

冲击加载下纯钛微观塑性变形的分子动力学模拟

陈亚洲¹ 周留成¹ 何卫锋¹ 罗思海¹ 焦阳¹ 庞澄清² 刘鹏²

¹空军工程大学等离子体重点实验室, 陕西 西安 710038

²中国人民解放军 94106 部队, 陕西 西安 710038

摘要 激光冲击强化利用激光冲击波力学效应可提高金属材料力学性能, 现有实验手段难以测量波后动态物理参量、局部动态力学量以及微观组织动态运动过程。采用分子动力学方法, 在 300 K 初始温度下对纯钛进行冲击模拟, 观察到冲击加载下冲击波在纯钛中传播的动态双波结构, 得到了加载过程中的力学量动态变化以及力学作用下孪晶的动态生长过程。塑性变形过程中, 由于位错的塞积和释放, 正应力上升的同时剪切力和流变应力不断下降, 形成平行孪晶栅。在受冲击表面观察到了极薄的非晶层, 其形成与超高应变率塑性变形和动态再结晶相关, 且孪晶和非晶层结构均与透射电子显微镜结果吻合较好。

关键词 激光光学; 塑性变形; 分子动力学; 冲击; 纯钛

中图分类号 TN249

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201643.0802014

Molecular Dynamics Simulation of Plastic Deformation of Pure Titanium Under Shock Loading

Chen Yazhou¹ Zhou Liucheng¹ He Weifeng¹ Luo Sihai¹

Jiao Yang¹ Pang Chengqing² Liu Peng²

¹Key Laboratory of Plasma, Air Force Engineering University, Xi'an, Shaanxi 710038, China

²Troops 94106 of the Chinese People's Liberation Army, Xi'an, Shaanxi 710038, China

Abstract Laser shock peening utilizes the mechanical effect of shockwave to improve the mechanical properties of metal materials, however, it is very difficult to measure the dynamic physical parameters after shockwave, the local dynamic mechanical parameters, and the development of microstructure with current means of experiment. The molecular dynamics method is employed to conduct the shock simulation in pure titanium at a starting temperature of 300 K, the dynamic dual-wave structure feature of the shockwave in pure titanium under the shock loading is observed, and the change of the mechanical parameters as well as the dynamic growing process of twin phase under shock loading are obtained. During the plastic deformation, the stoppage and release of dislocation make the normal stress rise while the shear stress and von Mises stress continue to drop, and the parallel twin gratings are formed. A layer of amorphous structure is observed on the surface subject to shock loading, and its formation is related to ultrahigh strain rate plastic deformation and dynamic recrystallization behavior. Both the twin structure and the amorphous structure coincide with the results obtained by transmission electron microscopy.

Key words laser optics; plastic deformation; molecular dynamics; shock; pure titanium

OCIS codes 140.3590; 160.3900; 350.3390

1 引言

微观组织响应等冲击加载下的材料动力学行为一直是冲击波物理研究的前沿热点问题^[1-2]。激光冲击强化(LSP)是一种金属材料表面强化方法, 利用纳秒脉冲高能量激光诱导的冲击波作用于金属材料表面, 产

收稿日期: 2016-03-10; 收到修改稿日期: 2016-04-11

基金项目: 国家 973 计划(2015CB057400)、国家自然科学基金(51405507, 51505496)

作者简介: 陈亚洲(1991—), 男, 硕士研究生, 主要从事激光冲击强化技术及其应用等方面的研究。

E-mail: 164369979@qq.com

生超高应变率塑性变形,诱导残余应力和微观组织变化,有效提高构件的力学性能^[3-5]。

钛可与铁、铝、钒等其他元素熔为合金,形成高强度的轻合金,因此广泛用于航天、军事、汽车、医学等领域^[6]。目前,对于钛及钛合金的激光冲击加载研究多集中于其性能和应用^[7-8],微观组织演化方面的研究较为缺乏。现有研究多利用有限元方法分析材料残余应力场分布及冲击波的宏观传播特性,Amarchintal 等^[9]、Ding 等^[10]和 Wu 等^[11]采用 ABAQUS 有限元软件分析了铝合金、不锈钢等材料在激光冲击波作用下的动力学行为。在实验测试方面,王志龙等^[12]对工业纯钛进行大量的激光冲击实验,研究了不同冲击次数后剪切带的变化、孪晶的方向性变化及位错的形成,Borisenok 等^[13]采用 PVDF 压电传感器测试了冲击压缩下工业纯钛的 $\alpha \rightarrow \omega$ 相转变临界压力,同时采用 X 射线方法,得出 $\omega \rightarrow \alpha$ 逆向相转变的压力值。但是,有限元主要研究激光冲击诱发的变形和应力场,实验技术仅能测量冲击波压力和波形,以及观察某一特定时刻材料内部的静态微观特征^[14],难以观测到高压、高应变率条件下微观粒子的力学效应以及原子的微观结构相互作用演化过程。

分子动力学模拟是一种在原子、分子水平上求解多体问题的重要模拟方法,可以计算纳秒量级超短时间内纳米尺度上的金属材料原子量级的动力学特征,是一种反映超短时间内金属材料原子量级以及微观组织演化过程的有效手段。虽然原子尺度上的研究结果不能直接应用于对材料连续尺度的描述,但是可以为介观尺度提供必要的基本参数。介观尺度是沟通宏观与微观的桥梁,因此在原子尺度上理解冲击压缩下材料的力学行为对于解决跨尺度耦合问题具有重要意义。分子动力学模拟因其时间和空间尺度的特点,非常适合与纳米和单晶金属材料激光冲击实验作比较,这种结合为塑性变形过程研究提供了新的方法。Ren 等^[15]采用分子动力学方法研究了单晶钛纳米棒沿[0001]方向拉伸的相位转变行为,揭示了钛由 hcp(密排六方结构)至 bcc(体心立方)相的转变机制,这一独特的晶体结构转变是由多重肖克利不完全位错在尺寸限制条件下引起的。于超等^[16]运用分子动力学方法,采用钛的新多体嵌入式原子势,重点研究了冲击加载下温度、压强、波后粒子速度等热力学数据,通过对相关曲线进行分析得出钛的冲击熔化温度。王志龙^[12]基于分子动力学方法,分析了 300 K 时激光冲击加载下工业纯钛的应力-应变关系,以及不同温度冲击加载下纯钛的屈服极限。这些研究均能运用分子动力学方法从原子或分子角度解决微观组织瞬时变化的难题。但对于冲击波加载下波后物理参量、冲击波传播的结构特征以及微观组织动态变化行为研究尚少,仍需要补充以发展完善冲击波理论。

针对上述问题,本文采用分子动力学方法,模拟常温时纯钛冲击加载下的动力学行为,发现冲击波在纯钛中传播的双波结构特征,并且将波后粒子速度剖面图与局部应力图相结合,揭示了塑性变形过程中材料内部应力变化规律及应力变化对粒子速度、塑性变形的影响。探究了孪晶演化细节,发现了受冲击表面形成的非晶层,并进行了透射电子显微镜(TEM)实验验证。研究成果为认知超高应变率下纯钛的波后物理参量、微观组织变化细节以及发展密排六方晶体结构冲击波传播理论提供依据。

2 纯钛模型建立与冲击加载方法

选用美国圣地亚实验室开发和维护的 LAMMPS 软件。势函数选取 Zope 等开发的嵌入式势函数(EAM)^[17],与对势相比,嵌入式原子势能够更好地描述金属原子间的相互作用,并且此势的适用性已得到大量分子动力学模拟的验证^[18-19]。EAM 将每一个原子都看作系统中嵌入的一个杂质,其总能量表达式为

$$E = F_{\alpha} \left(\sum_{j_1=1} \rho_{\alpha} r_{ij} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{j_1=1} \phi_{\alpha\beta} r_{ij} \right), \quad (1)$$

式中 ρ_{α} 为某处没有原子 i 时的电子密度, $\phi_{\alpha\beta}$ 为短程势, r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的距离, F_{α} 为嵌入能。

利用分子动力学方法构建 hcp 结构纯钛,其剖面图如图 1(a)所示,构型与密排六方的结构[图 1(b)]相吻合。

对于[100]方向的冲击加载,设初始构型大小为 $150a \times 50a \times 50a$ (a 为钛的晶格常数, $a = 0.295 \text{ nm}$),共 2.25×10^6 个原子。 x 轴对应[100]方向, y 轴对应[010]方向, z 轴对应[001]方向,如图 2 所示。

在冲击模拟前先对样品进行热力学弛豫,采用共轭梯度法使样品到达最小位能状态以寻求最佳构型。冲击模拟的初始温度为 300 K,初始压力为零,时间步长取 1 fs, x 方向为冲击方向,采用自由边界条件, y 、 z 方向采用周期性边界条件。模拟采用动量反射法产生冲击波^[20],即取 x 方向一侧的前 3 层原子作为活塞,

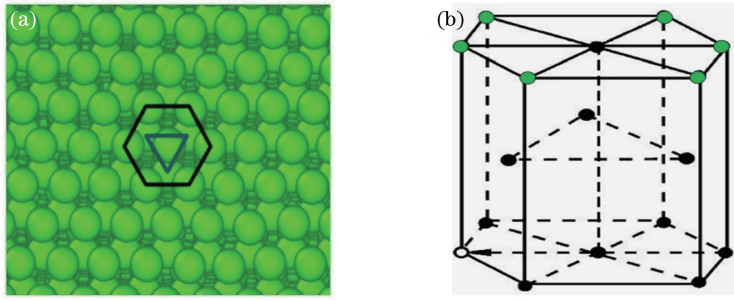


图 1 分子动力学纯钛模型与 hcp 晶体结构。(a)分子动力学模型;(b)hcp 晶体结构
 Fig. 1 Pure titanium model constructed by molecular dynamics and hcp crystal structure.
 (a) Model constructed by molecular dynamics; (b) hcp crystal structure

在 x 方向以恒定的速度推动活塞在样品中产生冲击波,活塞速度即为冲击波波阵面后的粒子速度,冲击波产生方式如图 2 所示,其中 U_p 为活塞速度, U_s 为产生的冲击波速度。

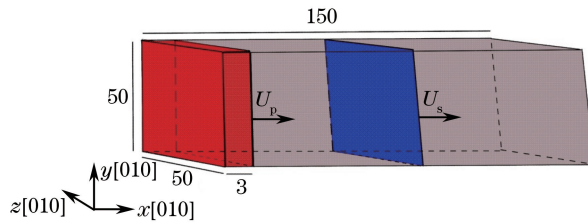


图 2 [100]方向冲击波加载模型
 Fig. 2 Model of loading along [100] direction

3 模拟结果与分析

3.1 粒子速度剖面分析

在材料的超高应变率塑性变形过程中,冲击波阵面结构、波后物理参量相对平面波也发生了较大变化。波后粒子速度作为表征冲击波传播特性的重要参量,是研究冲击波结构和冲击 Hugoniot 关系的重要依据。现有实验手段受到时间尺度的限制,很难测出分离的弹塑性波,一般只能测出单一弹性波或塑性波。图 3 为活塞冲击速度为 0.5 km/s(低于弹性极限)、1 km/s(高于弹性极限),沿[100]方向冲击时的粒子速度剖面。弹性波为先驱波,弹性波速大于塑性波速,随着压力升高,塑性波速的增加幅度大于弹性波速,塑性波速逐渐赶上弹性波速。对于沿[100]方向冲击的情况,粒子速度为 0.5 km/s 时的冲击压缩粒子速度剖面如图 3(a)所示,因为冲击压力低于弹性极限,所以只出现了弹性波,弹性波的扰动使粒子速度在 0.5 km/s 左右波动。当粒子速度为 1.0 km/s 时,冲击压力超过材料的 Hugoniot 弹性极限(HEL),粒子速度剖面出现弹性波和塑性波分离的双波结构。从图 3(b)可以看出,在 2 ps 和 3 ps 时弹性先驱波已分别传到 8 nm 和 11 nm 处,此时由于弹性波的扰动,粒子速度增加并稳定在 0.9 km/s,而在 2 nm 和 4 nm 处,由于塑性波的扰动,粒子

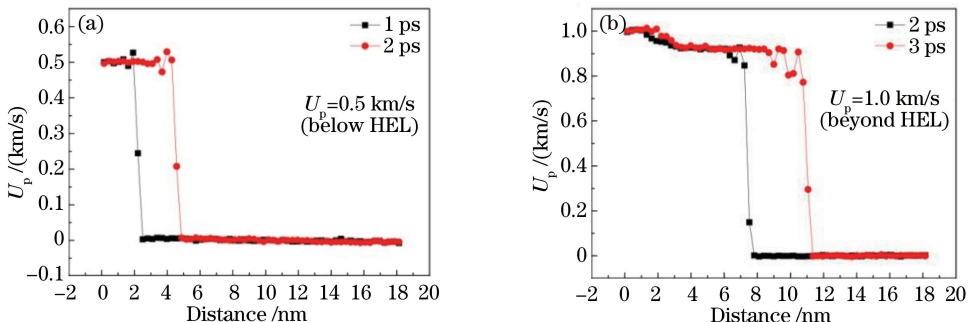


图 3 [100]方向冲击加载下粒子速度剖面图
 Fig. 3 Particle velocity profile under the shock along [100] direction

速度进一步上升,最终稳定在 1 km/s,粒子速度剖面的分层结构说明了冲击压缩纯钛过程中弹塑性双波结构的存在。

3.2 局部应力分析

冲击波的力学效应是材料波后物理参量和组织变化的重要因素,局部应力分析研究了冲击波传播过程中各个阶段、各个位置的正应力、流变应力、剪切力的变化情况。图 4 为活塞速度为 1.2 km/s 时沿[100]方向冲击压缩下的局部应力图,局部应力通过维里定理计算得到。由 3 个正应力可以得到静水压力 P 、最大分切应力 τ 、von Mises 流变应力 σ_{vm} ,代表原子结构变化或进行应力分析,切应力 τ 、流变应力 σ_{vm} 可表示为

$$\tau = \frac{1}{2} \left(\sigma_{xx} - \frac{\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{2} \right), \quad (2)$$

$$\sigma_{vm} = \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2]}. \quad (3)$$

如图 4 所示,在波阵面附近 σ_{vm} 随着 σ_{xx} 的变化出现相同趋势的变化,这是由于该区域只存在弹性波的扰动,并没有发生塑性变形。在 4 nm 处,当正应力 σ_{xx} 呈上升趋势时,剪切力 σ_{shear} 和流变应力 σ_{vm} 开始急剧下降。在塑性变形初期,位错的塞积和堵塞造成塑性变形难度增加,随着应力不断增大,晶界开始滑移或晶粒发生转动,这种塑性运动释放了剪切力,因而剪切力下降。在材料表面(0 nm)处,正应力 σ_{xx} 上升到 31 GPa 左右,而剪应力 σ_{shear} 下降到 3.5 GPa 左右,流变应力 σ_{vm} 下降到 2 GPa 左右,且正应力仍有上升趋势,剪切力和流变应力仍呈下降趋势,这是因为 3 ps 时材料的塑性变形仍在进行。同时结合图 3(b)可以发现,4 nm 位置处粒子速度和应力值均发生转折,这是由于塑性波的扰动造成应力集中,使应力增加,且增加的应力作用于粒子,使粒子速度增大,两者之间联系紧密。模拟得到的应力值大大超过了一般实验中的应力值,原因在于:1) 现实情况中材料存在杂质和孔洞等缺陷,大大降低了材料的弹性极限,而分子动力学模拟的纯钛为理想材料,不存在这些缺陷,因而模拟得出的弹性极限很高;2) 弹性极限与应变率相关,激光冲击的一大特点就是高应变率,应变率可以达到 10^7 s^{-1} ,同时受到分子动力学方法中时间尺度的限制,模拟中的应变率达到 $10^7 \sim 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。

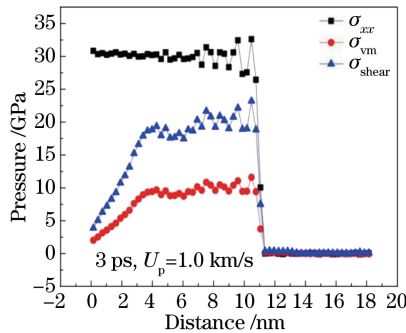


图 4 局部应力图

Fig. 4 Local stress diagram

3.3 微观组织动态变化过程

纯钛在室温下为单一的密排六方结构 α 相,其晶体结构对称性低,室温下独立滑移少,变形较为困难和复杂,因此变形通常通过位错滑移和孪生形变进行^[21-23]。图 5 为初始温度为 300 K 的纯钛样品沿[100]晶向冲击加载的塑性变形微观结构特征。该微观结构图像中缺陷结构分析通过公共近邻分析(CNA)方法实现^[24],图中蓝色原子表示 bcc 结构,红色原子表示 hcp 结构,黄色原子表示 ico(正十二面体)结构,绿色原子表示 fcc(面心立方)结构。沿[100]晶向以 0.5 km/s 的速度冲击靶材,发生弹性变形,未发生任何材料组织结构变化。当活塞速度增加到 1.0 km/s,图 5(a)为冲击加载 1 ps 的图像,结果显示,沿[100]方向冲击加载,在极短的时间内出现少量孪晶相。随着冲击波的传播,在冲击加载 3 ps 时,孪晶相规模迅速增大,且孪晶生长方向垂直于加载方向,如图 5(b)所示。由图 4 的局部应力分析可知,此时材料内局部仍存在 20 GPa 的剪切力,而剪切力是沿垂直加载方向形成孪晶的主要原因。随着冲击波的进一步作用,10 ps 时冲击波经材料背面反射回弹由压缩波变为拉伸波,材料内部出现了 bcc 结构和沿垂直加载方向之外方向生长的孪晶相,如

图 5(c)所示。Ren 等^[15]认为 hcp 至 bcc 晶体结构的转变是由多重肖克利不完全位错在尺寸限制的条件下引起的。此外由于晶界的强度极高,相耦合的冲击波造成了孪晶相的扰动,受扰动的孪晶无法越过晶界造成了应力集中,使孪晶的生长方向发生变化。冲击波卸载 10 ps 后,材料内部出现了大量的平行孪晶栅,其结构大小不一,呈平行排列,相互错开,如图 5(d)所示。冲击压缩下,正是这些孪晶的产生使应力集中得以释放,塑性变形才能顺利进行。图 5(e)、(f)为江苏大学王志龙^[12]实验后观察得到的激光冲击变形区孪晶栅的 TEM 图像,与图 5(d)中模拟结果吻合较好,证明了工业纯钛受到冲击后的相变结果为平行排列的栅状孪晶。

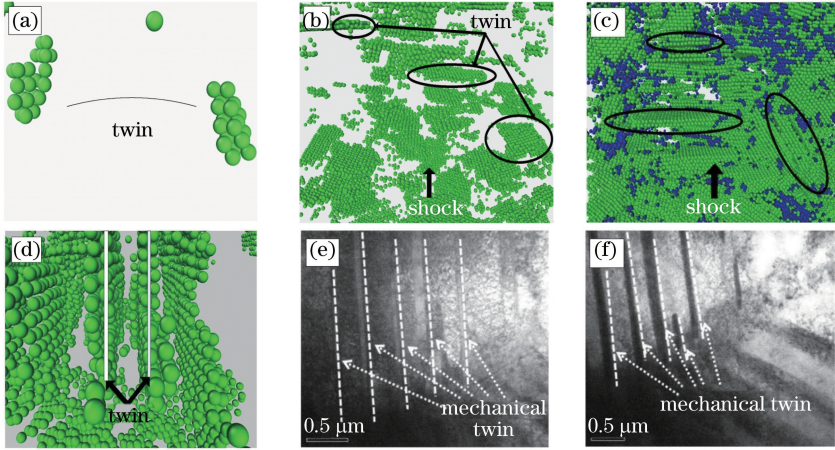


图 5 冲击波传播过程中钛结构内孪晶相变化过程示意图。(a)形成孪晶(1 ps);

(b)垂直加载方向生长(3 ps);(c)无序生长(10 ps);(d)形成平行孪晶栅(卸载后 10 ps);(e)(f)孪晶栅 TEM 图像^[12]

Fig. 5 Transformation of twin phase during the shock propagation in the pure titanium. (a) Formation of twin (1 ps);

(b) growth perpendicular to the loading orientation (3 ps); (c) out-of-order growth (10 ps);

(d) formation of parallel twin gratings (10 ps); (e) (f) TEM images of twin gratings^[12]

进一步分析冲击表层结构,发现厚度为 5 nm 的非晶层,如图 6(a)所示。实验中采用能量为 6 J、脉宽为 2.2 ns 的激光冲击工业纯钛,同一位置连续冲击 5 次,实验后样品在高分辨率 TEM 中可清晰看到表层原子呈无序排列,非常均匀地覆盖在样品表面,可见工业纯钛冲击 5 次后在表面形成了 10 nm 厚的均匀非晶层,其原子呈无序化排列,如图 6(b)所示。对于其成形机理^[25-26],一些学者认为与超高应变率塑性变形相关。激光诱导的超高应变率塑性变形在材料内部诱导产生了高密度位错与高密度层错。高密度位错使周边晶格发生畸变,而在高密度层错的作用下原子排列呈无序化,进而产生了非晶相^[25]。还有一些学者认为非晶是由激光冲击所产生的温升热作用引起的,即在冲击载荷下,材料表面的局部剧烈塑性变形致使温度升高,随后在集体急冷作用下动态再结晶形成非晶结构。现有实验手段难以实时监测激光冲击条件下金属材料的温度变化过程。分子动力学是一种揭示温度变化过程的有效方法,模拟结果显示[图 6(c)],冲击加载下样品温度迅速上升,18 ps 时纯钛温度由初始的 300 K 升高到 1040 K,达到了纯钛的再结晶温度(900 K)。达到

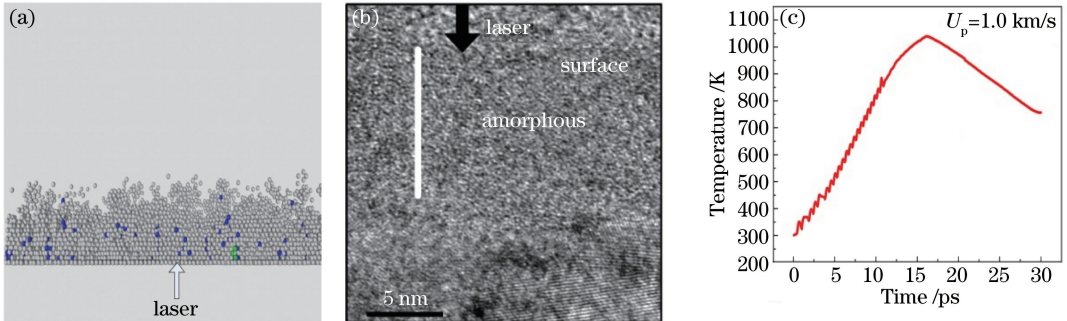


图 6 (a)分子动力学非晶结构;(b) TEM 非晶图像;(c)冲击温升曲线

Fig. 6 (a) Molecular dynamics amorphous structure; (b) TEM image of amorphous structure ;

(c) temperature rise under shock loading

极值温度后,随着冲击波的卸载,温度急剧下降,在 30 ps 时温度下降到 750 K 左右,这种高温与急冷现象均与动态再结晶理论相符。

4 结 论

采用分子动力学方法,模拟常温时纯钛冲击加载下的动力学行为,探究了孪晶演化细节,并进行了 TEM 实验验证,得到如下结论。

1) 冲击加载超过弹性极限时,冲击波在纯钛中传播出现了弹塑性波分离的双波结构,粒子先后经过弹性波和塑性波的两次扰动,速度稳定为冲击加载的活塞速度。

2) 局部应力分析表明,在塑性变形过程中,位错的塞积和堵塞造成了塑性变形难度的增加,随着应力不断增加,晶界开始滑移或晶粒发生转动,这种塑性运动释放了剪切力,使剪切力下降。

3) 激光冲击下,钛内部产生了孪生变形,其形变孪晶生长经历了垂直加载方向生长、无序生长、形成平行孪晶栅 3 个过程,与 TEM 结果吻合较好。

4) 激光冲击加载后,分子动力学与 TEM 结果均发现纯钛在冲击表层形成了一层均匀的薄非晶层,形成机理与超高应变率塑性变形和动态再结晶相关。

参 考 文 献

- 1 Wang Y M, Bringa E M, McNaney J M, *et al.* Deforming nanocrystalline nickel at ultrahigh strain rates[J]. Applied Physics Letters, 2006, 88(6): 061917.
- 2 Xue Jun, Yang Yong, Li Chen, *et al.* Research on polarized scattering of self-organized nanogratings induced by femtosecond laser[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(4): 0432001.
薛 军,杨 勇,李 晨,等. 飞秒激光诱导自组织纳米光栅偏振散射特性研究[J]. 光学学报, 2014, 34(4): 0432001.
- 3 Tian Qing, Zhou Jianzhong, Huang Shu, *et al.* Relaxation of residual stress on laser-peened surface during cyclic loading[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2014, 51(8): 081403.
田 清,周建忠,黄 舒,等. 循环载荷下激光喷丸诱导的表面残余压应力释放特性研究[J]. 激光与光电子学进展, 2014, 51(8): 081403.
- 4 Hua Liang, Tian Wei, Liao Wenhe, *et al.* Study of thermal-mechanical coupling behavior in laser cladding[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2014, 51(9): 091401.
华 亮,田 威,廖文和,等. 激光熔覆热影响区及残余应力分布特性研究[J]. 激光与光电子学进展, 2014, 51(9): 091401.
- 5 Li Y H, Zhou L C, He W F, *et al.* The strengthening mechanism of a nickel-based alloy after laser shock processing at high temperature[J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2013, 14(5): 1574-1578.
- 6 Huang Xu, Zhu Zhishou, Wang Honghong. Advanced aeronautical titanium alloys and applications[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2012: 7.
黄 旭,朱知寿,王红红. 先进航空钛合金材料与应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 2012: 7.
- 7 Nie Xiangfan, He Weifeng, Zang Shunlai, *et al.* Experimental study on improving high-cycle fatigue performance of TC11 titanium alloy by laser shock peening[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(8): 0803006.
聂祥樊,何卫锋,臧顺来,等. 激光喷丸提高 TC11 钛合金高周疲劳性能的试验研究[J]. 中国激光, 2013, 40(8): 0803006.
- 8 Wang Huaming, Zhang Shuquan, Wang Xiangming. Progress and challenges of laser direct manufacturing of large titanium structural components[J]. Chinese J Lasers, 2009, 36(12): 3204-3209.
王华明,张述泉,王向明. 大型钛合金结构件激光直接制造的进展与挑战[J]. 中国激光, 2009, 36(12): 3204-3209.
- 9 Amarchinta H K, Grandhi R V, Langer K, *et al.* Material model validation for laser shock peening process simulation[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2008, 17(1): 015010.
- 10 Ding K, Ye L. Simulation of multiple laser shock peening of a 35CD4 steel alloy[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2006, 178(1): 162-169.
- 11 Wu B, Tao S, Lei S. Numerical modeling of laser shock peening with femtosecond laser pulses and comparisons to experiments[J]. Applied Surface Science, 2010, 256(13): 4376-4382.
- 12 Wang Zhilong. High-temperature tensile properties and micro-structure of CP-Ti subjected to laser shock peening[D].

Zhenjiang: Jiangsu University, 2015: 45-46.

王志龙. 激光冲击强化工业纯钛高温拉伸性能及微观组织结构研究[D]. 镇江: 江苏大学, 2015: 45-46.

- 13 Borisenok V A, Zhernokletov M V, Kovalev A E, *et al.* Phase transitions in shock-loaded titanium at pressures up to 150 GPa[J]. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2014, 50(3): 346-353.
- 14 Zhou L C, Li Y H, He W F, *et al.* Deforming TC6 titanium alloys at ultrahigh strain rates during multiple laser shock peening[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2013, 578: 181-186.
- 15 Ren J Q, Sun Q Y, Lin X, *et al.* Phase transformation behavior in titanium single-crystal nanopillars under [0001] orientation tension: A molecular dynamics simulation[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 92: 8-12.
- 16 于 超, 宁建国. 钛的冲击熔化分子动力学模拟[C]. 第五届全国计算爆炸力学会议, 2012: 26.
- 17 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]. *Physical Review B*, 2001, 63(22): 224106.
- 18 Deng Xiaoliang, Zhu Wenjun, Song Zhenfei, *et al.* Microscopic mechanism of void coalescence under shock loading[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(7): 4772-4778.
邓小良, 祝文军, 宋振飞, 等. 冲击加载下孔洞贯通的微观机理研究[J]. *物理学报*, 2009, 58(7): 4772-4778.
- 19 Ma Wen, Zhu Wenjun, Zhang Yalin, *et al.* Construction of metallic nanocrystalline samples by molecular dynamics simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(7): 4781-4787.
马 文, 祝文军, 张亚林, 等. 纳米多晶金属样本构建的分子动力学模拟研究[J]. *物理学报*, 2010, 59(7): 4781-4787.
- 20 Holian B L. Modeling shock-wave deformation via molecular dynamics[J]. *Physical Review A*, 1988, 37(7): 2562.
- 21 Kim I, Kim J, Shin D H, *et al.* Deformation twins in pure titanium processed by equal channel angular pressing[J]. *Scripta Materialia*, 2003, 48(6): 813-817.
- 22 Gurao N P, Kapoor R, Suwas S. Deformation behavior of commercially pure titanium at extreme strain rates[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(9): 3431-3446.
- 23 Xu F, Zhang X F, Ni H T, *et al.* Effect of twinning on microstructure and texture evolutions of pure Ti during dynamic plastic deformation[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2013, 564: 22-33.
- 24 Li D, Wang F C, Yang Z Y, *et al.* How to identify dislocations in molecular dynamics simulations[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2014, 57(12): 2177-2187.
- 25 Cui C, Hu J, Liu Y, *et al.* Formation of nano-crystalline and amorphous phases on the surface of stainless steel by Nd: YAG pulsed laser irradiation[J]. *Applied Surface Science*, 2008, 254(21): 6779-6782.
- 26 Cao Yang, Chen Guang, Yan Yinbiao. Current status and prospects of surface self nanocrystallization for iron and steel[J]. *Journal of Iron and Steel Research*, 2005, 17(2): 1-6.
曹 扬, 陈 光, 颜银标. 钢铁材料表面自身纳米晶化及其应用前景[J]. *钢铁研究学报*, 2005, 17(2): 1-6.