 2021, 70(13): 136101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201861>

#### 单晶铁沿[101]晶向冲击过程中面心立方相的形成机制

Formation mechanism of face-centered cubic phase in impact process of single crystal iron along [101] direction

物理学报. 2020, 69(13): 130202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191877>

#### 温度对CoCrFeMnNi高熵合金冲击响应和塑性变形机制影响的分子动力学研究

Molecular dynamics study of temperature effects on shock response and plastic deformation mechanism of CoCrFeMnNi high-entropy alloys

物理学报. 2022, 71(24): 246101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221621>

#### 冲击波诱导水中纳米气泡塌陷的分子动力学分析

Molecular dynamics analysis of shock wave-induced nanobubble collapse in water

物理学报. 2021, 70(13): 134702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210058>