文章编号:1000-5773(2007)01-0059-07

沿〈111〉晶向冲击加载下铜中纳米孔洞增长的塑性机制研究*

邓小良[1,2],祝文军[1,3],贺红亮[1],伍登学[2],经福谦[1,3]

(1.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实验室,四川绵阳 621900;
2.四川大学物理科学与技术学院,四川成都 610064;
3.四川师范大学高压物理研究中心,四川成都 610068)

摘要:用分子动力学方法计算模拟了沿〈111〉晶向冲击加载过程中,单晶铜中纳米孔洞(直径约 1.3 nm)的演化及其周围区域发生塑性变形的过程。模拟结果表明,在沿〈111〉晶向冲击加载后,在面心立方(fcc)结构中的 4 族{111}晶面中有 3 族发生了滑移。伴随孔洞的增长,在所激活的 3 族{111}晶面上,观察到位错在孔洞表面附近区域成核,然后向外滑移,其中在剪切应力最大的〈112〉方向上,其位错速度超过横波声速,其它〈112〉方向的位错速度低于横波声速。模拟得到的位错阻尼系数范围与实验值基本符合。由于孔洞周围产生的滑移在空间比较对称,孔洞增长形貌接近球形。在恒定的冲击强度下,孔洞半径增长速率近似保持恒定,其速率随着冲击强度的增加而增大。

关键词:位错;断裂;分子动力学;纳米孔洞
中图分类号:O521.2;O347.3 **文献标识码**:A

1 引 言

材料断裂虽然是一种在宏观尺度下发生的现象,但是要深刻理解宏观断裂过程,还需要深入到材料内部的微、介观尺度,对其结构演化过程进行分析。1976 年 Seaman 等人[1]对冲击作用后回收到的受损样品进行显微观察,揭示了延性金属在高应变率下的断裂包含以下几个过程:即微孔洞的成核、生长和贯通。开始,微孔洞在材料内部成核,然后微孔洞在拉伸应力作用下开始生长,当单个孔洞生长到一定程度以后,孔洞之间开始发生相互作用,从而互相贯通,最终在材料内部形成断裂面。

但是上述技术对受损样品只能进行事后观察,无法确切地了解微孔洞发展的动态过程,只能是通过在受损样品中留下的痕迹间接地推测中间过程。基于连续介质理论建立的关于材料损伤断裂的各种模型[1-2],虽然可以建立加载应力、应变和损伤程度的关系,但是模型中的参数需要通过实验拟合得到,同时由于忽略了材料本身不连续的结构特征,无法了解损伤发展的微观机制。由于近年来高速大容量并行计算技术的发展,分子动力学方法在研究材料塑性变形、断裂等相关领域获得了广泛的应用[3-6],它可以在亚纳秒时间尺度和亚微米空间尺度上给出不同时刻材料内部清晰的原子图像和速度矢量等信息,通过这些信息并做相应的处理后,就能清晰地观察到材料内部的变形过程,以及微观缺陷在压缩和拉伸应力作用下的动态演化细节。所以,分子动力学是在微观尺度上研究材料内部损伤微观机制的有力工具。

由于真实材料往往包含大量的缺陷,例如空位、位错、晶界、二相粒子、以及微孔洞等等,这些缺陷都

* **收稿日期**:2005-11-15;**修回日期**:2006-02-26
基金项目:国家自然科学基金 NSAF 联合基金重点项目(10476027);中国工程物理研究院科学技术基金(20050105)
作者简介:邓小良(1978—),男,硕士研究生,主要从事材料动态响应数值模拟研究. E-mail:xiaoliangdeng@163.com
通讯作者:祝文军(1968—),男,博士,副研究员,主要从事材料动态响应数值模拟研究. E-mail:wjzhu@263.net

可能影响材料在冲击加载下损伤的产生和发展。因此,近年来利用分子动力学研究冲击加载下单个缺陷的产生和发展的报道逐步增多[7-10]。我们曾对单晶铜沿〈100〉晶向进行了冲击加载,利用分子动力学方法,对单个微孔洞的演化规律进行过初步研究[11],发现在冲击压缩和拉伸阶段,在孔洞周围伴随有特征滑移运动,孔洞变形形貌与这些塑性过程有密切关系。单晶金属由于沿各晶向具有不同的原子排列,因此在不同的冲击加载方向上,应该有不同的动载响应。考虑到目前对 fcc 单晶不同方向加载下的动载响应研究还缺少报道,本工作用分子动力学模拟了沿〈111〉晶向冲击加载时,单晶铜中微孔洞演化的动态过程,着重研究在动态拉伸过程中孔洞增长时周围区域的塑性变形过程和增长规律,这对全面了解延性金属材料的微损伤机制是有重要意义的。

2 分子动力学模拟方法

进行分子动力学模拟的首要问题是要得到准确的原子之间的相互作用势函数。我们采用 Mishin 等人[12]的原子嵌入势模型(EAM),因为它不仅能准确地计算单晶铜的弹性性质、结合能、缺陷结合能等参数,而且还拟合了铜在高压下的 p-V 关系,能够比较准确地描述铜原子之间在冲击加载下的相互作用[13]。

模拟所用模型的 x、y、z 坐标分别是沿[$1\bar{1}1$]、[110]、[$\bar{1}12$]晶向。沿 x 方向进行冲击加载,x 方向为自由边界条件,y、z 方向分别为周期性边界条件,模拟体系共包含约 11 235 个原子,沿 x 方向共有约 50 个($1\bar{1}1$)面,每个($1\bar{1}1$)面上约有 2 100 个原子,在模拟体系的中心预置了一个直径约 1.3 nm 的微孔洞(除去 86 个铜原子形成),这样的纳米孔洞在块状金属加工后或者核辐照损伤后是很容易形成的[14-15],模型的剖面图如图 1 所示。采用活塞模型来模拟材料中受碰撞产生冲击波的过程:首先使 x 方向的一个自由边界处约两层原子(活塞原子)以恒定的速度沿 x 方向运动,此时将在材料中激起一个冲击波,采用 Viril 定理[16]计算体系内部的局域应力,再根据局域应力分布,可以判定某时刻冲击波阵面的空间位置,然后就能够得到粒子速度和冲击波速度的关系,而模拟体系大小已知,再根据冲击波速度就能够知道冲击波阵面何时达到自由面,然后取消恒定的活塞原子速度,使其恢复为自由面,此后从这两个自由面上反射的两个相向传播的稀疏波,将在预置的微孔洞处(位于样品中部)交汇,并形成拉伸应力区,随着这两个稀疏波分别向前传播,拉伸应力区逐渐展宽。微孔洞在此拉伸应力作用下将开始长大,模拟过程中时间步长为 1 fs,总共模拟 10 000 步,模拟的时间尺度包括了孔洞在第一次拉伸应力波作用下的生长情况。模拟的初始温度设为 0 K。通过对活塞原子施加不同的速度值,以便在材料中得到不同强度的冲击波。

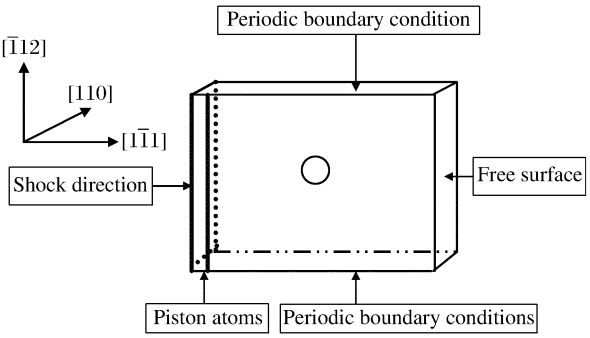


图 1 模拟模型示意图

Fig. 1 Schematic of simulation model

3 计算结果和讨论

模拟中活塞速度范围在 250～500 m/s 之间,每间隔 50 m/s 进行一次计算模拟。结果发现在活塞速度小于 350 m/s 时,孔洞仅受到弹性的压缩和拉伸,在孔洞周围没有观察到塑性变形。当活塞速度为 350～500 m/s 时,在压缩阶段观察到孔洞塌缩并在周围出现位错成核和运动现象;在拉伸阶段,首先发生与压缩时相反的位错运动过程,随着孔洞形状的恢复,压缩阶段滑移后产生的位错、层错等痕迹逐渐消失。进入拉伸阶段后,随着孔洞进一步增长,微孔洞附近区域又开始出现新的塑性变形。由于塑性变形过程对于微孔洞的生长有重要作用,所以我们仔细观察了孔洞长大时周围的塑性变形过程。根据位错理论,具有 fcc 结构的金属通常是借助在其 4 族{111}面上的位错运动实现塑性变形的。因此,在模拟过程中着重考察体系中的 4 族{111}面上的原子排列情况。通过对晶体结构进行分析,可以准确得到任意一个{111}晶面。为了便于观察,有必要先对 fcc 晶体中的位错结构作一简单说明,在具有 fcc 结构

的金属中，最短的全位错(Perfect Dislocation)滑移矢量是($\frac{a}{2}$)〈110〉(a 为铜的晶格常数)，但通常($\frac{a}{2}$)〈110〉的滑移相对于($\frac{a}{6}$)〈112〉的滑移具有较高的势垒。故在 fcc 晶体中，全位错通常都倾向于分解为不全位错(Partial Dislocation)，在不全位错之间则以一片堆积层错相联。由于沿〈111〉方向，fcc 晶体具有…ABCABCABC…的结构(其中 A、B、C 代表某{111}面)；如果产生一个($\frac{a}{6}$)〈112〉型的部分位错，则位错扫过的区域将会转变为六角密排(hcp)型的…ABABAB…结构。我们分析时正是借助了这一点，即首先得到连续 3 层{111}面的原子图像，用 3 种不同灰度的颜色表示位于不同层上的原子，如果能够同时看到 3 层原子，则表示这一区域是完整的 fcc 结构；如果在某些区域只能观察到两层原子，则表示这一区域是一片堆积层错(Stacking Fault)，层错的边缘是不全位错。

位错理论为人们理解材料的塑性变形过程提供了一个基本框架，所以，要了解孔洞附近区域的塑性变形，就必须要研究这一区域位错的成核和运动等过程。图 2 是活塞速度为 500 m/s 时，得到的 4 个穿过孔洞中心的{111}面在 4 000 个时间步时(处于拉伸应力状态)的原子排列图像，图 3 是在同样的活塞速度下，偏离孔洞中心的($1\bar{1}\bar{1}$)面在不同时间步时的原子图像。结合前面的叙述，可以从图中清晰地看到，在($1\bar{1}\bar{1}$)、(111)、($\bar{1}\bar{1}1$)3 个晶面上有不全位错运动，从而在孔洞附近留下了一片堆积层错，而法线方向为加载方向的($1\bar{1}1$)晶面上无位错运动。故我们看到，在沿[$1\bar{1}1$]晶向进行冲击加载时，共激活了 4 族滑移面中的 3 族。由于位错理论认为，位错运动的驱动力是滑移系统上的分解剪切应力，为了深入理解位错运动的过程，我们求解了在所有 fcc 滑移系统上的剪切应力，结果见表 1。从表 1 中数据可以看到，沿($1\bar{1}1$)晶面上所有〈112〉方向上的分解剪切应力均为零，所以在($1\bar{1}1$)上并没有发现位错的成核和运动。此外，可以看到另外 3 个{111}面上的剪切应力具有对称性，这 3 个面上的位错运动和所形成的堆积层错图形具有一定的相似性。

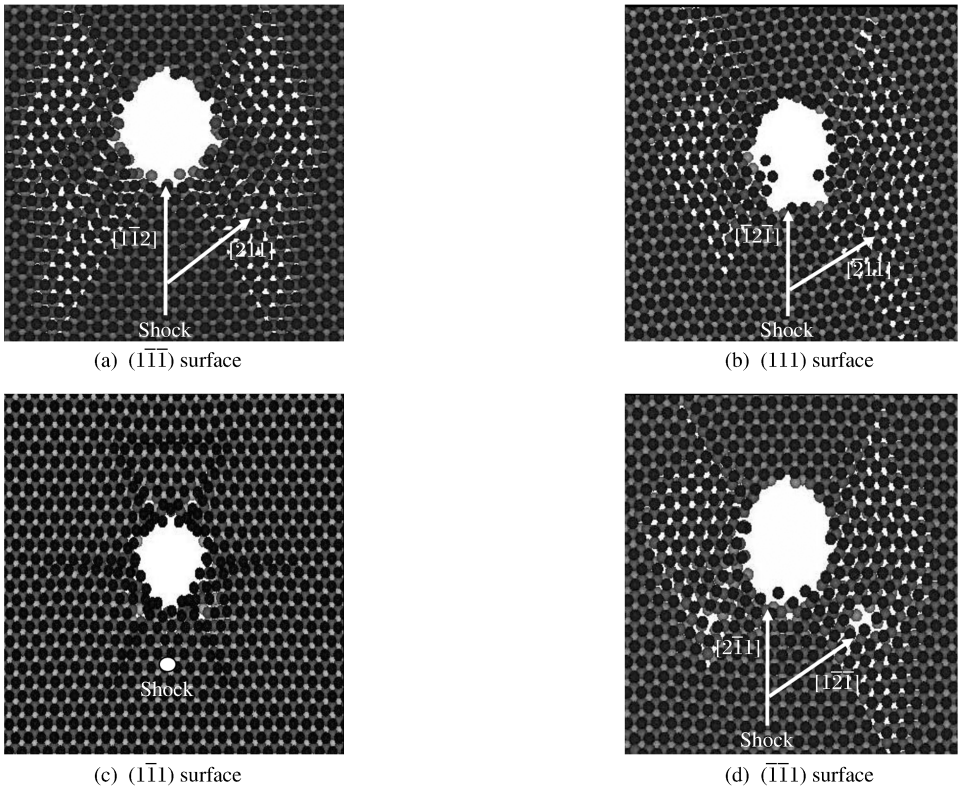
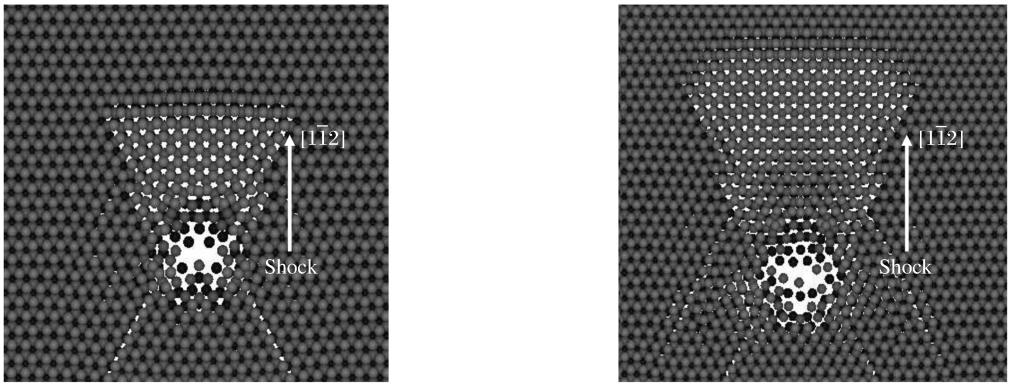


图 2　活塞速度为 500 m/s、4 000 个时间步时(孔洞处于拉伸应力区)4 个{111}滑移面上的原子快照

Fig. 2　The snapshot of the atoms in the four {111} slip surface at 4 000 time step with piston velocity of 500 m/s



(a) 4 000 time step (b) 4 500 time step

图 3 同一(1$\bar{1}\bar{1}$)面上在不同时刻的原子位置图,位错沿[1$\bar{1}$2]晶向运动

Fig. 3 The snapshot of the atoms in the same (1$\bar{1}\bar{1}$) plane at different time step. Dislocations move along [1$\bar{1}$2] crystal orientation

表 1 活塞速度为 500 m/s 时,拉伸区主应力为 $\sigma_{xx}=19.60$ GPa,$\sigma_{yy}=8.32$ GPa,$\sigma_{zz}=8.32$ GPa 时,4 个滑移面{111}上的不同晶向的分解剪切应力 σ_{shear}

Table 1 The resolved shear stress along different crystal direction in four {111} slip plane with piston velocity of 500 m/s, the primary tensile stresses are $\sigma_{xx}=19.60$ GPa, $\sigma_{yy}=8.32$ GPa, $\sigma_{zz}=8.32$ GPa

Slip surface	Crystal orientation	σ_{shear}/(GPa)	Slip surface	Crystal orientation	σ_{shear}/(GPa)
(1$\bar{1}\bar{1}$)	[1$\bar{1}$2]	3.54	(111)	[$\bar{1}\bar{1}$2]	1.78
	[$\bar{1}$2$\bar{1}$]	1.78		[$\bar{1}$2$\bar{1}$]	3.54
	[211]	1.78		[$\bar{2}$11]	1.78
(1$\bar{1}$1)	[121]	0.0	($\bar{1}\bar{1}$1)	[112]	1.78
	[$\bar{2}\bar{1}$1]	0.0		[1$\bar{2}\bar{1}$]	1.78
	[$\bar{1}$12]	0.0		[2$\bar{1}$1]	3.54

另外,从图 2 还可以看到,在一个特定的滑移面之内,位错没有在整个平面内滑移。在模拟中看到,两个不同的{111}面相交于〈110〉方向的直线,如果在这两个{111}面上都有位错产生和滑移,则位错与位错之间会发生相互作用,其结果将是生成位错线在〈110〉方向的压杆位错(Stair-Rod)。由于压杆位错是不可滑移的,所以位错不可能越过这个〈110〉方向的线而在整个平面内滑移。如图 2 所示,在发生滑移的相互平行的{111}晶面上,每个晶面内发生滑移的区域被约束在一片扇形区域,扇形区域的边界是沿〈110〉晶向的线。我们观察到不同的晶面发生滑移的区域不一样,这是由于在 fcc 结构的晶体中,位错滑移需要克服一定阻力(静态加载下约为 $10^{-5}\mu$[17],μ 是剪切模量)。当活塞速度为 500 m/s 时,即使是在分解剪切应力比较小的方向上,剪切应力也足以克服位错滑移所需要的势垒,因此在每个滑移面上,在每个〈112〉方向都可以观察到有位错运动(见图 2、图 3)。当活塞速度为 350 m/s 时,观察到在发生滑移的{111}面上,不全位错只沿着分解剪切应力最大的一个〈112〉方向运动,而其它两个〈112〉晶向没有观察到位错运动。这是因为随着冲击强度降低,在分解剪切应力较小的晶向上得到的能量不足以克服位错滑移的势垒。当活塞速度进一步减小到低于 300 m/s 时,此时只观察到孔洞受到弹性压缩和拉伸,而且在压缩和拉伸阶段均未在孔洞附近出现位错。

晶态固体材料发生塑性变形的基本机制涉及到微观尺度上位错的运动,所以位错运动快慢是一个重要参量。我们在工作中直接测量了孔洞附近区域位错运动的速度。首先通过结构分析得到同一滑移面上不同时刻的原子排列图像,图 3 所示为活塞速度为 500 m/s 时,连续 3 层(1$\bar{1}\bar{1}$)面上在不同时刻的原子排列情况。可以看到,随着时间的增加,这个(1$\bar{1}\bar{1}$)面上的位错环逐渐长大,在这个位错环的前端

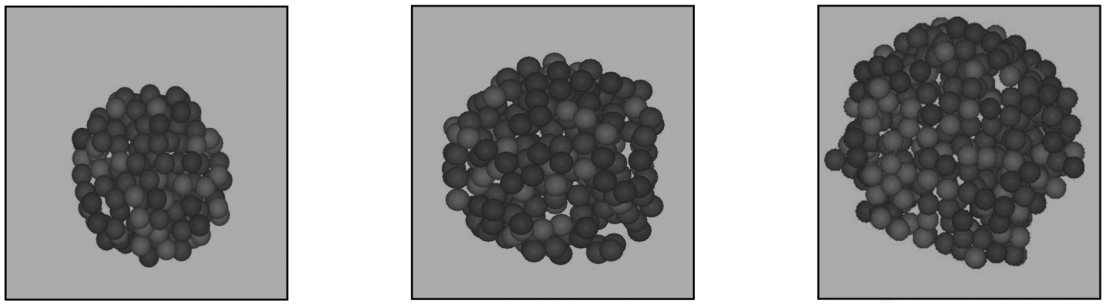
有一个 $\boldsymbol{b}=(\frac{a}{6})[1\bar{1}2]$($\boldsymbol{b}$ 为此位错的 Burgers 矢量)的不全刃位错运动,根据两个时间它所处的不同位置,可以计算得到这种条件下位错的运动速度约为 3 542 m/s。该速度已经超过〈112〉晶向的横波速度(约 2500 m/s)而低于纵波速度(约 5000 m/s),该位错是跨声速位错。其它[$\bar{1}2\bar{1}$]、[211]两个方向的位错速度测得为 1 771 m/s,是亚声速位错。根据位错的弹性理论[18],位错不能从亚声速逐渐加速超过横波声速,成为跨声速位错,但是可以在强剪切下直接产生跨声速甚至超声速位错。纯剪切加载下的位错运动的分子动力学模拟结果表明,强剪切可以使位错以跨声速或者超声速速度稳定运动[19],并预测在冲击条件下可能会观测到超声速位错的产生。我们的模拟结果支持了这一预测。

位错在亚声速运动时,剪切应力与位错速度的关系可以用声子粘性模型来描述[20],模型如下式表示

$$\boldsymbol{v}=(\boldsymbol{b}/B)\tau \tag{1}$$

式中:$\boldsymbol{v}$ 是位错运动速度,$\boldsymbol{b}$ 是位错 Burgers 矢量,B 是铜的位错衰减常数,τ 是在滑移方向的剪切应力。在粒子速度为 500 m/s 的加载条件下,在滑移面$(1\bar{1}\bar{1})$上沿$(1/6)[\bar{1}2\bar{1}]$的分解剪切应力为 1.78 GPa,根据该方向的位错速度计算得到铜的位错阻尼系数为 $B=1.47\times10^{-4}$ Pa·s,与通过其它方向的亚声速位错运动速度计算得到的结果一致。这个结果接近铜中位错阻尼系数实验测量值$(0.7\sim1.4)\times10^{-4}$ Pa·s 的范围[21]。

微孔洞体积随时间的变化规律是研究延性材料断裂过程的重要问题。通过键对分析技术[22],可以识别模型内部原子所处的 3 种结构:即 fcc 结构、hcp 结构、无序结构(非 fcc 和非 hcp 结构);由于孔洞周围原子处于无序状态,通过保留模型中属于第 3 种结构的原子,就能够得到微孔洞的外形轮廓图。图 4 是用上述方法得到的不同时刻的微孔洞轮廓示意图(活塞速度为 500 m/s)。



(a) 3 500 time step　　(b) 4 000 time step　　(c) 4 500 time step

图 4　不同时刻微孔洞外形轮廓示意图(活塞速度 500 m/s)

Fig. 4　Snapshots of the amorphous atoms around the void surface at different time step with piston velocity of 500 m/s

如图 4 所示,在微孔洞受到拉伸应力作用开始生长的过程中,位错在孔洞表面成核并向外运动,是孔洞增长的主要机制。因为位错在孔洞周围成核比较均匀,因此孔洞增长形状近似为一个球形。这与〈100〉方向加载后拉伸阶段的变形过程明显不同。在〈100〉方向加载时,在拉伸阶段,位错主要在经过孔洞中心与加载方向垂直的面上成核,孔洞在增长过程中的形貌呈椭球形。在利用连续介质损伤力学研究延性金属动态损伤过程中,孔洞半径的增长速度是一个关键参数。因此将微孔洞等效成一个和它体积相等的圆球,然后研究这个等价的球半径的生长规律。为了比较方便,把不同加载强度下孔洞开始增长

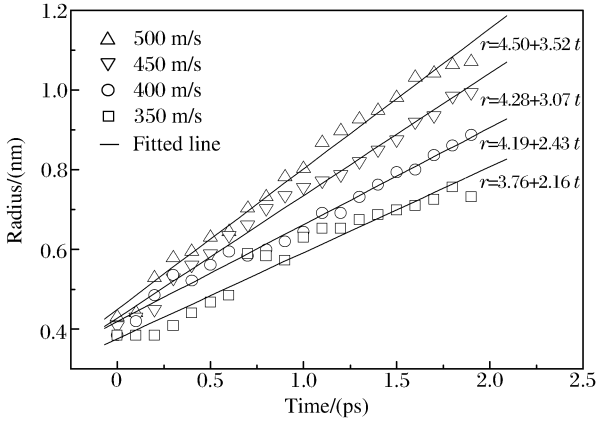


图 5　不同活塞速度时孔洞半径和时间的关系
(每间隔 100 个时间步测量一次孔洞体积(0.1 ps))

Fig. 5　Variation of void radius with time at different piston velocity
(Void volume is measured for every 100 time steps (0.1 ps))

的时间设为零,测量得到的不同加载条件下等效球半径随时间的变化规律如图 5 所示。从图 5 中可以看到,在拉应力作用下,孔洞半径随时间近似呈线性增长,即在一定加载条件下,孔洞半径增长速率近似恒定,但其增长速率则随活塞速度的增加而增加。

4 结 论

用分子动力学方法模拟了单晶铜中的纳米孔洞在〈111〉晶向冲击加载下的演化情况,主要研究拉伸阶段中,孔洞增长伴随的塑性过程。因为在垂直于加载方向的$(1\bar{1}1)$面上的剪切应力为零,fcc 结构中 4 族滑移面只有 3 族被激活。在拉伸应力作用下,孔洞周边区域出现位错成核并向孔洞外运动。由位错间的相互作用所形成的压杆位错锁和向外运动的不全位错首先形成扇型位错环,中间是堆积层错。随着微孔洞的增长,位错环沿〈112〉晶向向外扩张。在分解剪切应力最大的〈112〉方向上,形成跨声速位错,其它方向为亚声速位错。根据描述位错运动的粘声子模型,计算得到的位错衰减常数和实验测量范围接近;由于在不同加载强度下,各晶向的剪切应力不同,位错运动的方向、出现的位置及数目也不同。由于在〈111〉方向加载,从孔洞向四周发射的位错环在空间分布比较均匀,孔洞在增长过程中基本保持球形。在同样加载强度下,孔洞半径增长速度近似恒定。孔洞半径增长的速率随着活塞速度的增加而增加。模拟得到的单晶中纳米孔洞在初始增长时的增长速度及其伴随的塑性现象,对于了解延性材料微观损伤机制有重要意义。

感谢中国工程物理研究院计算机研究所张亚林在并行计算过程中提供的帮助。

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] Carroll M M, Holt A C. Static and Dynamic Pore-Collapse Relations for Ductile Porous Materials [J]. J Appl Phys, 1972, 43: 1626-1636.

[3] Zhou S J, Beazley D M, Lomdahl P S, et al. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Three-Dimensional Ductile Failure [J]. Phys Rev Lett, 1996, 78: 479-482.

[4] Seppala E T, Belak J, Rudd R E. Onset of Void Coalescence during Dynamic Fracture of Ductile Metals [J]. Phys Rev Lett, 2005, 93: 245503(1)-245503(4).

[5] Holian B L, Lomdahl P S. Plasticity Induced by Shock Waves in Nonequilibrium Molecular-Dynamics Simulations [J]. Science, 1998, 280: 2085-2088.

[6] Yamakov V, Saether E, Philips D R, et al. Dynamic Instability in Intergranular Fracture [J]. Phys Rev Lett, 2005, 95: 015502(1)-015502(4).

[7] 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: 161902(1)-161902(3).

[8] Lubarda V A, Schneider M S, Kalantar D H, et al. Void Growth by Dislocation Emission [J]. Acta Mater, 2004, 52: 1397-1408.

[9] Marian J, Knap J, Ortiz M. Nanovoid Cavitation by Dislocation Emission in Aluminum [J]. Phys Rev Lett, 2004, 93: 165503(1)-165503(4).

[10] Rauf G M, Maroudas D. Atomistic Mechanism of Strain Relaxation due to Ductile Void Growth in Ultrathin Films of Face-Centered-Cubic Metals [J]. J Appl Phys, 2005, 97: 113527(1)-113527(7).

[11] Luo J, Zhu W J, Lin L B, et al. Molecular Dynamics Simulation of Void Growth in Single Crystal Copper under Uniaxial Impacting [J]. Acta Phys Sin, 2005, 54: 2791-2798. (in Chinese)
罗 晋, 祝文军, 林理彬, 等. 单晶铜在动态加载下空洞增长的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2005, 54: 2791-2798.

[12] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, et al. Structural Stability and Lattice Defects in Copper: *Ab Initio*, Tight-Binding, and Embedded-Atom Calculations [J]. Phys Rev B, 2001, 63: 224106(1)-224106(15).

[13] Bringa E M, Cazamias J U, Erhart P, et al. Atomistic Shock Hugoniot Simulation of Single-Crystal Copper [J]. J Appl Phys, 2004, 96: 3793-3798.
[14] Wan F R. Radiation Damage of Metals [M]. Beijing: Science Press, 1993: 101-102. (in Chinese)
万发荣. 金属材料的辐照损伤 [M]. 北京: 科学出版社, 1993: 101-102.
[15] Curran D R, Seaman L. Dynamic Failure of Solids [J]. Physical Reports, 1987, 147: 253-388.
[16] Hoover W G. Computational Statistical Mechanics [M]. Netherlands Elsevier: Science Publishers B V, 1991: 140-145.
[17] Zhou S J, Preston D L, Lomdahl P S, et al. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Dislocation Intersection in Copper [J]. Science, 1998, 279: 1525-1527.
[18] Hirth J P, Loyhe J. Theory of Dislocations [M]. New York: Wiley, 1982: 267-275.
[19] Gumbsch P, Gao H J. Dislocations Faster than the Speed of Sound [J]. Science, 1999, 283: 965-968.
[20] Jones O E, Mote J D. Shock-Induced Dynamic Yielding in Copper Single Crystals [J]. J Appl Phys, 1969, 40: 4920-4928.
[21] Mordehai D, Ashkenazy Y, Kelson I. Dynamic Properties of Screw Dislocations in Cu: A Molecular Dynamics Study [J]. Phys Rev B, 2003, 7: 024112(1)-024112(9).
[22] Clarke A S, Jonsson H. Structural Changes Accompanying Densification of Random Hard-Sphere Packings [J]. Phys Rev E, 1991, 47: 3975-3984.

Plasticity Mechanism Associated with Nano-Void Growth under Impact Loading along 〈111〉 Direction in Copper

DENG Xiao-Liang[1,2], ZHU Wen-Jun[1,3], HE Hong-Liang[1],
WU Deng-Xue[2], JING Fu-Qian[1,3]

(1. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
2. *Department of Physics, Sichuan University, Chengdu* 610064, *China*;
3. *Research Center of High Pressure Physics, Sichuan Normal University, Chengdu* 610068, *China*)

Abstract: Evolution of Nano-void (diameter $d \approx 1.3$ nm) in single crystal copper and associated plasticity deformation around the nano-void under impact loading are investigated by means of molecular dynamics (MD) simulation. The results of simulation reveal that in the tensile process there are three of all four {111} family planes to be activated to glide, dislocations are nucleated in the region near the void surface and then move outside on three {111} family planes as the void grows. The velocity of dislocation along 〈112〉 directions with the maximum resolve shear stress can exceed transverse sound velocity. The calculated dislocation damping constant is appropriately consistent with the experiment results. Due to the approximately symmetrical plastic deformation around the void, the shape of the void during growth process is almost spherical. The growth rate of the void radius is observed to be constant under constant shock strength, and the amplitude increases as well as the shock strength increases.

Key words: dislocation; fracture; molecular dynamics; nano-void