DOI: 10.11858/gywlxb.20240786

不同波形加载下 [100] 单晶铝层裂破坏的分子动力学模拟研究

杨向阳[1,2], 吴 楣[1], 祝有麟[2,3], 李俊国[2,3], 张睿智[1,2], 张 建[2,3], 罗国强[2,3]

(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全国重点实验室, 四川 绵阳 621999;
2. 武汉理工大学湖北省先进复合材料技术创新中心, 湖北 武汉 430070;
3. 武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室, 湖北 武汉 430070)

摘要: 采用分子动力学方法模拟了 [100] 单晶铝在等冲量斜波和方波作用下的形变和层裂行为, 分析了加载波形与层裂行为之间的相关性。研究表明, 脉冲形状与热力学路径的协同作用影响了材料层裂。不同加载波形下单晶铝层裂强度的差异并非受缺陷主导的非均匀孔洞形核影响, 而是由不同热力学路径下温升的差异决定。例如: 当最大加载速度为 3.00 km/s 时, 单晶铝均经历均匀层裂, 但斜波加载下铝的层裂强度较方波加载时提升 56.6%。斜波加载会产生逐渐增强的压缩波, 使单晶铝产生相比于冲击加载更轻度的损伤。这一现象随着加载速度的提高而变得更加显著。

关键词: 层裂; 单晶铝; 分子动力学模拟; 斜波加载

中图分类号: O347.1; O521.2 **文献标志码:** A

层裂是指材料在两列拉伸波的作用下产生的动态断裂, 加深对层裂及动态损伤机理的认识有助于设计更有效的防护结构。利用光子多普勒测速仪(photonic Doppler velocimetry, PDV)等测速技术测量自由表面速度历史, 可以判读宏观层裂信号, 结合层裂样品回收表征, 还可以分析外部加载条件(峰值应力、应变速率、波持续时间)[1−3] 和材料微观结构对层裂行为的影响(单晶的取向、多晶的尺寸效应、双相的不均匀性)[4−6]。然而, 由于强冲击下材料的强瞬态、非平衡和多尺度关联性, 传统的层裂信号解读和非原位表征手段难以从底层机制上刻画材料层裂动力学响应的物理图像, 极大地限制了对材料动态断裂特性的深入认识及理论描述。

分子动力学模拟[7−9] 是研究材料动态行为的重要方法, 为揭示层裂的潜在机制提供了一种强有力的工具。研究表明, 材料位错密度增大导致的孔洞表面及其附近的原子重排将促进微孔生长, 并进一步导致塑性流动的发展[10−11]。加载条件的相互依赖性(如冲击强度、应变速率和初始温度)对建立冲击诱导下微观结构与层裂强度之间的关系造成困难[12−13]。随着动态诊断技术与数值模拟方法的发展, 近年来, 研究者们越来越多地从物理机制上关注外部载荷条件与微观结构演化之间的联系。已有学者探索了层裂强度随不同冲击速度变化的波动趋势[14−15], 并且得出结论: 由于局部无序和熔化的出现, 相比于应变率硬化, 温度软化效应在高冲击速度下的材料层裂中起主导作用。

* **收稿日期:** 2024-04-09; **修回日期:** 2024-04-28
基金项目: 国家自然科学基金(51932006); 湖北省技术创新专项重大项目(2019AFA176)
作者简介: 杨向阳(2000—), 男, 硕士研究生, 主要从事单晶层裂的分子动力学模拟研究.
E-mail: 331159@whut.edu.cn
通信作者: 张睿智(1991—), 男, 博士, 助理研究员, 主要从事阻抗梯度飞片设计与制备技术研究.
E-mail: zhangrz027@163.com
张 建(1984—), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 主要从事阻抗梯度飞片设计与制备技术研究.
E-mail: zhangjian178@whut.edu.cn

在研究材料内在结构演化时，加载波多被简化为方波。但是，脉冲形状的不同也可能导致不同的动态过程，如相变、塑性变形、波相互作用等，从而显著影响材料的最终损伤[16–17]。例如，铝（Al）在约 120 GPa、4 500 K 的压力温度下将沿着 Hugoniot 线发生熔化。一旦材料完全熔化，就失去了结构强度。当考虑等熵路径时，在 200 GPa 的压力下 Al 的温度仍可保持在 800 K 以下。在这样的条件下，即使在极高的压力下，材料也会保持固态，表明有可能得到更高的强度。准等熵加载条件下 6061-T6 铝合金的强度测试结果表明，其峰值应力可高达 55 GPa[18]。这些新的强度测量值与 25 GPa 冲击加载实验中获得的强度测量值具有显著的一致性。由此可见，不同加载波形下材料的强度特性差异极大。目前，加载波形对材料层裂强度特性的影响机理研究仍比较匮乏[19–21]，探究加载波形对材料动态损伤影响的内在机理，有助于丰富对层裂破坏机理的认识。

本工作将通过分子动力学模拟方法研究 [100] 单晶 Al 在不同脉冲波形下的冲击响应和层裂行为，探讨脉冲形状对单晶 Al 塑性变形、相变、层裂强度和损伤累积的影响。

1　计算方法

1.1　原子建模与计算

利用开源软件 LAMMPS 进行模拟，使用在先前研究中已讨论过准确性的 EAM 势[22–23] 描述原子的相互作用。模拟体系的尺寸为 60 nm×20 nm×20 nm，包含约 145 万个原子。直角坐标系的 x 轴（冲击方向）与晶体的 [100] 取向一致。x 轴采用自由边界条件，y 轴和 z 轴采用周期性边界条件，以减小边界效应。首先，将该体系在 300 K、0 Pa 下弛豫 50 ps，以达到平衡。冲击压缩则通过移动目标左侧的刚性活塞实现，如图 1(a) 所示。活塞可视为对称碰撞中的目标材料[24]。在模拟中，由于加载持续时间恒定，对于每种脉冲形状，层裂平面的位置相对固定，因此，选择横向切片来研究应力状态和热力学响应。设计了斜波和方波 2 种脉冲波形。对于每种波形，设计 9 种模拟工况，其中：最大速度 v_p 为 1.00～3.00 km/s，斜波的上升和下降时间相同，v_p 相同的斜波和方波加载具有相同的冲量，如图 1(b) 所示。加载完成后移除活塞，避免复杂的波系相互作用。

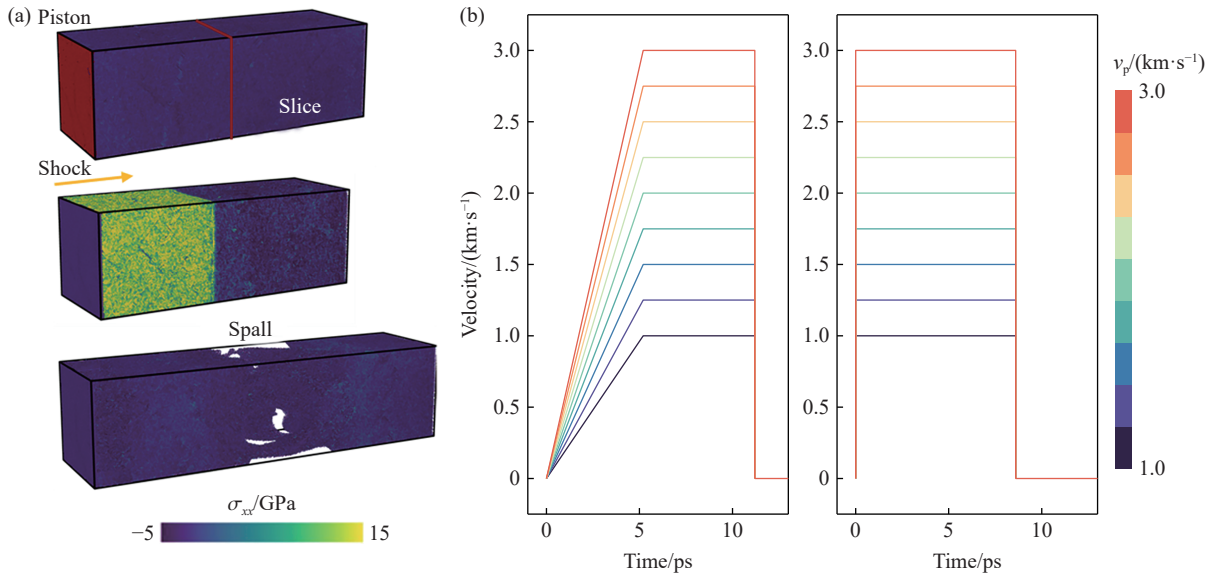


图 1　(a) 活塞法生成层裂示意图，(b) 载荷时程曲线

Fig. 1　(a) Schematic diagram of spallation generation by piston method; (b) loading history curves

1.2　计算结果分析

通过所有原子在 y 轴上的维里应力分量计算拉应力。系统中的压力为

$$p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \tag{1}$$

式中：σ_{xx}、σ_{yy} 和 σ_{zz} 分别是 x、y 和 z 方向的应力。可以注意到，在这种一维应变问题中，不能直接得到波前后非平衡区 x 方向上的热振动速度。考虑到热振动的各向同性，可将其近似为

$$\overline{v}_{i,x}=\frac{1}{2}(\overline{v}_{i,y}+\overline{v}_{i,z}) \tag{2}$$

式中：$\overline{v}_{i,x}$、$\overline{v}_{i,y}$和$\overline{v}_{i,z}$分别为 x、y 和 z 方向上的热振动速度。此外，在不损失精度的情况下排除冲击方向上的速度，则温度的计算公式为

$$T=\frac{1}{2Nk_{\mathrm{B}}}\sum_{i=1}^{N}m_i\left(v_{i,y}^2+v_{i,z}^2\right) \tag{3}$$

式中：N 为原子总数，k_{B} 为波尔兹曼常数，m_i 为原子质量，$v_{i,y}$ 和 $v_{i,z}$ 为粒子速度分量。采用整体法（将此过程中最大局部拉伸应力视为层裂强度[25]）和自由面法[24]（通过声学方法进行表面测量从而估算层裂强度）分别获取层裂强度 σ_{sp}。自由面法的公式为

$$\sigma_{\mathrm{sp}}=\frac{1}{2}\rho\Delta u C_{\mathrm{b}} \tag{4}$$

式中：ρ为初始密度，Δu 为回撤速度，C_{b}为体声速。

沿 x 轴将该系统均匀地分为 38 个切片，原子应力、原子位移、粒子速度、体积和温度等物理量均取每个切片上的平均值。通过可视化工具 OVITO 对原子配置的快照进行可视化处理，并实现集成模块，以识别空隙或损伤累积。此外，还进行了径向分布函数（radial distribution function, RDF）分析和共邻分析（common neighbor analysis, CNA），以深入探究压缩和层裂过程中系统的结构演化。

2　结果与讨论

2.1　不同波形加载下的层裂强度和层裂温度分析

模拟结果显示，本研究中的所有工况均出现层裂。表 1 记录了层裂时刻的层裂面温度 T_{sp} 和所在

表 1　不同工况下的层裂强度、应变速率和层裂温度

Table 1　Spall strength, strain rate, and spall temperature of different cases

Group	v_{p}/(km·s^{-1})	σ_{sp}/GPa		$\dot{\varepsilon}$/(10^9 s^{-1})	T_{sp}/K
		From bulk	From surface		
Ramp wave	1.00	9.748	8.536	1.864	223.82
	1.25	8.814	7.528	2.350	272.24
	1.50	9.847	7.851	2.983	224.95
	1.75	9.941	8.678	3.282	227.39
	2.00	10.084	8.233	3.664	230.75
	2.25	10.358	7.546	4.123	233.08
	2.50	10.321	7.077	4.556	236.06
	2.75	10.308	6.764	4.855	236.80
	3.00	10.261	6.325	5.284	239.73
Square wave	1.00	8.180	7.725	2.287	333.47
	1.25	8.228	7.151	2.477	313.84
	1.50	9.511	8.646	2.670	291.85
	1.75	9.227	8.282	3.263	350.29
	2.00	8.689	7.578	3.611	404.72
	2.25	7.977	7.039	4.055	494.94
	2.50	7.293	6.809	4.461	561.94
	2.75	6.900	6.518	4.901	579.97
	3.00	6.551	6.135	5.312	594.51

切片沿冲击方向的瞬时应变率 $\dot{\varepsilon}$。图 2 和图 3 分别显示了采用整体法和自由面法获得的层裂强度随 v_p 的变化。在斜波加载组中，层裂强度明显更高。当 v_p>2.00 km/s 时，σ_{sp} 保持在 10 GPa 以上的相对稳定值；当 v_p=1.25 km/s 时，σ_{sp} 仅为 8.814 GPa。

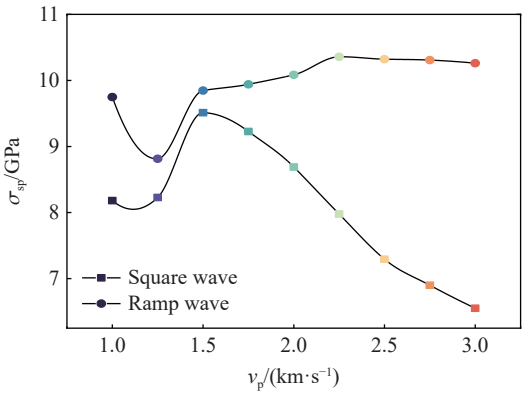


图 2　层裂强度(整体法)对最大速度和脉冲形状的依赖性

Fig. 2　Dependence of spall strength (from bulk) on the maximum velocity and pulse shape

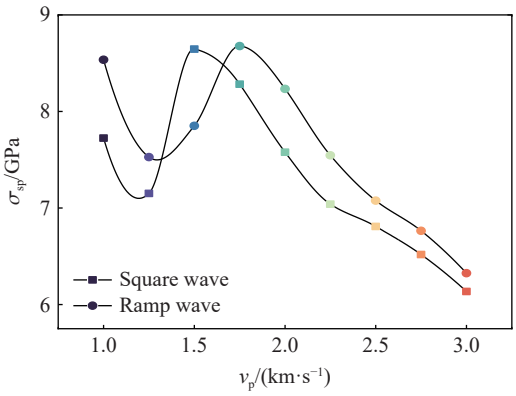


图 3　层裂强度(自由面法)对最大速度和脉冲形状的依赖性

Fig. 3　Dependence of spall strength (from surface) on the maximum velocity and pulse shape

图 4 对比了 2 种方法所得的层裂强度。对于 2 种波形，整体法得到的层裂强度均显著高于表面法获得的层裂强度。从理论上看，自由面法得到的层裂强度反映引起孔洞所需的应力，而由整体法得到的层裂强度则反映材料可承受的最大拉伸应力。此外，在自由面法中，根据声速近似，用初始体声速(C_{b0} = 5 840 m/s)和密度(ρ = 2.7 g/cm^3)代替平均值，这种替代可能导致对层裂强度的误判。这些因素共同导致了 2 种层裂强度的差异。鉴于脉冲形状引起的应力历程复杂，本研究将整体法获得的层裂强度作为“实际”层裂强度。

总结并比较了发生层裂时所选切片的瞬时拉伸应变率$\dot{\varepsilon}$与层裂温度 T_{sp} 之间的关系，如图 5 所示。除了 v_p = 1.25 km/s 的工况外，其他工况下层裂温度随应变率的升高呈上升趋势。其中，斜波加载和方波加载表现出几乎相同的瞬时拉伸应变率。但是，在方波加载下，观察到明显的温度升高。

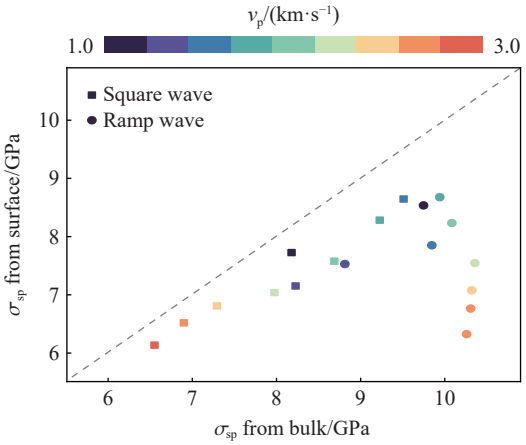


图 4　2 种方法得到的层裂强度的对比

Fig. 4　Comparison of spall strengths obtained by two methods

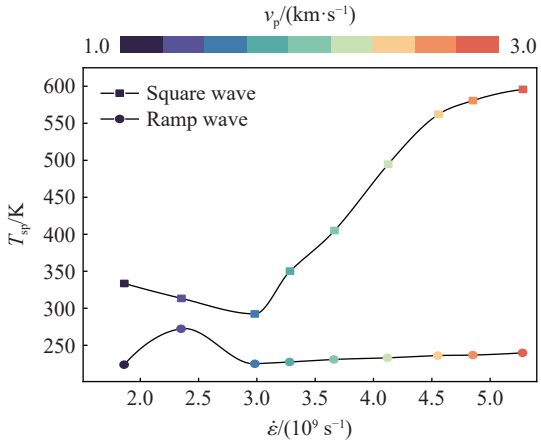


图 5　外加拉伸应变率与层裂温度及脉冲形状的关系

Fig. 5　Dependency of applied tensile strain rate on spall temperature and pulse shape

层裂强度是材料最大动态抗拉强度的量度。大量实验研究表明，韧性金属材料的层裂受微观结构特征、外加拉伸应变率和温度效应的影响。Al 的应变率与层裂强度的关系如图 6 所示，其中包含实验结果[26–31]和本研究的分子动力学模拟结果，由此得到经验公式

$$\sigma_{sp} = 0.4 + 3.75\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{10^8}\right)^{0.2} \tag{5}$$

式中：σ_{sp}和$\dot{\varepsilon}$的单位分别为 GPa 和 s^{-1}。式 (5) 大致描述了 σ_{sp} 与$\dot{\varepsilon}$之间在较宽范围内的关系，表明 Al 存在显著的应变率硬化效应，接近第一性原理得到的理想强度。由于本研究中应变率处于相同的数量级（10^9 s^{-1}），层裂强度与应变率之间未表现出明显的正相关关系（图 6），所以在确定系统的层裂强度时，应变率不是唯一的影响因素，但是它仍然有可能通过影响拉伸卸载过程中的温度变化速率来影响强度[26]。

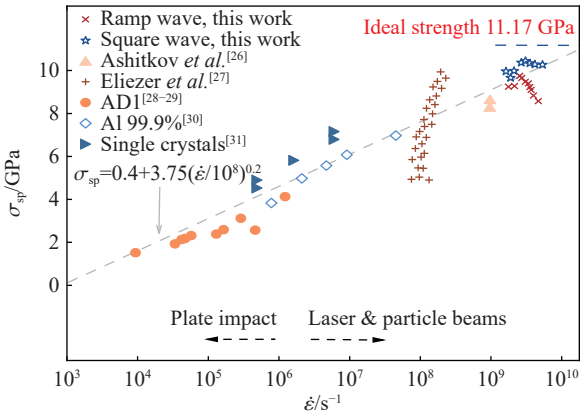


图 6　实验[26–31] 和模拟得到的层裂强度随应变率的变化

Fig. 6　Variation of the spall strength with strain rate in experiments[26–31] and this simulation

在绝热冲击压缩和随后的层裂过程中，一部分塑性功由于不能与环境交换而转化为热能。图 7 显示了层裂强度随层裂面温度的变化。可以看出，层裂强度与层裂温度一般呈负相关关系，大部分数据可用线性函数拟合，但也有部分数据偏离拟合线。拟合公式为

$$\sigma_{sp} = -9.867\times10^{-3}T_{sp} + 12.324 \tag{6}$$

式中：σ_{sp}和 T_{sp} 的单位分别为 GPa 和 K。除 v_p = 1.25 km/s 以外，其余斜波组均表现出较高的层裂强度和较低的层裂温度。对于 v_p = 1.25 km/s 这一特例，可以解释为：此时，材料以位错滑移变形为主，由非均匀孔洞形核机制引入的微结构将促使后续过程中孔洞在滑移面相交处大量产生，从而降低层裂强度。与无缺陷结构相比，该机制需要更多的塑性功用于孔洞形核，结构因大量的局部热耗散而软化。

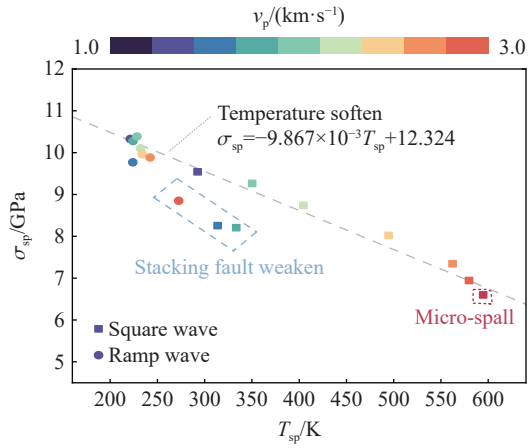


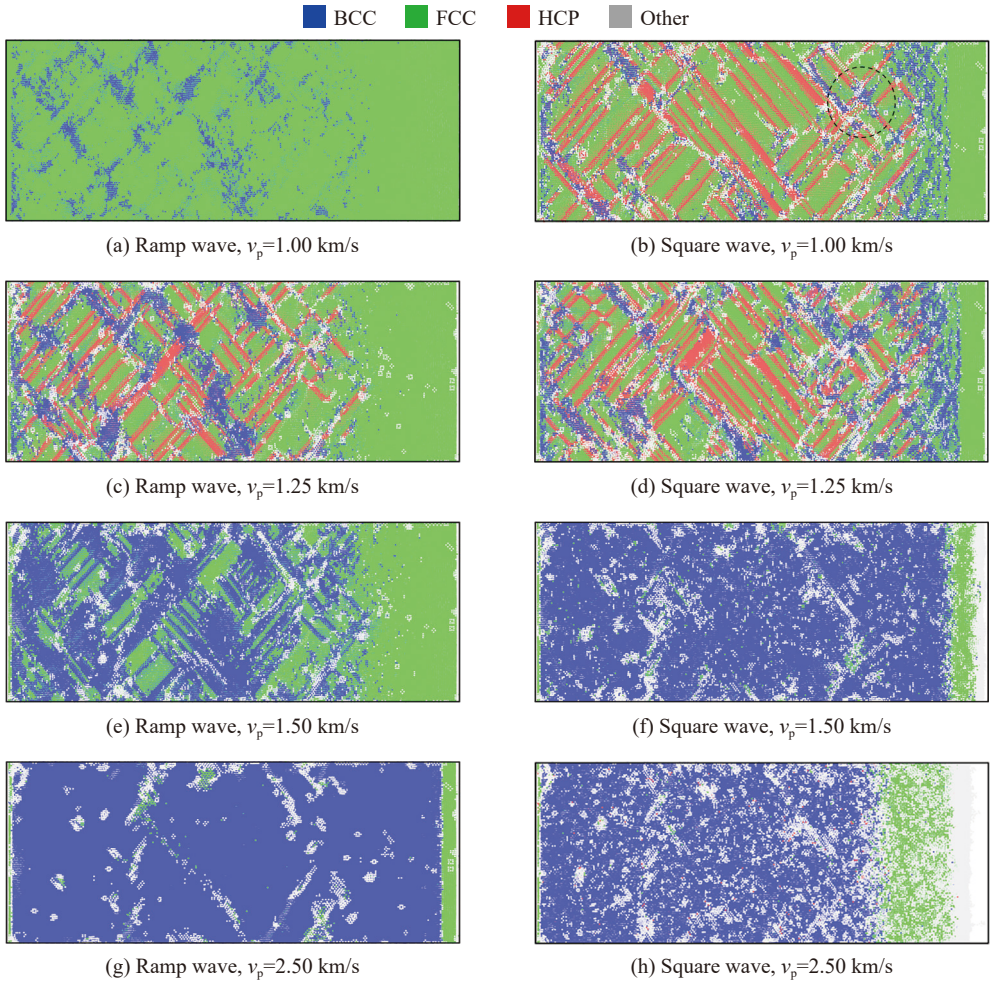
图 7　层裂强度与层裂面温度的关系

Fig. 7　Relationship between spall strength and temperature on the spall plane

2.2　不同波形加载下的层裂机理

图 8 描绘了当应力波接触自由表面时系统局部的原子构型。基于 CNA 方法鉴定的结构类型对原子进行颜色编辑，其中：绿色代表面心立方（face-centered cubic, FCC）原子，蓝色代表体心立方（body-centered cubic, BCC）原子，红色表示密排六方（hexagonal close-packed, HCP）原子。在冲击载荷下，FCC 结构与 BCC 结构之间的相互转变通过 Bain 路径发生。值得注意的是，模拟中引入的压力在 10～50 GPa 之间，远低于第一性原理计算得到的 Al 在室温下的 Bain 转变压力 200 GPa。本研究所识别的 FCC-BCC 相变仅由 FCC 结构的单轴压缩驱动，而不像经典相变过程那样由 2 种相结构之间的体积自由能差驱动[23]。

在 1.00 km/s 的代表速度下，方波组的大多数 BCC 原子出现在冲击波前沿附近，随着冲击波的传播，通过塑性变形形成层错（由于原子层堆垛序列的滑移辅助变化而形成 HCP 晶格），表明位错塑性占主导地位；一小部分 BCC 原子也出现在堆垛层错的交叉处（图 8 中用虚线圈出）。当冲击波速度为 1.25 km/s 时，斜波组中出现位错和堆垛层错。当速度超过 1.50 km/s 时，层错结构显著减少，冲击波速度的进一步增大导致系统中几乎仅存在 FCC、BCC 和无序原子，致使整个样品转变为 BCC 相。斜波组保持相对致密的 BCC 结构，而方波组表现出更无序的结构。随着冲击波速度的增加，无序原子的比例也有增加趋势。



(a) Ramp wave, v_p=1.00 km/s　(b) Square wave, v_p=1.00 km/s

(c) Ramp wave, v_p=1.25 km/s　(d) Square wave, v_p=1.25 km/s

(e) Ramp wave, v_p=1.50 km/s　(f) Square wave, v_p=1.50 km/s

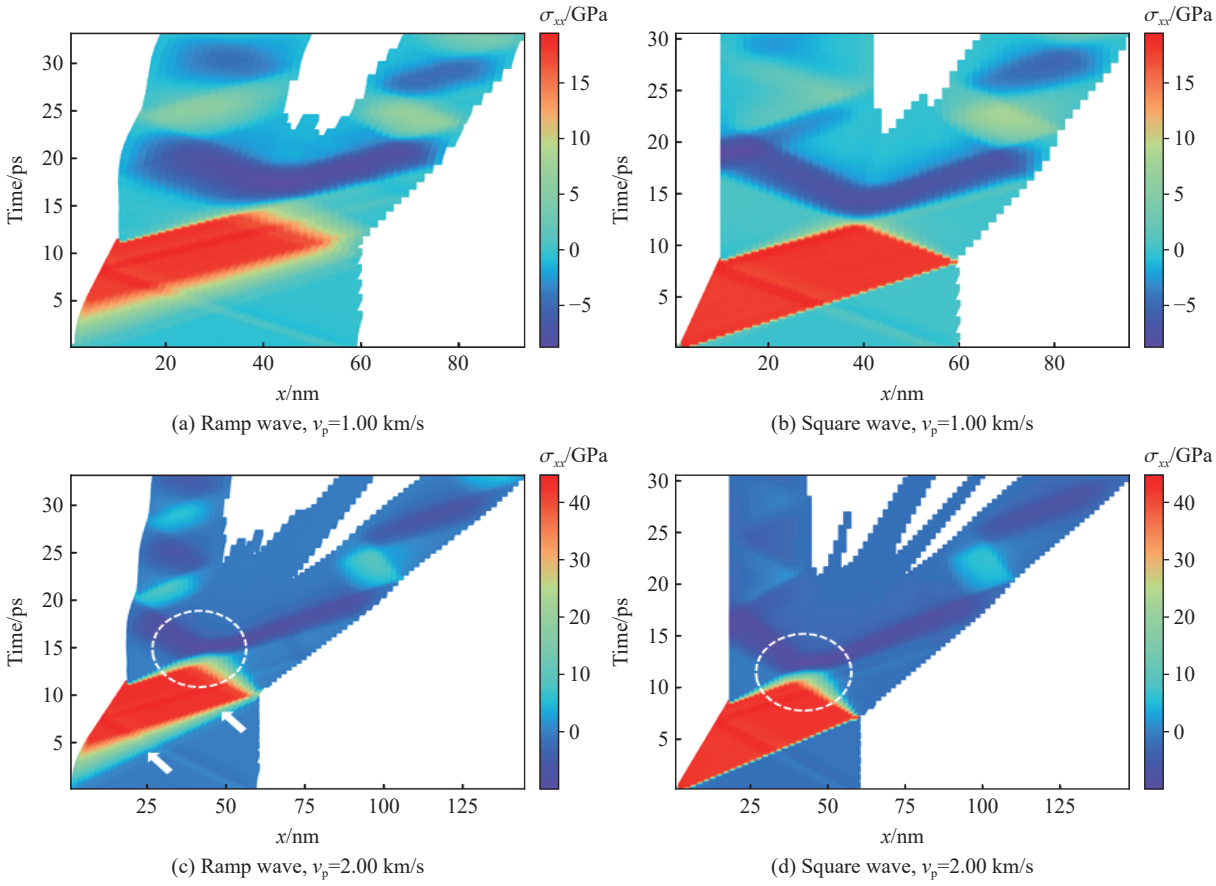
(g) Ramp wave, v_p=2.50 km/s　(h) Square wave, v_p=2.50 km/s

图 8　应力波抵达自由表面时系统的原子构型

Fig. 8　Atomic configuration of the system when the stress wave reaches the free surface

组织演化过程与应力历史高度相关。从图 9 中 v_p 为 1.00 和 2.00 km/s 时方波和斜波加载下应力 σ_{xx} 的位置-时间(x-t)图可以看出波形特征和振荡。当 v_p = 1.00 km/s 时，系统损伤以单点损伤为主；当 v_p = 2.00 km/s 时，由于温度升高，层裂表现为多点损伤。斜波加载云图显示了波在前后面拖曳的过程，如图 9(c) 中白色箭头所示，压缩波逐渐收敛为冲击波，形成类似于方波加载的应力阶跃，直接导致拉伸期间的最大拉伸应变率与方波加载时一致，如图 10 中所选切片的应变率-时间曲线所示。加载之前，在已知会发生层裂的样本中心固定一组切片原子，统计该组原子沿原子冲击方向的最大和最小尺寸随时间的变化，得到应力-应变曲线，对其关于时间求导，得到应变率-时间曲线。在飞片卸载直至两列稀疏波完全交汇之前的这段时间，存在观测模型内只被单侧稀疏波影响的情况，因此，应变率曲线呈现阶梯状。由于波的相互作用，斜波和方波加载下的最大拉应力和层裂强度都出现在峰值应变率处。图 10 中的箭头表示达到层裂强度的时刻。

在方波和斜波冲击压缩过程中，原子构型在缺陷结构上显示出显著的差异，如图 8 所示，这对拉伸阶段缺陷的后续演变具有重大影响[4, 32]。图 11 显示了 v_p 为 1.25 和 1.50 km/s 时斜波组的典型缺陷结构，其中原子通过中心对称参数(centrosymmetry parameters)进行着色。当 v_p = 1.25 km/s 时，整个系统在压缩阶段呈现密集的堆垛层错结构。在初始拉伸阶段，如图 11(a) 所示，可以观察到明显的缺陷平面。孔洞优先形核位置(图 11(b) 和图 11(c) 中的虚线圈)集中出现在堆垛层错的交叉处，这是因为交叉点或缺陷处往往受到应力集中[13, 23]。在 v_p = 1.50 km/s 的压缩阶段，形成 BCC 结构，这种结构在拉伸过程中转变为几乎无缺陷的结构，随后形成的孔洞源于无序区的均匀形核。

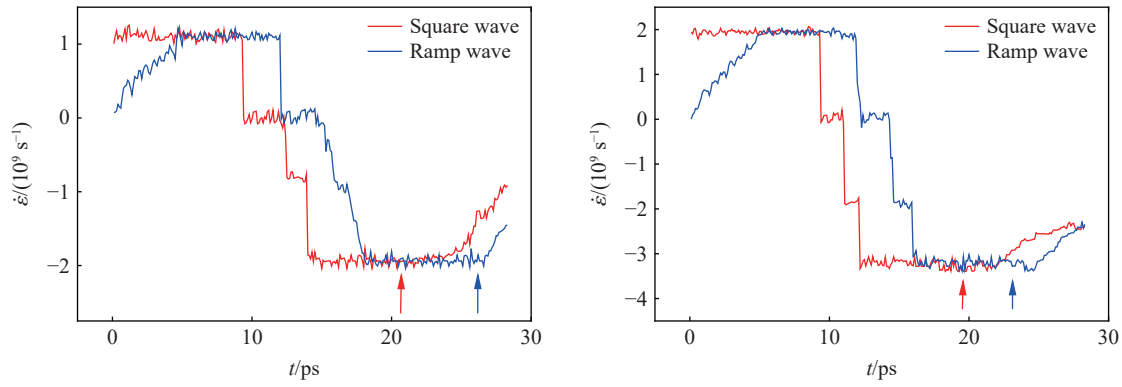


(a) Ramp wave, v_p=1.00 km/s　(b) Square wave, v_p=1.00 km/s

(c) Ramp wave, v_p=2.00 km/s　(d) Square wave, v_p=2.00 km/s

图 9　v_p 为 1.00 和 2.00 km/s 时方波和斜波组中 σ_{xx} 的位置-时间(x-t)图

Fig. 9　Position of σ_{xx} versus time (x-t) diagrams when v_p is 1.00 and 2.00 km/s under square wave and ramp wave loading

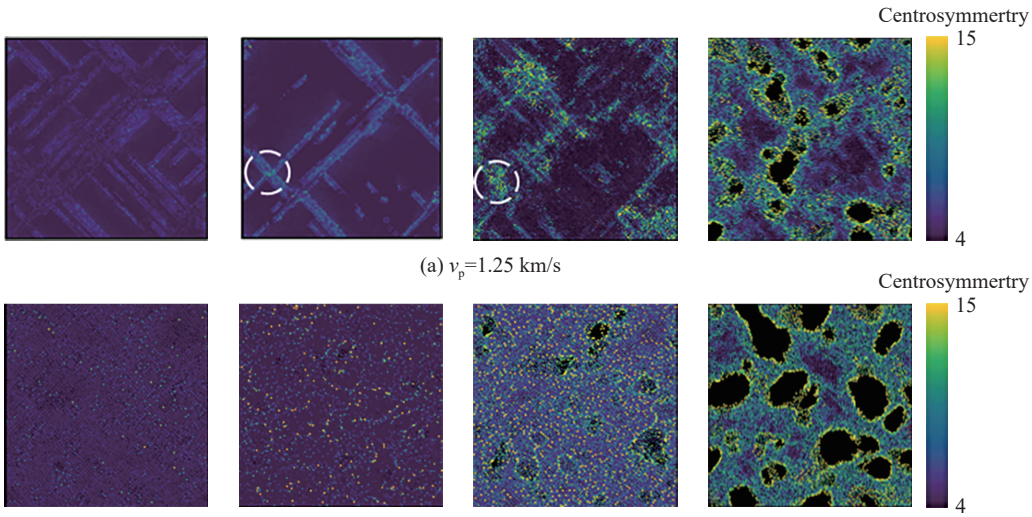


(a) v_p=1.00 km/s　(b) v_p=2.00 km/s

图 10　选定切片原子的应变率-时间曲线

Fig. 10　Time history of strain rate for selected slice atoms

图 12 给出了单晶 Al 损伤累积的统计历程，包括孔洞的数量和损伤比(损伤比为孔洞体积与系统体积之比)。这些数据可以有效地描述层裂过程中孔洞的形核和合并过程。由于强烈的热软化，随着 v_p 的升高，孔洞的峰值数量和极限损伤比均增加。经过相同的时间间隔后，方波组表现出比斜波组更严重的损伤，可能是后者的孔洞成核延迟导致的。对于孔洞数量：在斜波组和方波组中，在 $v_p \geqslant 1.50$ km/s 处观察到尖锐的峰，而当 $v_p < 1.50$ km/s 时，峰较平滑。值得注意的是，演化时间由峰宽表示，随着 v_p 的升高，峰宽缩短，并且仅在斜波组中 v_p = 1.25 km/s 时非均匀孔洞成核导致临界孔洞尺寸增大而出现明显的例外(图 12 中用 “A” 标记)。

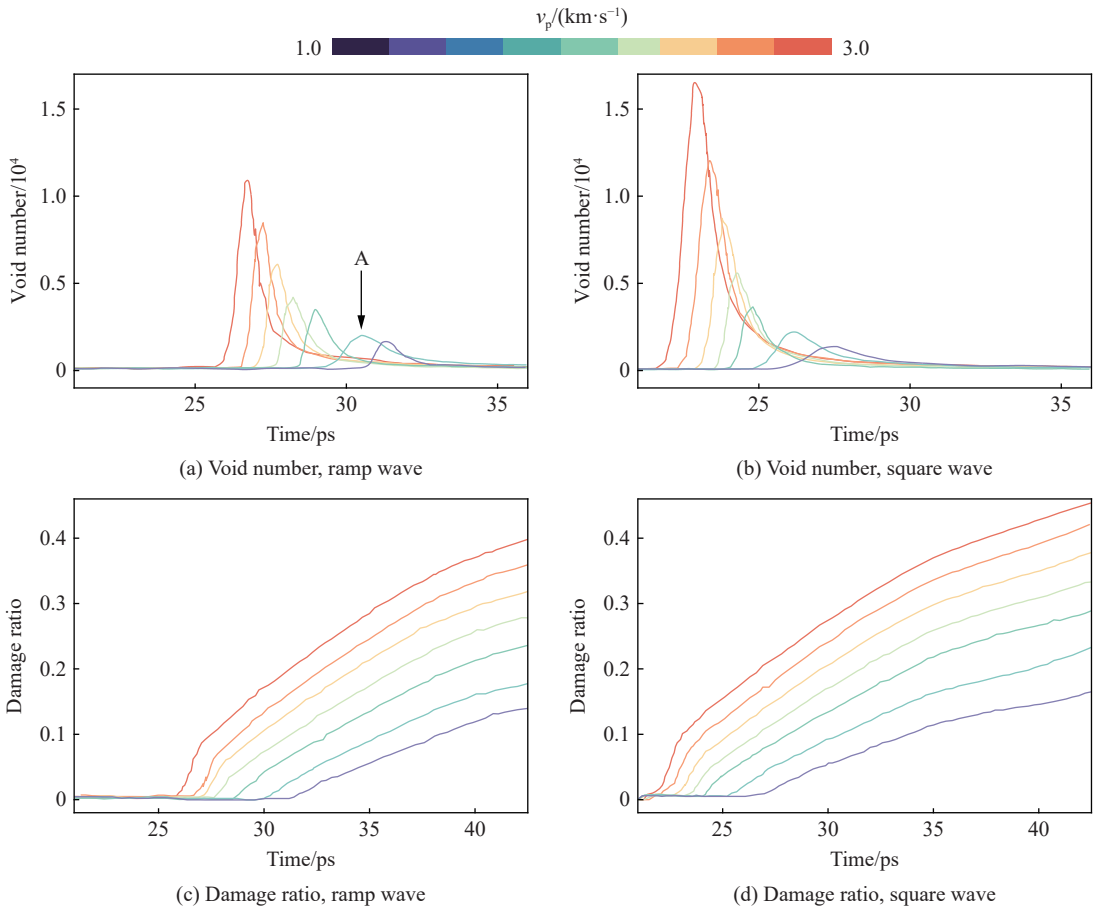


(a) v_p=1.25 km/s

(b) v_p=1.50 km/s

图 11　v_p 为 1.25 和 1.50 km/s 时斜波组层裂面上的缺陷结构随时间的演化

Fig. 11　Time evolution of corresponding defect structure on the spall plane when v_p is 1.25 and 1.50 km/s under ramp wave loading



(a) Void number, ramp wave

(b) Void number, square wave

(c) Damage ratio, ramp wave

(d) Damage ratio, square wave

图 12　斜波和方波加载下空洞数量和损伤比的演变历程

Fig. 12　Evolution history of void number and damage ratio under square wave and ramp wave loading

上述讨论表明，虽然不同波形下的层裂受滑移系主导的非均匀形核层裂和无缺陷结构引起的均匀层裂 2 种机制的影响，但是影响层裂的主要因素是波相互作用引起的压缩温升和拉伸应变率。在斜波

加载且应力缓慢增大的情况下，当 v_p = 1.25 km/s 时，该系统只经历由堆垛层错主导的非均匀层裂；对于更高的 v_p，系统因单轴压缩而转变为 BCC 结构，经历均匀层裂。斜波载荷下，因为热耗散低，所以系统在较宽的 v_p 范围内保持较高的层裂强度。然而，孔洞的演化历程表明，这种加载方式仍然会产生由于波的强相互作用而引起的高应变率所导致的快速损伤。方波加载下，当 v_p<1.50 km/s 时，层裂面发生非均匀层裂；在更高的 v_p 下，剧烈的压缩温升导致系统快速软化和相对较低的 σ_{sp}。此外，强烈的稀疏波相互作用引起的高应变率会导致方波组的损伤加剧。

3　结　论

利用分子动力学模拟，计算并比较了 [100] 单晶 Al 在斜波和方波加载下的冲击诱导变形、结构转变和层裂行为。

(1) 单晶 Al 在压缩阶段的结构演化取决于脉冲形状和最大速度。堆垛层错相交主导的非均匀形核层裂和无缺陷结构的均匀层裂是主要层裂机制。斜波加载下，当 v_p = 1.25 km/s 时，系统只经历由堆垛层错相交主导的非均匀层裂，导致其层裂强度异于斜波组在其他最大加载速度下所得的层裂强度。

(2) 斜波加载通过产生逐渐增强的压缩波和轻微的温度软化，在较宽的范围内获得了明显更高的层裂强度；相反，方波载荷引起的温度剧烈升高会使层裂强度显著降低。当 v_p 在 1.00～3.00 km/s 范围内时，随着 v_p 的增大，层裂强度的差异增大，并且在 v_p = 3.00 km/s 时斜波组的层裂强度较方波组提升 56.6%。

(3) 方波加载下层裂损伤受应变硬化和温度软化影响。斜波加载的温升低，并且由于传播过程中斜波因尾波追赶而逐渐转化为冲击波，所产生的应变率与同样最大加载速度下方波加载的情况接近，导致斜波组中的损伤数较方波组少，但孔洞合并得更快。

参考文献：

[1] LI C, LI B, HUANG J Y, et al. Spall damage of a mild carbon steel: effects of peak stress, strain rate and pulse duration [J]. Materials Science and Engineering: A, 2016, 660: 139–147.

[2] LI C, YANG K, TANG X C, et al. Spall strength of a mild carbon steel: effects of tensile stress history and shock-induced microstructure [J]. Materials Science and Engineering: A, 2019, 754: 461–469.

[3] NGUYEN T, LUSCHER D J, WILKERSON J W. A physics-based model and simple scaling law to predict the pressure dependence of single crystal spall strength [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2020, 137: 103875.

[4] LI C, YANG K, GAO Y H, et al. Dislocation-dominated void nucleation in shock-spalled single crystal copper: mechanism and anisotropy [J]. International Journal of Plasticity, 2022, 155: 103331.

[5] REMINGTON T P, HAHN E N, ZHAO S, et al. Spall strength dependence on grain size and strain rate in tantalum [J]. Acta Materialia, 2018, 158: 313–329.

[6] PANG B, CASE S, JONES I P, et al. The defect evolution in shock loaded tantalum single crystals [J]. Acta Materialia, 2018, 148: 482–491.

[7] HAHN E N, FENSIN S J, GERMANN T C, et al. Orientation dependent spall strength of tantalum single crystals [J]. Acta Materialia, 2018, 159: 241–248.

[8] DONGARE A M, LAMATTINA B, RAJENDRAN A M. Atomic scale studies of spall behavior in single crystal Cu [J]. Procedia Engineering, 2011, 10: 3636–3641.

[9] MACKENCHERY K, VALISETTY R R, NAMBURU R R, et al. Dislocation evolution and peak spall strengths in single crystal and nanocrystalline Cu [J]. Journal of Applied Physics, 2016, 119(4): 044301.

[10] MA K, CHEN J, DONGARE A M. Role of pre-existing dislocations on the shock compression and spall behavior in single-crystal copper at atomic scales [J]. Journal of Applied Physics, 2021, 129(17): 175901.

[11] WANG J, WANG F, ZENG X G, et al. Unraveling the plasticity performance and melting in single crystal tantalum damaged

by shock compression [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2022, 276: 108921.

[12] KRASNIKOV V S, MAYER A E. Plasticity driven growth of nanovoids and strength of aluminum at high rate tension: molecular dynamics simulations and continuum modeling [J]. International Journal of Plasticity, 2015, 74: 75–91.

[13] ZHOU T T, HE A M, WANG P, et al. Spall damage in single crystal Al with helium bubbles under decaying shock loading via molecular dynamics study [J]. Computational Materials Science, 2019, 162: 255–267.

[14] TANG F, JIAN Z Y, XIAO S F, et al. Molecular dynamics simulation of cylindrically converging shock response in single crystal Cu [J]. Computational Materials Science, 2020, 183: 109845.

[15] XIONG Q L, KITAMURA T, LI Z H. Cylindrical voids induced deformation response of single crystal coppers during low-speed shock compressions: a molecular dynamics study [J]. Mechanics of Materials, 2019, 138: 103167.

[16] TIAN X, CUI J Z, MA K P, et al. Shock-induced plasticity and damage in single-crystalline Cu at elevated temperatures by molecular dynamics simulations [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2020, 158: 120013.

[17] LIAO Y, XIANG M Z, ZENG X G, et al. Molecular dynamics studies of the roles of microstructure and thermal effects in spallation of aluminum [J]. Mechanics of Materials, 2015, 84: 12–27.

[18] HAWKINS M C, THOMAS S A, FENSIN S J, et al. Spall and subsequent recompaction of copper under shock loading [J]. Journal of Applied Physics, 2020, 128(4): 045901.

[19] ZHU Y L, HU J N, WEI Q Q, et al. Enhanced spall strength of single crystal aluminum by temperature rise mitigation and structural phase transition under shock pulse [J]. Mechanics of Materials, 2023, 186: 104809.

[20] 黄海军, 沈强, 罗国强, 等. 利用多层阻抗梯度飞片产生准等熵压缩的理论解析 [J]. 物理学报, 2007, 56(3): 1538–1542.
HUANG H J, SHEN Q, LUO G Q, et al. Theoritical analysis of quasi-isentropic compression via flier-plate with grade wave impadence [J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(3): 1538–1542.

[21] ZHU Y L, HU J N, HUANG S L, et al. Molecular dynamics simulation on spallation of [111] Cu/Ni nano-multilayers: voids evolution under different shock pulse duration [J]. Computational Materials Science, 2022, 202: 110923.

[22] ZHAKHOVSKII V V, INOGAMOV N A, PETROV Y V, et al. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials [J]. Applied Surface Science, 2009, 255(24): 9592–9596.

[23] JIANG D D, SHAO J L, WU B, et al. Sudden change of spall strength induced by shock defects based on atomistic simulation of single crystal aluminum [J]. Scripta Materialia, 2022, 210: 114474.

[24] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Atomistic simulations of shock-induced transformations and their orientation dependence in bcc Fe single crystals [J]. Physical Review B, 2005, 72(6): 064120.

[25] SRINIVASAN S G, BASKES M I, WAGNER G J. Atomistic simulations of shock induced microstructural evolution and spallation in single crystal nickel [J]. Journal of Applied Physics, 2007, 101(4): 043504.

[26] ASHITKOV S I, AGRANAT M B, KANEL' G I, et al. Behavior of aluminum near an ultimate theoretical strength in experiments with femtosecond laser pulses [J]. JETP Letters, 2010, 92(8): 516–520.

[27] ELIEZER S, MOSHE E, ELIEZER D, et al. Laser-induced tension to measure the ultimate strength of metals related to the equation of state [J]. Laser and Particle Beams, 2002, 20(1): 87–92.

[28] GARKUSHIN G V, KANEL G I, RAZORENOV S V, et al. Resistance to deformation and fracture of aluminum AD1 under shock-wave loading at temperatures of 20 and 600 ℃ [J]. Physics of The Solid State, 2010, 52(11): 2369–2375.

[29] KANEL G I, RAZORENOV S V, GRADY D E, et al. Spall fracture properties of aluminum and magnesium at high temperatures [J]. Journal of Applied Physics, 1996, 79(11): 8310–8317.

[30] RAZORENOV S V, KANEL G I, FORTOV V E, et al. Submicrosecond strength of aluminum and alloy AMg6M at normal and elevated temperatures [J]. Fizika Metallov Ⅰ Metallovedenie, 2003, 95(1): 91–96.

[31] KANEL G I, RAZORENOV S V, SINGER J, et al. Dynamic yield and tensile strength of aluminum single crystals at temperatures up to the melting point [J]. Journal of Applied Physics, 2001, 90(1): 136–143.

[32] STRACHAN A, ÇAĞIN T, GODDARD Ⅲ W A. Critical behavior in spallation failure of metals [J]. Physical Review B, 2001, 63(6): 060103.

Molecular Dynamics Simulation Study on Spallation Failure of [100] Single Crystal Aluminum under Different Waveform Loadings

YANG Xiangyang[1,2], WU Dun[1], ZHU Youlin[2,3], LI Junguo[2,3], ZHANG Ruizhi[1,2], ZHANG Jian[2,3], LUO Guoqiang[2,3]

(1. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics*, *Institute of Fluid Physics*, *Chinese Academy of Engineering Physics*, *Mianyang* 621999, *Sichuan*, *China*;
2. *Hubei Technology Innovation Center for Advanced Composites*, *Wuhan University of Technology*, *Wuhan* 430070, *Hubei*, *China*;
3. *State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing*, *Wuhan University of Technology*, *Wuhan* 430070, *Hubei*, *China*)

Abstract: In this study, molecular dynamics method was used to simulate the deformation and spallation behavior of [100] single crystal aluminum under the action of equivalent ramp waves and square waves. Accordingly, the correlation between loading waveform and spallation behavior was analyzed. The results showed that the synergistic effect of the pulse shape transition and the thermodynamic path affected the material spallation. The nucleation of non-uniform holes dominated by defects was not the decisive factor affecting the spallation strength of materials. The difference of spallation characteristics of materials under different loading waveforms was mainly determined by the difference of temperature rise under different thermodynamic paths, which led to uniform spallation at maximum velocity of 3.00 km/s, but the spall strength of ramp wave group was 56.6% higher than that of square wave group. Due to the gradual compression and slight temperature softening effect, the ramp wave loading made the material presented milder damage than the impact loading, which became more significant with the increase of loading speed.

Keywords: spallation; single crystal aluminum; molecular dynamics simulation; ramp wave loading