

深冷环境下激光冲击波在单晶钛中的传播及位错扩展特性

徐高峰, 周建忠, 孟宪凯, 黄 舒, 孙云辉, 徐洋洋

江苏大学机械工程学院, 江苏 镇江 212013

摘要 采用分子动力学方法对深冷环境下(77 K)的单晶钛内诱导的位错扩展进行了模拟,使用共同近邻分析(CNA)法分析了温度对位错扩展的影响,系统研究了激光冲击波在深冷环境和常温环境条件下沿[0001]方向的冲击传播特性。结果表明,[0001]方向上单晶钛的激光冲击波为弹塑性双波结构。深冷环境下激光冲击波后材料内部出现大量位错,塑性变形主要表现为不全位错的发射和传播。冲击应力和剪切应力与激光冲击波速度呈线性关系。深冷环境下的激光冲击波速度与冲击波压力均高于常温下的,冲击波速度提高了9%~10%,冲击波压力增加了8%。深冷激光冲击通过抑制动态回复从而诱导高密度位错,进而显著改善材料强度,为深冷激光冲击强化机理的研究提供了参考。

关键词 激光技术; 深冷激光冲击; 钛合金材料; 位错; 分子动力学

中图分类号 TG17

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201744.0602005

Propagation and Dislocation Development Properties of Laser Shock Waves in Monocrystalline Titanium Under Cryogenic Environment

Xu Gaofeng, Zhou Jianzhong, Meng Xiankai, Huang Shu, Sun Yunhui, Xu Yangyang

School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China

Abstract The dislocation development induced in monocrystalline titanium under cryogenic environment (77 K) is simulated by using the molecular dynamics method. The effect of the temperature on the dislocation development is analyzed by using the common-neighbor analysis (CNA) method, and the propagation properties of laser shock waves along the [0001] direction under the cryogenic and room-temperature environments are investigated systematically. The results show that the laser shock waves along the [0001] direction exhibit an elastic-plastic two-wave structure. Under the cryogenic environment, a large number of dislocations occur within materials after the laser shock waves. The plastic deformation mainly manifests as the emission and the propagation of partial dislocations. The impact stress and the shear stress both have the linear relationship with the speed of shock waves. The speed and the pressure of laser shock waves under the cryogenic environment are both higher than those under the room-temperature environment. The speed increases by 9%-10% and the pressure increases by 8%. By means of suppressing the dynamic recovery under the cryogenic environment, laser peening can induce high density dislocations and thus dramatically strengthen the material strength, which provides a reference for the investigation of laser shock peening mechanism under the cryogenic environment.

Key words laser technique; cryogenic laser peening; titanium alloy material; dislocations; molecular dynamics

OCIS codes 140.3540; 120.6780; 160.3918; 160.3900; 220.4610

收稿日期: 2017-01-09; 收到修改稿日期: 2017-02-17

基金项目: 国家自然科学基金(51575247, 51405204)、中国博士后科学基金(2014T70477, 2013M540417)、江苏大学高层次人才启动基金(13JDG109)、江苏省科技支撑项目(工业)(BE2013097)、江苏省自然科学基金(BK20141166)、江苏省研究生创新计划(KYLX15_1056)

作者简介: 徐高峰(1992—),男,硕士研究生,主要从事激光冲击强化方面的研究。E-mail: m18852867169@163.com

导师简介: 周建忠(1964—),男,教授,博士生导师,主要从事激光先进制造技术方面的研究。

E-mail: zhoujz@ujs.edu.cn(通信联系人)

1 引 言

TC6 钛合金具有密度小、比强度高优点,被广泛应用于航空领域。TC6 钛合金为 $\alpha+\beta$ 型钛合金,其变形主要由 α 相主导, β 相只在环境温度超过 1022 K、体积分数超过 50% 时才会对材料性能产生显著的影响。密排六方(HCP)结构的 α 相是 TC6 钛合金的重要组成相,Chichili 等^[1] 研究发现,位错滑移在纯钛的塑性变形中占据主导地位。深冷激光冲击强化(CLP)技术是一种新型材料金属表面改性的加工技术,通过超高应变率(10^7 s^{-1} 量级)和超低温($-130 \sim -196 \text{ }^\circ\text{C}$ 液氮温度)的共同耦合作用产生高密度的形变孪晶和堆垛层错,从而获得稳定的显微强化组织及高表面硬度。Liao 等^[2] 对 Ni-Ti 合金在低温环境下进行了激光冲击强化(LP),发现低温加工环境将形成高体积分数形变马氏体,CLP 将增大化学驱动力和马氏体成核密度。Ye 等^[3] 对铜材料进行了 CLP 研究,发现铜在 CLP 处理后产生了高密度位错,热稳定性良好,材料强度和储存能量更高。Brown 等^[4] 研究了不同温度(室温和液氮温度)与应变率对无氧高导电性铜形变的影响,发现高应变率(10^3 s^{-1})和深冷温度的双重作用诱导形成了形变孪晶。由此可见,与常规的大塑性形变强化工艺相比,LP 技术的应变率高达 10^7 s^{-1} 量级,在深冷环境下进行 LP,可充分利用深冷处理和高应变率形变强化的叠加效应,更好地诱导高密度位错和纳米孪晶的形成,有望获得具有一定阻尼性能的高强度抗振表层材料,从而有效提高结构零件的抗疲劳性能,因此,研究 α 相的位错行为对于研究 TC6 钛合金性能具有重要意义。目前,国内外对 TC6 钛合金材料的 CLP 研究较少,而微观组织的分析主要依赖于金相测试实验,这对微观结构演变的研究带来较大的挑战。

分子动力学(MD)模拟是一种非常有效的计算机分析技术,已成为重要的科学研究的方法之一。Jarmakani 等^[5] 对单晶镍和纳米镍进行了冲击压缩模拟,并从偏位错、全位错方面阐述了塑性变形机制。Ren 等^[6] 研究了 HCP-Ti 沿 $[0001]$ 晶向拉伸的塑性变形机制。上述研究者都采用 MD 方法解决了原子级别的瞬态动力学问题。由于激光冲击加工涉及冲击波压力的传播及其对材料的微观作用机理,其组织演变的微观动力学过程尚不清晰。

针对上述问题,本文采用 MD 方法,基于 Lammmps 软件平台,以 HCP-Ti 为研究对象,通过共同近邻分析法(CNA)研究了 CLP 及常温 LP 下 HCP-Ti 的位错演变过程及冲击波效应,讨论了超高应变率及超低温耦合强化作用下 HCP-Ti 结构的位错运动及冲击波特性,该研究为 CLP 技术的应用提供了理论参考。

2 模拟方法

单晶钛为 HCP 结构,原子质量为 47.88,晶格常数为 2.95 nm,采用 MD 模拟方法建立了单晶钛激光冲击模型,如图 1 所示,其中 X 轴方向为 $[1120]$ 晶向,Y 轴方向为 $[1100]$ 晶向,Z 轴方向为 $[0001]$ 晶向,体系盒子大小为 $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$,原子数为 1350000, U_p 为活塞速度, U_s 为冲击波速度。

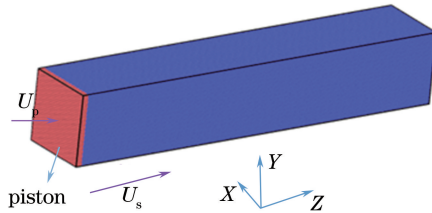


图 1 单晶钛激光冲击模型

Fig. 1 Model of mono-crystalline titanium processed by LP

基于 Lammmps 软件进行 MD 模拟,参考文献[7]中的 Ti 势函数,采用原子内嵌势(EAM),把体系中的粒子看作是嵌入在由其他粒子构成的基体中。总势能 E 的表达式为^[8]

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(\gamma_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

式中 ρ_i 表示 i 原子处电子云密度之和; ϕ 表示对势,为两原子共有; F 表示嵌入能; γ_{ij} 表示原子 i 与 j 之间的距离。

在冲击波加载过程中,为了最大限度地减少边缘效应,在 X 和 Y 轴方向上采用周期性边界,而在 Z 轴

方向上采用非周期边界。模拟时间步长取为 1 fs,模拟时间为 18 ps。通过共轭梯度法最小化系统能量,再通过活塞法^[9]在 Z 轴方向上对三层原子施加 0.7~2 km/s 的粒子速度。为了更好地研究 HCP-Ti 中的冲击波结构,选取粒子速度、冲击压力、剪切应力为研究对象。粒子速度和冲击压力由沿 Z 轴方向上 1×10^{-9} m 距离范围内的所有原子统计平均来得到,剪切应力由一定体积内维里应力^[10]的统计平均得到。考虑到冲击为一维平面正冲击,冲击压力表达式为

$$P_{\text{shock}} = \rho_0 U_s U_p, \quad (2)$$

式中 ρ_0 为单位体积内原子密度。

由于中心对称参数法无法表征 HCP 结构,为了更好地识别缺陷原子,本文采用 CNA^[12] 表征晶体缺陷。HCP-Ti 的共同近邻原子截断半径为

$$r_c^{\text{hcp}} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{4 + 2B^2}{3}} \right) a, \quad B = (c/a)/1.633, \quad (3)$$

式中晶格常数 $c = 4.68$, $a = 2.95$ ^[13], B 为轴比。

3 分析与讨论

3.1 冲击波结构

图 2 给出了温度在 77 K,冲击波加载时间为 8,9,10 ps 时,在 Z 方向上活塞/粒子速度与冲击波冲击距离的关系,其中 V_z 为 Z 轴方向上的活塞/粒子速度。由图可知,当活塞/粒子速度为 1.5 km/s 时,Hugoniot 弹性极限(HEL)值约为 30 GPa;弹性前驱波沿[0001]方向上升速率很快,弹性前驱波传播区域较窄,在该区域内发生弹性形变。当冲击压力超过 HEL 值时,弹性波与塑性波分离,产生稳定的双波结构。可以看出,随着冲击时间和距离的增加,弹性波幅值减小,弹性波减缓而塑性波在冲击波中占主导作用。金属钛的层错能相对较高,这是产生双波结构的原因^[14]。冲击波阵面如图 2 所示,其中波阵面距离约为 2×10^{-8} m。

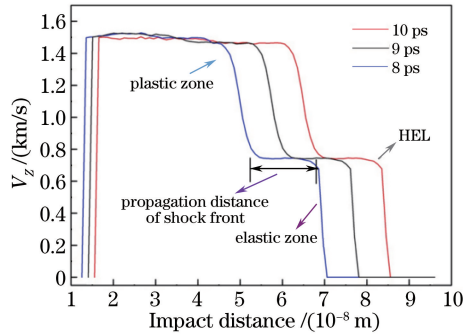


图 2 在 77 K 温度、不同冲击波加载时间下,Z 轴方向上活塞/粒子速度与冲击波冲击距离的关系

Fig. 2 Piston/particle speed versus impact distance of shock wave along Z-axis direction under different loading time of shock wave at 77 K

图 3 为 300 K 和 77 K 温度下,Z 方向上活塞/粒子速度与冲击波冲击距离的关系图。可以看出,CLP 下活塞/粒子速度大于 LP 下的速度,冲击波依然为双波结构。在相同冲击压缩条件下,CLP 冲击波波阵面传输距离大于常温激光冲击波的,说明 CLP 冲击波速度高于 LP 冲击速度。原因是在 77 K 温度下,HCP-Ti 晶格结构更加稳定,原子排列紧密且均匀一致,有利于冲击波能量在晶格间的传递。

3.2 冲击波速度与冲击波压力

图 4 为在 CLP 及 LP 条件下[0001]方向上 HCP-Ti 的冲击波速度随粒子速度的变化规律。其中冲击波速度由不同加载时间内的冲击波阵面传输距离计算得出。可见,在 300 K 及 77 K 温度下,冲击波速度随粒子速度的增加而增大,但随粒子速度的变化不大。激光冲击波在 HCP-Ti 中传播的物理性质依然满足 Hugoniot 方程^[15]:

$$U_s = U_0 + s_1 U_p, \quad (4)$$

式中 U_0 为与声速相关的材料参数, s_1 为无量纲参数。300 K 以及 77 K 下激光冲击波的 Hugoniot 方程分别

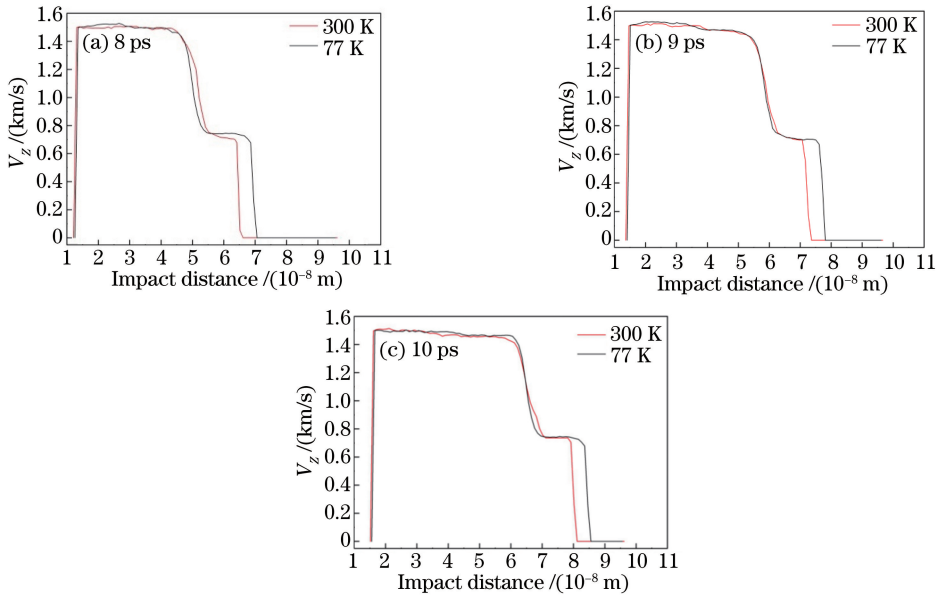


图 3 不同冲击波加载时间下,Z 轴方向上活塞/粒子速度与冲击波冲击距离的关系
 Fig. 3 Piston/particle speed versus impact distance of shock wave along Z-axis direction under different loading time of shock wave

为 $U_s = 7.30 + 0.20 U_p$ 与 $U_s = 7.63 + 0.31 U_p$ 。

图 5 为 300 K, 77 K 不同温度下冲击波压力随粒子速度的变化曲线。冲击压力由(2)式计算得到。由图可知,激光冲击波压力随粒子速度的增加而逐渐增大。由于激光冲击加工应变率在 10^7 s^{-1} 以上,当粒子速度为 1.5 km/s 时,可以发现此时冲击压力在两温度环境下分别为 48.1 GPa 及 52.4 GPa,大于弹性极限幅值(约 30 GPa),材料进入塑性变形阶段,诱导产生位错。在相同粒子速度条件下,CLP 下冲击波压力值大于常温激光冲击的 9%~10%。由于具有极高的应变率和超低温环境,CLP 可以在材料内部产生更高的冲击波压力,因此 CLP 技术将在金属钛中诱导产生高密度位错。

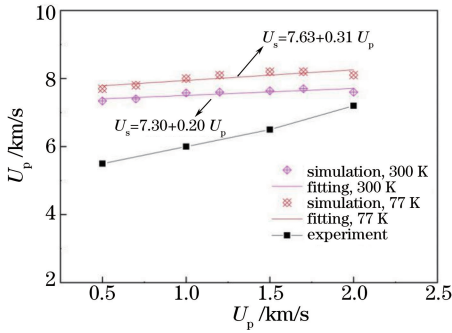


图 4 U_s 与 U_p 的关系
 Fig. 4 U_s versus U_p

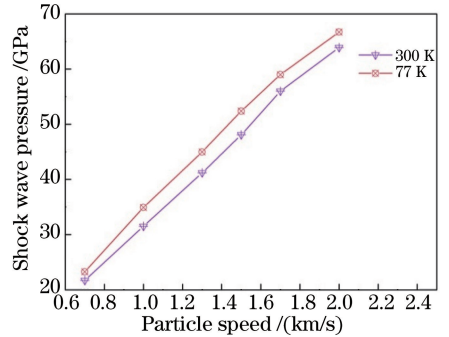


图 5 冲击波压力与粒子速度的关系
 Fig. 5 Shock wave pressure versus particle speed

3.3 剪切应力分析

材料中的剪切应力随冲击压力的增加而发生变化。剪切应力由以下方程确定:

$$\tau_{\text{shear}} = \frac{1}{2} \left[P_{zz} - \frac{1}{2} (P_{xx} + P_{yy}) \right], \quad (5)$$

式中 P_{zz} 为冲击波传播方向的正应力, P_{xx} 和 P_{yy} 为 X、Y 轴方向的横向应力。图 6 为 P_{zz} 和剪切应力随深度的变化曲线($U_p = 1.5 \text{ km/s}$)。在 300 K 下,如图 6(a)所示,最大分切应力为 7 GPa(冲击压力约为 50 GPa)。在 77 K 下,如图 6(b)所示,剪切应力增加到 11 GPa 随后下降,即剪切应力最大值为 11 GPa,符合塑性区域成核所需的剪切应力;随着 HEL 值的减小,压力下降(冲击压力约为 54 GPa, HEL 值约为 30 GPa)^[17]。可以看出,当 CLP 下的冲击压力高于 HEL 值时,CLP 较 LP 更易通过释放位错、层错等缺陷

释放剪切应力,原因是环境温度的降低和高应变率的耦合作用,增大了位错运动所需的临界分切应力^[18]。结合图 3 给出的冲击波传播特性,可以发现冲击压力、剪切应力和粒子速度在弹性区域呈线性上升,当冲击压力超过 HEL 值时,材料进入塑性变形阶段,冲击压力、粒子速度、剪切应力最终达到稳定状态。分析认为,CLP 过程中诱导的冲击波压力较高,剪切应力在很短时间内就增大到足以诱导位错塑性变形,因而更易在材料中产生高密度层错。

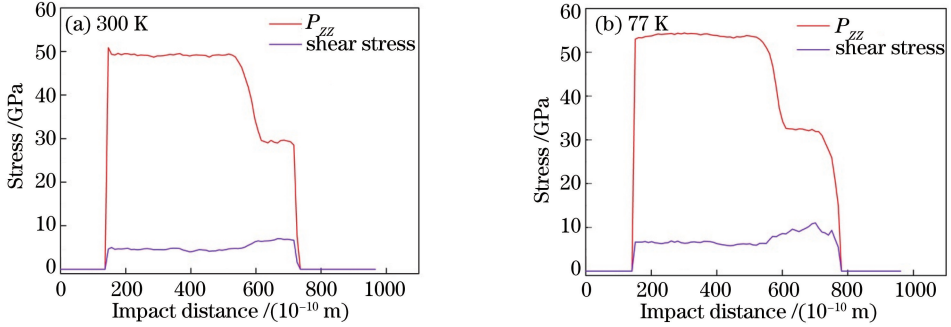


图 6 P_{zz} 及剪切应力与冲击距离的关系

Fig. 6 P_{zz} and shear stress versus impact distance

3.4 位错形态分析

根据模拟结果,利用 CNA 来表征晶体缺陷,红色为 HCP 原子,绿色为 FCC(面心立方)原子,白色为缺陷与表面原子。粒子速度选为 1.5 km/s,通过不同加载时间研究 300 K 及 77 K 环境下塑性变形对位错的影响。图 7(a)为 300 K 下不全位错的发射及其传播过程,可以看到冲击 5 ps 后,材料内部开始产生不全位错,这些不全位错主要由空位簇崩塌形成^[17]。图 7(b)为 A 截面上的堆垛层错及 FCC 相。当冲击压力超过弹性波幅值时,冲击波反复作用在钛材料表面上,不全位错随塑性变形的增加继续扩展成层错,冲击过后层错在材料内部传播留下。

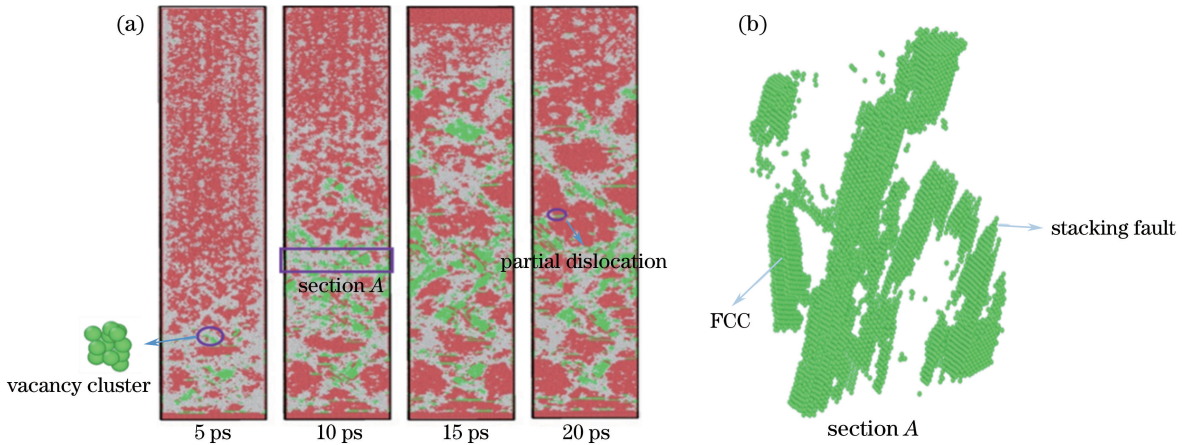


图 7 (a)常温 LP 下位错的发射和传播原子视图;(b) A 截面 FCC 相和堆垛层错三维视图

Fig. 7 (a) Atomic view of emission and propagation of dislocations under LP at room-temperature;

(b) three-dimensional view of FCC phases and stacking faults in section A

图 8 为 300 K 及 77 K 温度下,冲击波在 18 ps 时的原子结构三维示意图。CLP 能产生高密度堆垛层错缺陷,从而强化材料。Picu 等^[19]指出塑性变形诱导位错增殖可以分为两个部分:

$$\frac{d\rho}{de} = \left. \frac{d\rho}{de} \right|_{pr} + \left. \frac{d\rho}{de} \right|_{re}, \quad (6)$$

式中 $\left. \frac{d\rho}{de} \right|_{pr}$ 为加工硬化导致的位错增殖, $\left. \frac{d\rho}{de} \right|_{re}$ 为热激活过程导致的位错湮灭。位错在温度升高时存在热激活现象,当温度达到材料的热激活温度时,部分相互钉扎的位错产生攀移或者交滑移等位错运动,并在位错

攀移与交滑移过程中不断吸收滑移路径周围的位错,发生位错湮灭,使位错数目降低^[20]。另一方面,位错密度稳定在位错生成和动态回复过程之间的平衡状态^[3]。CLP 过程中低温有效地抑制了动态回复过程,从而提高了位错密度。然而对于常温 LP 处理的试样材料,由于产生了更多动态回复,位错密度较 CLP 样品的低。在深冷环境下,更多的缺陷(位错)存储在 CLP 强化后的材料中,提高了材料强度。

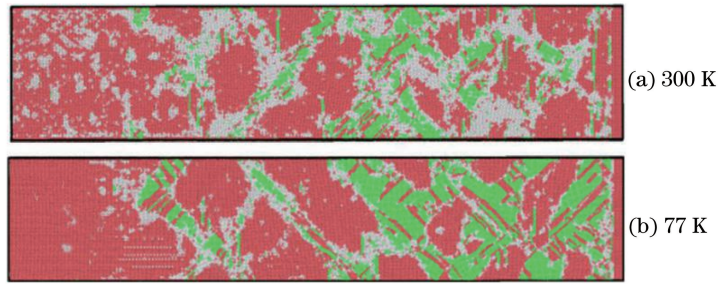


图 8 18 ps 时激光冲击波诱导的位错形态

Fig. 8 Profile of dislocation induced by laser shock wave at 18 ps

激光冲击单晶钛过程中,不全位错的发射和传播在材料内部都会留下由 HCP 结构转变而成的 FCC 结构,可以通过统计材料冲击后 FCC 结构的原子数来估算位错密度^[21]。图 9 为位错原子数目与冲击时间的关系。可以看出,CLP 条件下诱导的位错数目更高。常温激光冲击波诱导的最高位错原子数为 134136,而深冷激光冲击波诱导的最大位错原子数为 317417,较前者增加了近 130%,当粒子速度增加即应变率提高时,位错原子数也有较大增加。说明超低温(液氮温度)与超高应变率的耦合作用,可以在材料内部引起更高的位错密度,从而改善材料的强度性能。

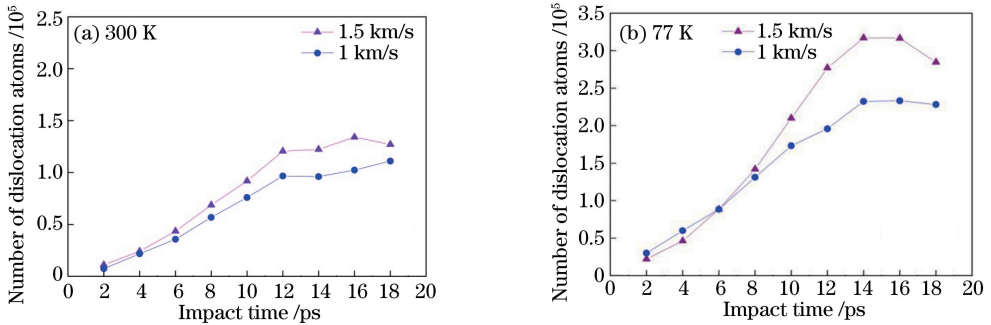


图 9 位错原子数目与冲击时间的关系

Fig. 9 Number of dislocation atoms versus impact time

5 结 论

基于 Lammmps 分子动力学软件,对激光冲击强化过程进行了建模,研究了深冷条件下激光冲击单晶钛诱导的冲击波传播特性、冲击波压力加载下的剪应力分布及单晶钛微观结构位错密度的变化,获得以下主要结论。

1) 深冷条件下激光诱导的冲击波速度高于常温条件下的,当冲击波压力超过 HEL 值时,产生稳定的弹-塑性双波结构。在相同粒子速度条件下,深冷激光冲击产生的冲击波压力值较常温激光冲击压力增大了 10% 左右。

2) 在深冷条件下进行激光冲击,能在单晶钛材料内部产生更高的位错密度,其较常温激光冲击条件下的提高了近 130%。深冷激光冲击下产生的高密度堆垛层错缺陷,能够有效钉扎位错滑移,从而实现材料的强化。

3) 深冷激光冲击获得的高密度位错结构的变化是由热激活过程导致的位错湮灭以及超低温有效了抑制动态回复引起的。 α -Ti 的微量变形机制主要为不全位错的发射和传播,当冲击波反复作用在材料表面上时,先前产生的不全位错可以扩展成层错;而冲击波在材料中传播时,冲击波压力衰减,同时高应变率引起的

应力波为位错运动和位错增殖提供了能量。

参 考 文 献

- [1] Chichili D R, Ramesh K T, Hemker K J. The high-strain-rate response of alpha-titanium: Experiments, deformation mechanisms and modeling[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(3): 1025-1043.
- [2] Liao Y, Ye C, Lin D, *et al.* Deformation induced martensite in NiTi and its shape memory effects generated by low temperature laser shock peening[J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 112(3).
- [3] Ye C, Suslov S, Lin D, *et al.* Cryogenic ultrahigh strain rate deformation induced hybrid nanotwinned microstructure for high strength and high ductility[J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(21).
- [4] Brown T L, Saldana C, Murthy T G, *et al.* A study of the interactive effects of strain, strain rate and temperature in severe plastic deformation of copper[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(18): 5491-5500.
- [5] Jarmakani H N, Bringa E M, Erhart P, *et al.* Molecular dynamics simulations of shock compression of nickel: From monocrystals to nanocrystals[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(19): 5584-5604.
- [6] Ren J, Sun Q, Xiao L, *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.
- [7] Ackland G J. Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential[J]. *Philosophical Magazine Part A*, 1992, 66(6): 917-932.
- [8] Daw M S, Baskes M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals[J]. *Phys Rev Lett*, 1983, 50: 1285-1288.
- [9] Kum O. Orientation effects in shocked nickel single crystals via molecular dynamics[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, 93(93): 3239-3247.
- [10] Zimmerman J A, Webb E B I, Hoyt J J, *et al.* Calculation of stress in atomistic simulation[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2004, 12(4): S319-S332.
- [11] Chen Kaiguo, Zhu Wenjun, Ma Wen. Propagation of shockwave in nanocrystalline copper molecular dynamics simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(2): 1225-1231.
陈开果, 祝文军, 马文. 冲击波在纳米金属铜中传播的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2010, 59(2): 1225-1231.
- [12] Tsuzuki H, Branicio P S, Rino J P. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood[J]. *Computer Physics Communications*, 2007, 177(6): 518-523.
- [13] LAMMPS documentation manual[EB/OL]. [2016-12-15]. <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>.
- [14] Saeed-Akbari A, Imlau J, Prah U, *et al.* Derivation and variation in composition-dependent stacking fault energy maps based on subregular solution model in high-manganese steels[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2009, 40(13): 3076-3090.
- [15] Joshi K D, Gupta S C, Banerjee S. Shock Hugoniot of osmium up to 800 GPa from first principles calculations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 21(41): 3160-3169.
- [16] Marsh S P. *Lasl shock hugoniot data*[M]. California: University of California Press, 1980.
- [17] Friedel J. *Dislocations*[M]. Wang Yu, Transl. Beijing: Science Press, 1984: 93-95.
弗里埃德尔 J. *位错*[M]. 王煜, 译. 北京: 科学出版社, 1984: 93-95.
- [18] Gray G T I. *Deformation twinning: Influence of strain rate*[C]. Fall meeting of the Minerals, Metals and Materials Society: Physical metallurgy and materials, Pittsburgh, 1993: 10193638.
- [19] Picu R C, Majorell A. Mechanical behavior of Ti-6Al-4V at high and moderate temperatures-Part II: Constitutive modeling[J]. *Material Science and Engineering: A*, 2002, 326(2): 306-316.
- [20] Meng Xiankai, Zhou Jianzhong, Huang Shu, *et al.* Molecular dynamics simulation of dislocation development in monocrystalline copper induced by warm laser peening[J]. *Chinese J Lasers*, 2015, 42(7): 0702003.
孟宪凯, 周建忠, 黄舒, 等. 激光温喷丸诱发单晶铜位错扩展的分子动力学模拟[J]. *中国激光*, 2015, 42(7): 0702003.
- [21] Ma Wen. *Molecular dynamics investigations on the mechanisms of plastic deformation and phase transformation of nanocrystalline metals under shock compression*[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2011: 115-125.
马文. 冲击压缩下纳米多晶金属塑性及相变机制的分子动力学研究[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2011: 115-125.