文章编号：1000-5773(2009)01-0037-05

冲击加载下铝中孔洞长大的微观机理分析*

崔新林[1,2]，李英骏[1]，祝文军[2]，祁美兰[3]，王海燕[2]，贺红亮[2]，刘建军[4]

(1. 中国矿业大学(北京)力学与建筑工程学院，北京 100083；
2. 中国工程物理研究院流体物理研究所，冲击波物理与
爆轰物理国防科技重点实验室，四川绵阳 621900；
3. 武汉理工大学理学院，湖北武汉 430070；
4. 北京化工大学理学院，北京 100029)

摘要：利用扫描电镜和透射电镜观测了冲击加载后高纯铝损伤状态孔洞的分布，发现在冲击波加载后，高纯铝中出现了大量的孔洞，孔洞大小多集中在百纳米尺度，分布不均匀，且呈现出带状形貌，局部区域的孔洞在冲击波作用下优先发展，孔洞长大，形成微米级的大孔洞。进一步的观测发现，在孔洞周围出现了大量的位错发射，发射方向位于{111}晶面上，是面心立方金属的密排面。运用分子动力学模拟进行了对比研究，验证了位错发射方向与观测结果是一致的。

关键词：冲击波；损伤；孔洞；位错
中图分类号：O521.2；O347.3 **文献标识码**：A

1 引 言

强冲击载荷作用下延性金属材料的拉伸型损伤与力学失效是许多工程技术领域中的重要科学问题。在冲击波作用下，由于相向稀疏波相互作用产生的拉伸应力引起材料内部微损伤成核、长大以及贯通，最后导致材料发生灾变式断裂。深入认识材料的力学行为要求从传统的宏观层次逐步转入细观乃至微观层次的研究，以便考察材料的变形损伤机理。在微观状态下，材料内部会有一些不均匀组织或微小的孔洞，这些位置都易出现成核现象。另外，在不同晶粒的连接处，也易于成核。材料内部一旦出现微孔洞成核，在拉应力的作用下，微孔洞就会以近似球形的形式长大。随着孔洞的进一步长大，它们会相互贯通，直到材料发生破坏。Curran[1-3]等人通过对动态破坏后试样的显微观察，揭示了微缺陷的统计分布性质，提出了 NAG(Nucleating and Growth)模型。Bleak[4]使用大规模分子动力学方法模拟了单晶铜导致动态断裂的微观过程。大量的理论和实验研究已经表明，孔洞的生长是诱导材料损伤失效的基本原因[5-14]，但是对于孔洞生长的微观机理还缺少研究，对于孔洞周围的形变演化也缺乏观测和分析。

本工作以高纯铝(99.999%)作为延性金属的模拟材料，在一级轻气炮上开展了一维应变平面冲击波加载实验，对冲击后的样品进行软回收后利用扫描电镜和透射电镜观察，对样品中孔洞的发展、演化进行了观测分析，并与分子动力学模拟的结果进行了对比，获得了验证。

* **收稿日期**：2008-08-20；**修回日期**：2008-09-26
基金项目：国防科技重点实验室基金项目(9140C6701010701)；中国工程物理研究院基金重点项目(2007A01004)
作者简介：崔新林(1982—)，男，博士研究生，主要研究方向为材料高压相变和损伤断裂. E-mail：xinlincui@163.com
通讯作者：贺红亮(1963—)，男，研究员，博士生导师，主要研究方向为高压材料科学与力学. E-mail：honglianghe@263.net

2 实验和样品

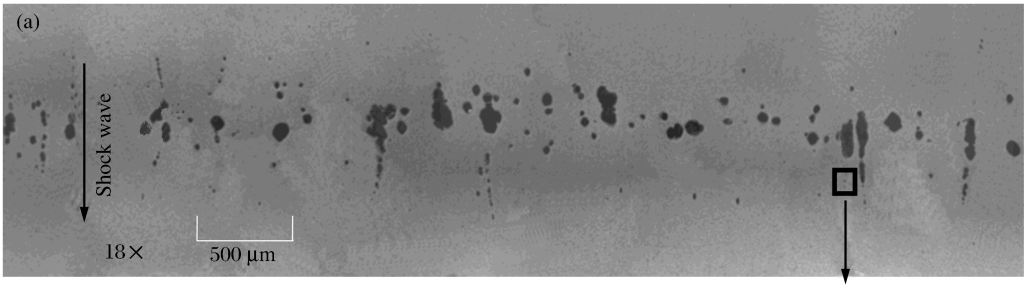
在一级轻气炮上开展了一维平面冲击波加载实验，采用对称碰撞方式用飞片撞击样品，即飞片和样品均为高纯铝，飞片和样品的厚度分别为 3 mm 和 6 mm，碰撞速度为 215.4 m/s。实验中使用的高纯铝试件由贵州铝厂提供，由北京有色金属研究院轧制成棒材，纯度大于 99.999%，主要杂质及含量：Si (0.001‰～0.002‰)，Fe(0.001 0‰～0.002 4‰)，Cu(0.001 0‰～0.002 1‰)，Pb(0.000 1‰)，Zn (0.000 5‰)，Ga(0.000 1‰～0.000 18‰)，Ti(0.000 1‰～0.000 8‰)，Cd(0.000 1‰)，In(0.000 10‰～0.000 13‰)。制样时将实验回收得到的样品沿冲击波加载方向进行切割。因为高纯铝材料材质软、延展性强，制作金相分析样品较为困难，极易产生变形层和划痕，还有可能将微小的孔堵塞或者拉大，因此在制作样品的过程要非常谨慎，从切割到研磨、减薄等阶段都必须十分小心，尽量不要引入新的缺陷和损伤。观测所采用的电镜分别为：HITACHI S-4700 20 kV 扫描电子显微镜和 HITACH H-800 200 kV透射电子显微镜。

3 观测结果和分析

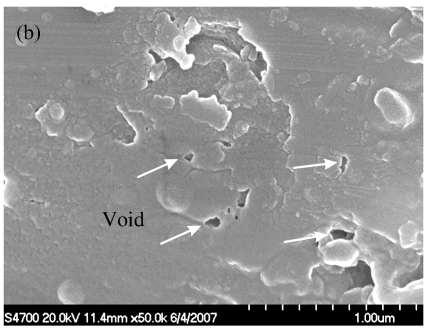
3.1 孔洞的分布和数量

在轻气炮上用飞片撞击靶板，冲击波在飞片和靶材料中同时产生，到达靶板与飞片自由面的冲击波都会被反射，形成稀疏波。稀疏波交汇的地方会形成一个拉伸应力区，损伤就会在此产生。由于稀疏波的作用，在样品的拉伸应力区中首先会出现大量的孔洞，孔洞成核、长大，然后贯通，之后材料就会出现断裂。

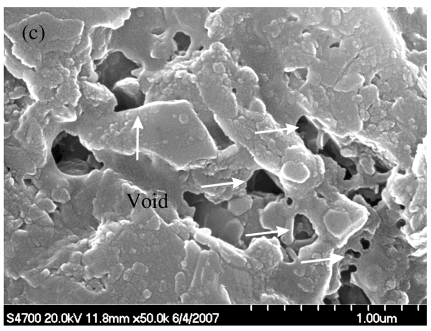
通过金相显微镜观测回收后的样品，如图 1(a)所示，样品放大倍数为 18 倍。发现样品中大量的微孔洞长大成大孔，相邻的孔洞之间发生了连接，形成了更大的不规则的孔洞，损伤区域也变得更加集中。



(a) Observation of voids in shocked high purity aluminum by means of metallographic microscope



(b) Observation of the unshocked high purity aluminum by means of Scanning Electron Microscope(SEM)



(c) Observation of the shocked high purity aluminum by means of Transmission Electron Microscope(TEM)

图 1 高纯铝中孔洞的分布和数量((b)和(c)中白色箭头指向孔洞的位置)

Fig. 1 The distribution and number of voids in high purity aluminum
(The white arrowheads show the position of voids in the (b) and (c))

为了观测实验样品中孔洞的成核和长大,通过扫描电镜观测对比了未冲击的样品和冲击后的样品中的孔洞分布和孔洞数量。在扫描电镜下,非常清晰地观测到了孔洞的分布,在图片中显示出一些黑色的小洞。图 1 中白色箭头所指向的就是部分孔洞。其中图 1(b)是未受到冲击的样品中的孔洞分布,孔洞数量非常少,孔洞的直径都比较小,约几十纳米到一百纳米,孔洞分布比较均匀。通过对比图 1(c),发现冲击后的样品,其孔洞数量明显增多,孔洞直径明显变大,通过对比标尺,可以发现大部分孔洞直径为 50 nm 到三四百纳米,而且较大的孔洞比较多,孔洞的分布多集中在百纳米量级,孔洞分布不均匀,呈现带状排列的现象,沿着冲击波加载方向,部分区域的孔洞被优先发展起来,形成了微米级的大孔洞。在更高倍的观测下,并没有发现更多的小孔洞。在高分辨率电镜下观测时,也没有看到更小的孔洞,孔洞的成核可能就是始于纳米级孔洞。

3.2　孔洞周围的位错发展

冲击波加载下,在孔洞等缺陷的周围一般都会伴随着位错的成核和运动,即发生塑性变形。面心立方(fcc)结构晶体中全位错通常分解为不全位错运动,而不全位错扫过的区域将经历从 fcc 到六角密堆(hcp)结构的转变。在 fcc 晶体中,$\frac{1}{6}\langle 211\rangle\{111\}$不全位错是最容易发生的,而且一旦产生并沿着{111}面向前运动,就会在其后形成堆垛层错[15]。

在制样过程中,沿着冲击波加载方向寻找孔洞分布较多的区域,进行了切割、研磨和剖光,以观测孔洞的发展、演化和孔洞周围的位错生长。在用透射电镜对微区的观测中发现,大部分孔洞周围都出现了位错发射,在图 2(a)中箭头所指的位置即是位错线。对图 2(a)中的位错区(A 区)做电子衍射分析,如图 2(b)所示,通过标定其衍射点,发现其位错发射方向是在$(\bar{1}1\bar{1})$面上,正好是面心立方金属中最容易出现位错的区域,与晶体学理论中关于位错成核区域是一致的。图 2(c)是对图 2(a)中某一条位错线(B 区)的放大,密集的位错线清晰可见,位错在孔洞周围先成核,然后向外运动。

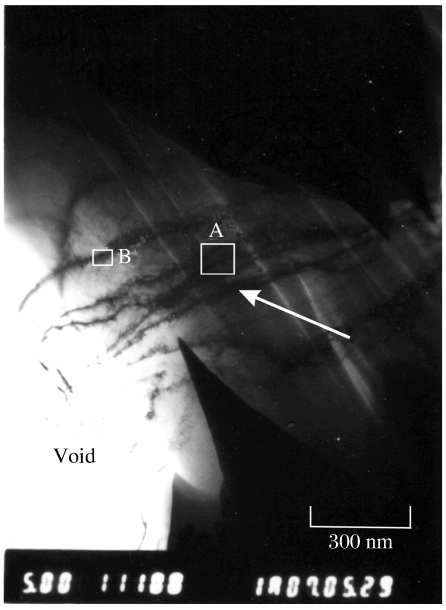


图 2(a)　孔洞周围的位错发射

Fig. 2(a)　Dislocation emission around the void

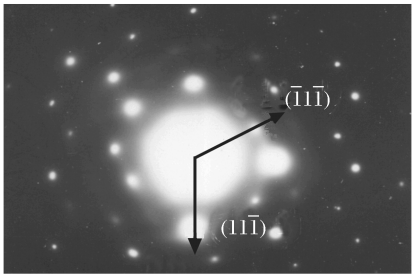


图 2(b)　对 A 区的电子衍射图

Fig. 2(b)　Diffraction pattern of zone A

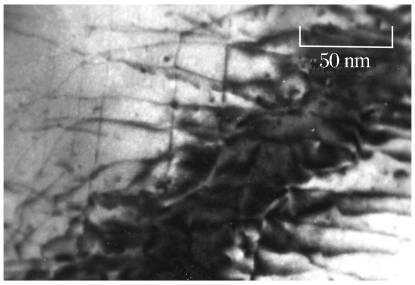


图 2(c)　对 B 区的位错放大图

Fig. 2(c)　Amplified picture of zone B

3.3　分子动力学模拟

用分子动力学模拟研究了在冲击加载下单晶铝中孔洞周围的位错发射,并与实验中观测到的孔洞周围出现的大量位错线进行了对比。在分子动力学模拟中,原子间相互作用势采用 Mision[16] 等提出的

嵌入式原子势(EAM 势),其适用性已经得到了验证。模拟体系的 x、y 和 z 轴分别对应于[100]、[010]和 [001]晶向。冲击方向沿 x 方向,在冲击方向上采用自由边界条件,y、z 方向分别采用周期性边界条件,以实现冲击波压缩下的一维应变条件。铝样品的尺寸是 36 nm×24 nm×24 nm,共包含 1 296 000 个原子,在样品的中心预置一个球形纳米孔洞,孔洞直径约为 1 nm,模型设计如图 3 所示。模拟过程中时间步长为 1 fs,总共模拟 15 000 步。在分子动力学模拟中,固定样品初始两层(100)面的原子作为活塞,在 x 方向以恒定速度推动活塞在样品中产生冲击波,冲击波阵面后的粒子速度为活塞速度。使用自主开发的 LZ-Parallel MD 程序进行模拟。由于碰撞过程十分短暂,可以认为整个系统是绝热的,模拟体系的初始温度设为0 K。模拟过程中活塞的速度设为 600 m/s,冲击强度约为 12 GPa。

冲击加载后,运用键对分析技术[17]识别模型内部原子中的 fcc、hcp 和无序结构(非 fcc 和 hcp 结构)。保留模型中不属于 fcc 结构的原子,可以获得孔洞塑性变形区域和孔洞的外形轮廓。图 4 是去掉 fcc 结构原子后得到的原子快照图。当冲击波扫过孔洞后,在与冲击加载方向垂直的赤道附近首先观察到位错成核,然后位错均沿 4 个等效的{111}面向外发射剪切型不全位错环,孔洞左、右两部分都出现了位错成核和发射,位错环在向外扩展的过程中,侧面互相接触,形成 Stair-Rod 位错锁。实验观测结果与理论模拟结果是吻合的,位错发射方向都是位于{111}面上。

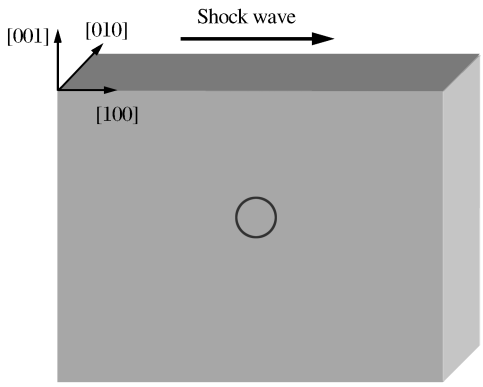


图 3 MD 模拟模型示意图(内置直径为 1 nm 的孔洞)

Fig. 3 Schematic of MD simulation model (The void diameter is 1 nm)

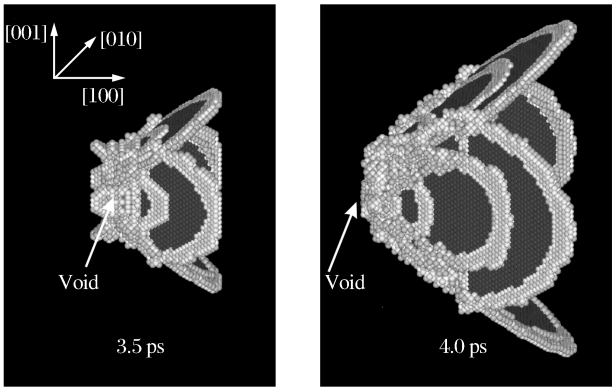


图 4 MD 模拟孔洞周围的位错发展

Fig. 4 The evolution of dislocation around the void by MD simulation

4 结 论

使用电子显微镜观测了冲击加载下高纯铝中微孔洞的分布。通过对冲击加载后软回收样品的观测,发现在冲击加载后的样品中出现了大量的纳米级孔洞,孔洞直径多在几百纳米尺度,孔洞分布不均匀,呈现带状分布,孔洞的连通方向沿冲击波加载方向。对孔洞进一步的观测发现,在孔洞周围出现了大量的位错发射,其发射方向是在{111}面上,与分子动力学模拟的结果是一致的。

感谢北京化工大学理学院于迎春老师在电镜观测方面提供的帮助。

References:

[1] Seaman L, Curran D R, Shockey D A. Computational Models for Ductile and Brittle Fracture [J]. J Appl Phys, 1976, 47(11): 4814-4826.

[2] Curran D R, Seaman L, Shockey D A. Dynamic Failure of Solid [J]. Phys Rep, 1987, 147: 253-388.

[3] Curran D R, Seaman L. Simplified Models of Fracture and Fragmentation [A]//Davison L, Grady D, Shahinpoor M. High-Pressure Shock Compression of Solids Ⅱ [C]. New York: Springer-Verlag, 1996: 340-365.

[4] Belak J. On the Nucleation and Growth of Voids at High Strain-Rates [J]. Journal of Computer-Aided Materials Design, 1998, 5: 193-206.

[5] Barbee J, Seaman L, Crewdson R, et al. Dynamic Fracture Criteria for Ductile and Brittle Metals [J]. Journal of Materials, JMLSA, 1972, 7(3): 393-401.
[6] Raj R, Ashby M F. Intergranular Fracture at Elevated Temperatures [J]. Acta Metallurgica, 1975, 23: 653-666.
[7] Rice J R. Dislocation Nucleation from a Crack Tip: An Analysis Based on the Peierls Concept [J]. J Mech Phys Solids, 1992, 40: 239-245.
[8] McClintock F A. A Criterion for Ductile Fracture by the Growth of Holes [J]. J Appl Mech, 1968, 5(3): 363-371.
[9] Rice J R, Tracey D M. On the Ductile Enlargement of Voids in Triaxial Stress Fields [J]. J Mech Phys Solids, 1969, 17: 201-217.
[10] Kubota A, Reisman D B, Wolfer W G. Dynamic Strength of Metals in Shock Deformation [J]. Appl Phys Lett, 2006, 88(24): 241924(1)-241924(2).
[11] Mintmire J W, Robertson D H, White C T. Molecular-Dynamics Simulations of Void Collapse in Shocked Model-Molecular Solids [J]. Phys Rev B, 1994, 49(21): 14859-14864.
[12] Seppala E T, Belak J, Rudd R E. Effect of Stress Triaxiality on Void Growth in Dynamic Fracture of Metals: A Molecular Dynamics Study [J]. Phys Rev B, 2004, 69(13): 134101-134119.
[13] Davila L P, Erhart P, Bringa E M et al. Atomistic Modeling of Shock-Induced Void Collapse in Copper [J]. Appl Phys Lett, 2005, 86(16): 161902(1)-161902(3).
[14] Hatano T. Spatiotemporal Behavior of Void Collapse in Shocked Solids [J]. Phys Rev Lett, 2004, 92(1): 015503-015506.
[15] Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocations [M]. New York: Wiley Press, 1982: 306-320.
[16] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J, et al. Interatomic Potentials for Monoatomic Metals from Experimental Data and *ab Initio* Calculations [J]. Phys Rev B, 1999, 59: 3393-3407.
[17] Honeycutt J D, Andersen H C. Molecular Dynamics Study of Melting and Freezing of Small Lennard-Jones Clusters [J]. J Phys Chem, 1987, 91: 4950-4963.

Micro-Analysis of the Void Growth of Aluminum under Shock Loading

CUI Xin-Lin[1,2], LI Ying-Jun[1], ZHU Wen-Jun[2], QI Mei-Lan[3],
WANG Hai-Yan[2], HE Hong-Liang[2], LIU Jian-Jun[4]

(1. *School of Mechanics and Civil Engineering, China University of Mining and Technology (Beijing), Beijing* 100083, *China*;
2. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
3. *School of Science, Wuhan University of Technology, Wuhan* 430070, *China*;
4. *School of Science, Beijing University of Chemical Technology, Beijng* 100029, *China*)

Abstract: The distribution of micro-voids in aluminum under shock loading has been investigated by means of SEM (Scanning Electron Microscope) and TEM (Transmission Electron Microscope). Results show that plenty of nano-voids have been produced in the shocked aluminum. Most of the void sizes are hundred nanometers. They distribute inhomogeneity, and connect together as a band. Further analysis of the micro-voids indicate that a lot of dislocations are generated around the voids, and the emission direction is in the {111} planes, which are the closed-packed planes of the face-centered cubic metal. The emission direction of the dislocations is excellently agreement with the molecular dynamics (MD) simulation.

Key words: shock wave; damage; void; dislocation