

高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究*

王云天 曾祥国[†] 杨鑫

(四川大学建筑与环境学院, 深地科学与工程教育部重点实验室, 成都 610065)

(2019年6月14日收到; 2019年10月9日收到修改稿)

采用嵌入原子势的分子动力学模拟方法, 研究了 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率下, 温度效应对单晶铁中孔洞成核与生长的影响, 并对 NAG (nucleation and growth) 模型在单晶铁中的适用性进行了探讨. 结果表明: 随着温度的升高, 单晶铁的抗拉强度峰值降低, 1100 K 温度下单晶铁抗拉强度峰值比 100 K 温度下降低了 35.9%. 在 100—700 K 温度下, 拉应力时程曲线表现出双峰值特点, 分析表明, 第一峰值是由于拉应力升高引起内部结构发生相变而产生, 第二峰值则是因发生孔洞成核与生长而产生; 900—1100 K 温度下, 拉应力时程曲线表现为单峰值, 孔洞成核与生长是拉应力下降的主要原因. 分析发现, 孔洞在高温下更容易成核, 高应变率下单晶铁中孔洞成核与生长和 NAG 模型有较好的符合度, 单晶铁中孔洞成核阈值与生长阈值都远高于低碳钢, 并且孔洞成核阈值与生长阈值随着温度的升高而逐渐降低. 研究结果可为建立高应变率下金属材料动态损伤演化模型提供借鉴.

关键词: 单晶铁, 孔洞成核与生长, 温度效应, 分子动力学

PACS: 61.82.Bg, 61.72.Qq, 68.60.Dv, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.68.20190920

1 引言

金属材料在高速冲击下的动态损伤问题是力学中最困难、最复杂的问题之一, 且在国防与民用领域中都有非常重要的应用背景, 因此该问题广受关注^[1]. 在高速冲击下, 材料内部加载稀疏波和自由面反射稀疏波相互作用在内部产生拉应力区域, 引起材料内部微孔洞成核、生长和贯穿, 最终由于损伤的累积导致材料断裂^[2-6].

金属材料动态损伤受多种因素影响, 例如材料的微结构、初始缺陷、温度、加载应变率等, 其中加载应变率的影响非常重要, 金属材料的断裂强度随加载应变率的增加而增大, 在极高的应变率下材料的断裂强度与理论强度十分接近^[7]. 在实验研究中,

常用的研究金属材料动态损伤的方法主要有霍普金森杆、轻气炮、激光加载等, 加载应变率在 10^2 — 10^{10} s^{-1} 之间, 利用上述加载手段, 已经对不同应变率下金属材料的动态损伤进行了大量的研究^[8-15]. Zaretsky 和 Kanel^[14] 采用轻气炮加载方法, 研究了应变率达到 10^5 s^{-1} 量级时多晶铁样品在不同初始温度下的动态响应, 分析了温度对层裂强度的影响以及冲击引起的相变行为. Remington 等^[2] 利用激光加载方法, 研究了不同晶粒尺寸与加载应变率 (10^6 — 10^7 s^{-1}) 下钽的动态响应, 结果表明晶粒尺寸对层裂强度有显著影响, 高应变率下孔洞在晶界处更容易成核.

在实验研究的基础上, 建立了描述金属材料动态损伤的理论模型, 代表性的理论模型包括: 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室提出的 Gurson 模型^[16]

* 国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院联合基金 (批准号: U1430119, U1530140) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xiangguozeng@scu.edu.cn

和 Johnson 模型^[17], 以及 Curran 等^[3] 提出的 NAG (nucleation and growth) 模型, 这些理论模型描述了宏观尺度下金属材料的动态损伤行为. 金属材料在高速冲击下的动态损伤是一个非常复杂的问题, 需要考虑的因素众多, 包括孔洞的成核与生长、相变、热耗散等, 并且时间尺度从皮秒到毫秒, 空间尺度从纳米到毫米^[18], 因此, 难以在一个理论模型中将所有因素考虑在内.

目前, 分子动力学模拟已成为实验研究的重要补充手段, 为高应变率下金属材料动态损伤研究提供了新的方法. 分子动力学模拟可以在微观尺度揭示金属材料的损伤过程, 并且可以直接测量相关物理量的变化, 例如温度、拉应力、相变和孔洞演化等数据^[18–24], 有助于从根本上了解金属材料在高速冲击下的动态损伤机制. 利用分子动力学模拟, Mayer^[25] 对单晶铁在应变率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、单轴拉伸加载条件下的动态剪切与拉伸强度进行了研究, 结果表明位错的均匀成核不会导致剪切应力的松弛, 同时发现拉应力时程曲线中有两个峰值出现, Mayer 认为拉应力的第一个峰值是由于位错成核导致的塑性变形而产生的, 第二个峰值是由孔洞成核与生长而产生的. Rawat 和 Raole^[19] 分析了应变率为 1.5×10^8 – $1.5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 、三轴拉伸加载条件下单晶铁中的孔洞演化情况, 结果表明在高应变率下孔洞更容易成核, 但孔洞在较低的应变率下有更快的生长速度. Shao 等^[26] 研究了应变率为 $2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、压缩加载条件下温度和预置空洞对单晶铁中结构变化的影响, 结果表明在相变过程中密排六方结构 (hexagonal close packed crystal structure, HCP) 相的剪切应力总是低于体心立方结构 (body-centered cubic crystal structure, BCC) 相的剪切应力. 马文等^[27] 对冲击压缩条件下纳米多晶铁的相变过程进行了研究, 结果表明晶粒尺寸对晶界变形及相变原子比例有显著影响. 分子动力学模拟的结果也可以为理论模型提供参数, Sugandhi 等^[28] 通过粒子群优化算法从分子动力学模拟的结果中获得 NAG 模型的最佳拟合参数.

Rawat 等^[29] 采用分子动力学方法研究了不同温度下单晶铜在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率下的动态损伤情况, 结果表明温度对单晶铜中孔洞成核与生长有显著影响, 同时对 NAG 模型在微观尺度的适用性进行了分析. 目前已经进行的关于铁的动态损伤研究中, 已有关于不同应变率、相变、晶粒尺寸等因

素的研究, 但在高应变率下温度的影响尚少有涉及, 并且 NAG 模型在微观上能否描述单晶铁的动态损伤过程的研究也比较少. 因此, 本文使用分子动力学模拟方法, 建立了单晶铁的三轴拉伸模型, 该模型广泛应用于研究金属材料在高应变率下的动态损伤中^[30–32]. 本文分析了温度对单晶铁在高应变率下孔洞成核与生长的影响, 并探讨了 NAG 模型在单晶铁中的适用性. 研究结果可为建立高应变率下金属材料动态损伤演化模型提供参考.

2 分子动力学模型

本文采用 Mendeleev 等^[33] 提出的嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 描述单晶铁原子间相互作用, 该势函数广泛应用于高应变率下单晶铁的分子动力学模拟研究中^[34,35]. 分子动力学模拟采用 Lammmps 软件^[36] 进行, 首先建立单晶铁的分子动力学模型, 模型尺寸为 $28.55 \text{ nm} \times 28.55 \text{ nm} \times 28.55 \text{ nm}$, 模型 x , y 和 z 坐标分别沿 $[100]$, $[010]$, $[001]$ 方向, 模型共包含 2×10^6 个原子, 如图 1 所示. 在 3 个方向施加周期性边界条件, 在加载之前采用 NPT 系综对模拟系统进行充分弛豫 (30 ps), 以确保模拟系统在加载前达到指定温度的平衡状态, 其控制温度分别为 100, 300, 500, 700, 900, 1100 K. 弛豫结束后, 使用速度标定法控制温度, 采用 NVE 系综并在 x , y 和 z 坐标轴方向施加相等的应变率 $\dot{\epsilon}_{xx} = \dot{\epsilon}_{yy} = \dot{\epsilon}_{zz} = 5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, 使系统处于三轴拉伸状态.

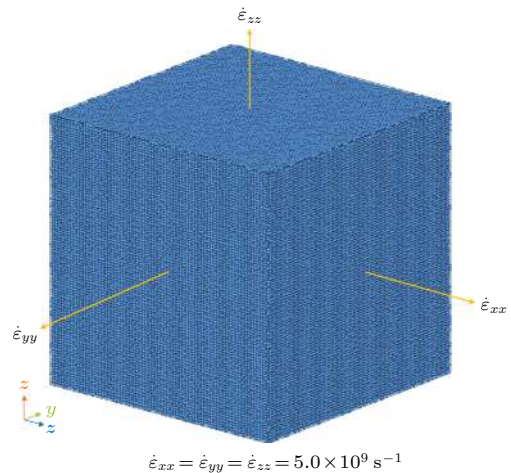


图 1 单晶铁三轴拉伸模型

Fig. 1. Model of single crystal iron under triaxial tension (atoms are colored by CNA).

使用 Ovito 软件^[37]对分子动力学模拟结果进行可视化分析,采用 Python 语言编写的程序进行孔洞体积分析,其基本思想是将整个模拟区域划分为小的立体方格并计算空方格的个数,然后统计在任意时刻的空方格数量来计算孔洞体积,这种孔洞体积统计方法已被用于计算 BCC 晶体与面心立方结构 (face-centered cubic crystal structure, FCC) 晶体的孔洞体积分析中^[29,32,38];模型内部结构变化使用位错分析 (dislocation analysis, DXA)^[39]、径向分布函数 (radial distribution function, RDF) 分析与共邻分析 (common neighbor analysis, CNA)^[40]等方法来进行;使用基于 C 语言编写的改进遗传算法程序确定 NAG 模型最佳拟合参数。

3 计算结果与讨论

本节讨论了在应变率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、三轴拉伸加载下单晶铁在 100—1100 K 温度下的动态响应.分析了温度对拉应力、孔洞体积分数、系统势能的影响,对拉应力在不同温度下的变化特点进行了探讨,同时还讨论了 NAG 模型在高应变率下单晶铁孔洞成核与生长的适用性问题,确定了 NAG 模型的最佳拟合参数,并分析了温度对 NAG 模型参数的影响。

3.1 温度对拉应力的影响

通过分子动力学模拟计算了单晶铁在 100—1100 K 温度下拉应力随时间变化情况,拉应力时程曲线见图 2. 分子动力学模拟得到单晶铁在 300 K 温度下最大拉应力约为 18.3 GPa, Mayer^[25]研究单晶铁在应变率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、单轴拉伸下得到的最大拉应力约为 17.6 GPa, Ashitkov 等^[13]在铁 (样品厚度为 50 mm) 的层裂实验中测得的最大拉应力为 17.8—20.3 GPa. 从图 2 可以看出,在 100—700 K 温度下,拉应力时程曲线有两个峰值出现,而在 900—1100 K 温度下拉应力时程曲线只有单峰值出现。

100—1100 K 温度下拉应力峰值如图 3 所示.从图 3 可以看出,随着温度的升高,拉应力峰值逐渐降低,最大拉应力为 100 K 时的 21.4 GPa,最小拉应力为 1100 K 时的 13.7 GPa,降低幅度为 35.9%,表明温度对单晶铁的拉应力峰值有明显的影响,相对而言,应变率的变化对单晶铁的拉应力峰值的影响并不明显^[19]。

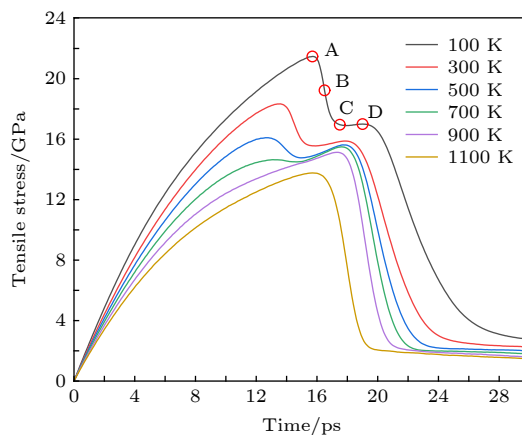


图 2 100—1100 K 温度下拉应力随时间的变化
Fig. 2. Tensile stress as a function of time at 100–1100 K.

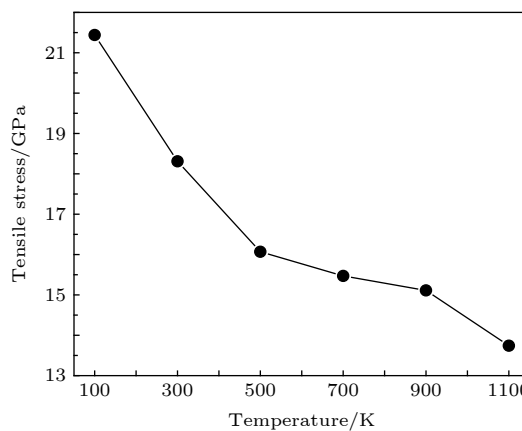


图 3 拉应力峰值随温度的变化
Fig. 3. Relationship of peak pressure and temperature.

双拉应力峰值时程曲线以 100 K 温度为例,从图 2 可以看出,拉应力随时间持续增长,在 15.7 ps 时出现第一个峰值 (约为 21.4 GPa) 后开始下降,在 16.5 ps 时,拉应力停止降低,随后有所增长 (约增长 0.03 GPa), 19.1 ps 时达到第二个峰值 (约为 16.9 GPa), 19.1 ps 之后,由于孔洞成核与生长,拉应力快速下降.在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、单轴拉伸下对单晶铁的研究中, Mayer^[25]也观察到拉应力时程曲线的双峰值现象,认为第一个拉应力峰值内结构发生塑性变形,第二个拉应力峰值内孔洞成核.双拉应力峰值时程曲线不仅在 BCC 结构的单晶铁中出现,在 FCC 结构的单晶铜中也观察到类似现象, Rawat 等^[29]在单晶铜的三轴拉伸分子动力学模拟中观察到单晶铜在 1250 K 温度下 (接近铜的熔点) 拉应力时程曲线有两个峰值出现, Rawat 认为拉应力的第一个峰值是由于发生了相变,第二个峰值是由于孔洞成核与生长,这说明

Mayer 与 Rawat 等对拉应力时程曲线的双峰研究结果一致. 不同的是, FCC 结构的单晶铜在 1250 K 温度下出现拉应力双峰值现象, 而 BCC 结构的单晶铁是在 100—700 K 温度下出现, 这表明在三轴拉伸下温度对 BCC 和 FCC 晶体结构的微观损伤演化的影响是不同的.

为探究拉应力时程曲线出现双峰值的原因, 对模拟结果进行了如下分析: 1) 分析拉应力时程曲线与孔洞体积分数关系, 即确认孔洞的成核阈值与成核时间; 2) 通过 DXA, 辨别塑性变形发生时间; 3) 借助晶体结构分析, 利用 RDF 分析和 CNA 方法来分析结构变化. 为便于对比分析, 在图 2 中以 100 K 温度为代表标示出了拉应力双峰值之间的四个特征点, 分别为: 第一个峰值点 (A 点)、第一个峰值后拉应力快速下降点 (B 点), 第一个峰值点后拉应力再次增长点 (C 点)、第二个峰值点 (D 点), 100—700 K 温度下四个特征点时间如表 1 所列.

表 1 100—700 K 温度下四个特征点时间
Table 1. Four characteristic points time at 100—700 K.

温度/K	时间/ps			
	A	B	C	D
100	15.7	16.5	17.5	19.1
300	13.4	14.5	15.4	17.9
500	12.6	13.8	14.9	17.7
700	13.1	13.9	14.6	17.6

从表 1 可以看出, 在 100—500 K 温度下, 第一个拉应力峰值出现的时间逐渐提前, 500 K 温度下第一个拉应力峰值出现的时间比 100 K 温度下提前了 2.9 ps, 700 K 温度下第一个拉应力峰值出现时间较 500 K 温度下有所延后, 但相差不大, 仅为 0.5 ps; 100—700 K 温度下拉应力再次增长的时间以及第二个拉应力峰值出现的时间随温度的升高逐渐提前, 700 K 温度下拉应力第二个峰值较 100 K 温度下提前了 1.5 ps.

3.2 温度对孔洞体积分数的影响

图 4 给出了 100—1100 K 温度下孔洞体积分数随时间的变化. 从图 4 可以看出, 尽管 100—700 K 与 900—1100 K 温度下拉应力时程曲线有不同的特点, 但是孔洞体积分数随时间的变化趋势

基本相同, 随着温度的升高, 孔洞出现的时间提前, 孔洞体积分数增长速率有所加快, 100—1100 K 温度下孔洞体积分数在 30 ps 时基本相同, 约为 29%. 100—1100 K 温度下孔洞成核时间如图 5 所示, 从图 5 可以看出, 1100 K 温度下孔洞成核时间是 12.8 ps, 100 K 温度下孔洞成核时间为 17.4 ps, 1100 K 温度下孔洞成核时间比 100 K 温度下提前了 26.4%, 这表明温度对孔洞成核时间有显著影响, 孔洞成核时间随温度升高而逐渐提前. 图 6 给出了体积分数为 0.1 时, 100—1100 K 温度下系统内部孔洞分布情况. 从图 6 可以看出, 系统内部的孔洞总体积是多个孔洞的成核、生长和贯穿累积而来, 1100 K 温度下孔洞数量明显高于 100 K 温度, 这表明随着温度的升高系统内部孔洞成核数量更多, 导致孔洞体积分数增长速率随温度升高而加快.

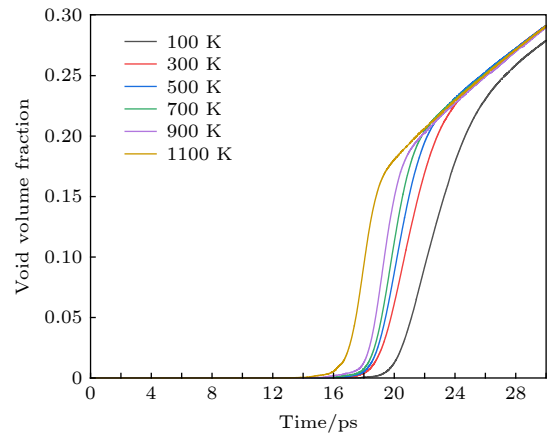


图 4 100—1100 K 温度下孔洞体积分数随时间的变化
Fig. 4. Void volume fraction as a function of time at 100—1100 K.

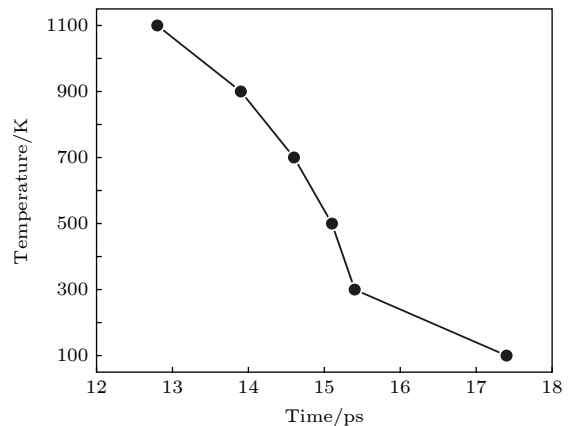


图 5 100—1100 K 温度下孔洞成核时间
Fig. 5. Void nucleation time at 100—1100 K.

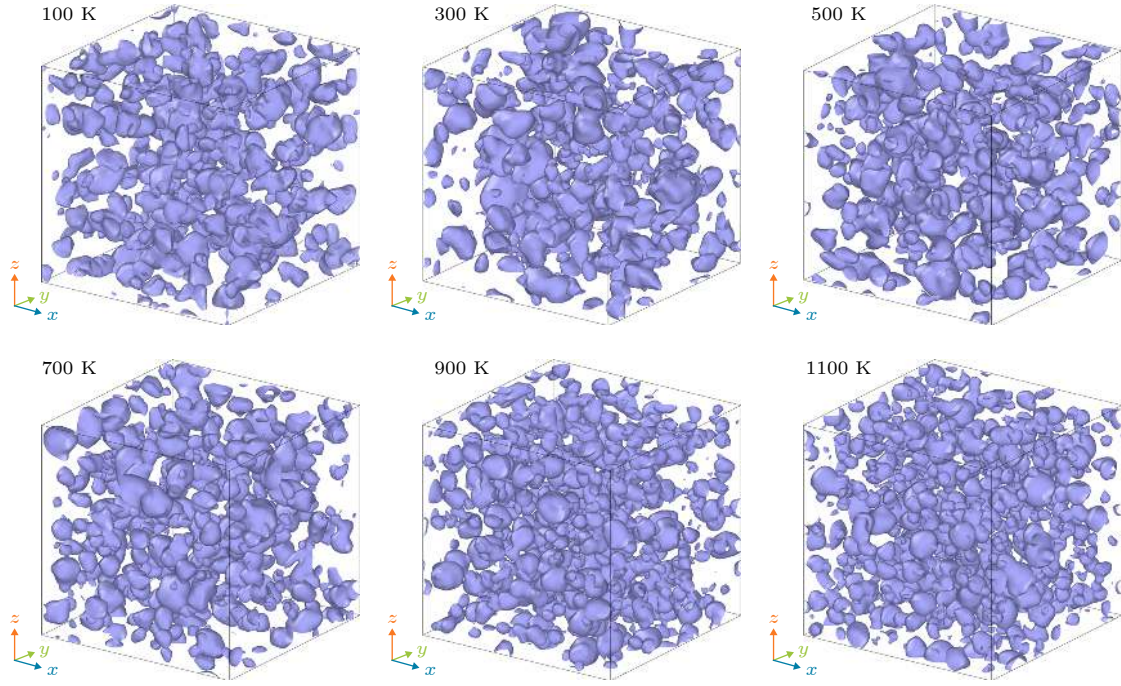


图 6 100—1100 K 温度下内部孔洞分布 (孔洞体积分数为 0.1 时)

Fig. 6. Distribution of voids at 100–1100 K (void volume fraction is 0.1).

图 7 给出了孔洞体积分数随时间的变化情况, 并与拉应力时程曲线进行了对比, 图中虚线对应孔洞成核的时间 (以 t_n 表示), 孔洞成核后体积分数开始增长. 从图 7 可以看出, 拉应力时程曲线在特征点 C 之前孔洞体积分数一直保持为 0; 在特征点 C 附近, 孔洞成核, 孔洞体积分数开始增长, 但增长速度较慢, 直到特征点 D 之后, 增长速率才明显加快. 图 8 给出了 100—700 K 温度下拉应力时程曲线特征点 D 出现, 即孔洞没有成核; 在第一个峰值之后, 拉应力下降到特征点 C 附近时的孔洞分布情况, 可以看出系统内部有明显的孔洞产生. 因此, 100—700 K 温度下拉应力达到第一个峰值时没有孔洞出现, 孔洞开始成核, 之后孔洞体积分数持续增长.

100—1100 K 温度下孔洞体积分数的发展可以分为 3 个阶段, 以 900 和 1100 K 为例进行说明, 如图 7 所示. 从图 7 可以看出, 孔洞体积分数增长可以分为 3 个阶段.

1) 初始增长阶段 (S1), 与 100—700 K 温度下相同, 在拉应力达到峰值之前已有孔洞成核, 此时孔洞体积增长主要是孔洞成核带来, 初始增长阶段孔洞体积分数增长缓慢, 表明孔洞还未开始大规模生长, 直到拉应力时程曲线峰值拐点之前. 从图 5 可以看出, 随着温度的升高 S1 阶段逐渐提前,

1100 K 比 100 K 温度下孔洞出现时间提前了约 4.6 ps, 这表明孔洞在高温下更容易成核.

2) 快速增长阶段 (S2), 当孔洞体积分数达到 0.01 后, 成核孔洞开始快速生长, 是孔洞体积分数迅速升高的主要原因. S2 阶段孔洞体积分数增长速率最快, 孔洞体积分数变化趋势与指数函数特点相似. 通过与拉应力时程曲线的对比, 可以发现孔洞体积分数快速增长与拉应力时程曲线的快速下降对应, 表明孔洞体积分数的快速增长导致了拉应力的快速下降. 1100 K 温度下 S2 阶段持续时间约为 3 ps, 100 K 温度下 S2 阶段约为 7.5 ps, 二者相差 2.5 倍, 这表明高温下孔洞生长的速度更快, 这也导致了高温下拉应力下降速率更快.

3) 线性增长阶段 (S3), 此时孔洞生长减慢, 孔洞贯穿带来体积增长, 增长速率适中, 在 30 ps 时不同温度下孔洞体积分数数值相差不大, 约为 29%. 这表明单晶铁在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率三轴拉伸下, 温度对最终孔洞体积分数的影响并不明显, 这与应变率对孔洞体积分数的影响不同^[19].

3.3 位错分析

孔洞体积分数分析表明拉应力时程曲线的特征点 C 附近孔洞开始成核与生长, 拉应力时程曲线第一峰值内没有孔洞出现. 使用 Ovito 软件对分

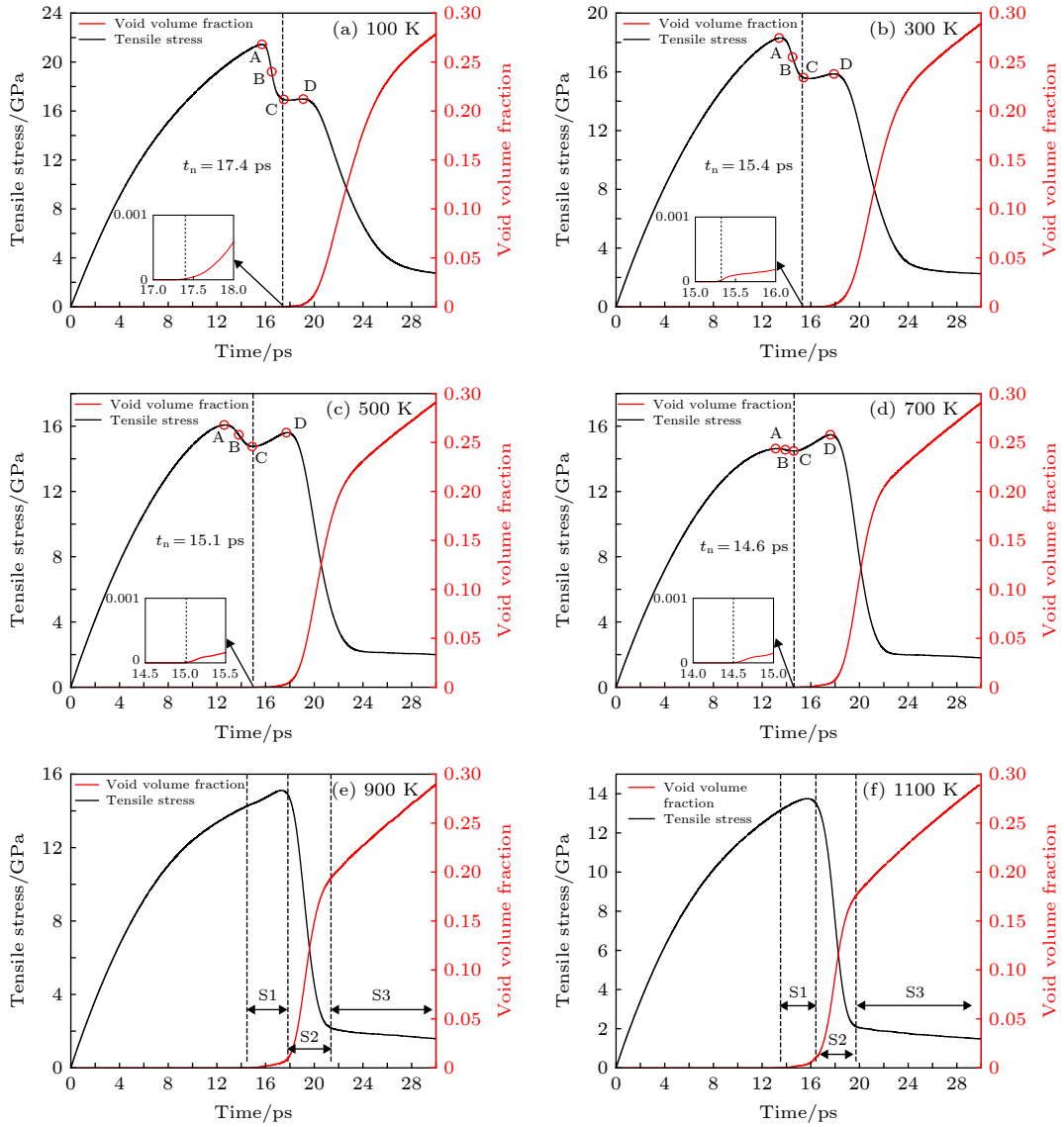


图 7 100—1100 K 温度下空洞体积分数与拉应力的关系 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K
 Fig. 7. Void volume fraction as a function of time at 100–700 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

子动力学模拟结果进行了 DXA, 图 9 给出了 100—1100 K 温度下位错密度随时间的变化情况, 图中时间轴上的标记点 (红色圆点) 是拉应力时程曲线峰值出现的时间, 在 100—700 K 温度下是第二个峰值出现的时间.

DXA 表明, 单晶铁在应变率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、三轴拉伸加载下有三种类型位错出现: $1/2\langle 111 \rangle$ 位错、 $\langle 100 \rangle$ 位错、 $\langle 110 \rangle$ 位错, 这些位错类型在单晶铁及其合金的实验中都有观测到 [41]. 除了这三种类型的位错之外, 还有一部分无法识别的位错类型, 定义为其 (Others). 从图 9 可以看出, 在 100—1100 K 温度下, 单晶铁中 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错是最主要的位错类型, 占比最大, $\langle 100 \rangle$ 位错次之, 占比略高于其余两种位错类型. 100 K 温度下位错密度在

21 ps 开始增长, 300—900 K 温度下位错密度在 20 ps 开始增长, 1100 K 温度下位错密度在 18 ps 开始增长. 1100 K 温度下位错出现时间比 100 K 温度提前了 3 ps 左右, 这表明温度的升高使位错出现的时间有所提前. 通过与拉应力时程曲线的对比分析, 可以发现位错密度增长时间比拉应力时程曲线峰值 (100—700 K 拉应力第二个峰值) 出现时间滞后 2—3 ps 左右. 对于 100—700 K 温度下拉应力时程曲线, 位错密度开始增长的时间位于拉应力时程曲线第二个峰值拐点之后, 此时拉应力开始快速下降, 这表明拉应力时程曲线中第一个峰值内没有出现因位错而引起的塑性变形, 这与 Mayer [25] 的结论不同. Rawat 等 [29] 在单晶铜的三轴拉伸分子动力学模拟中认为拉应力时程曲线

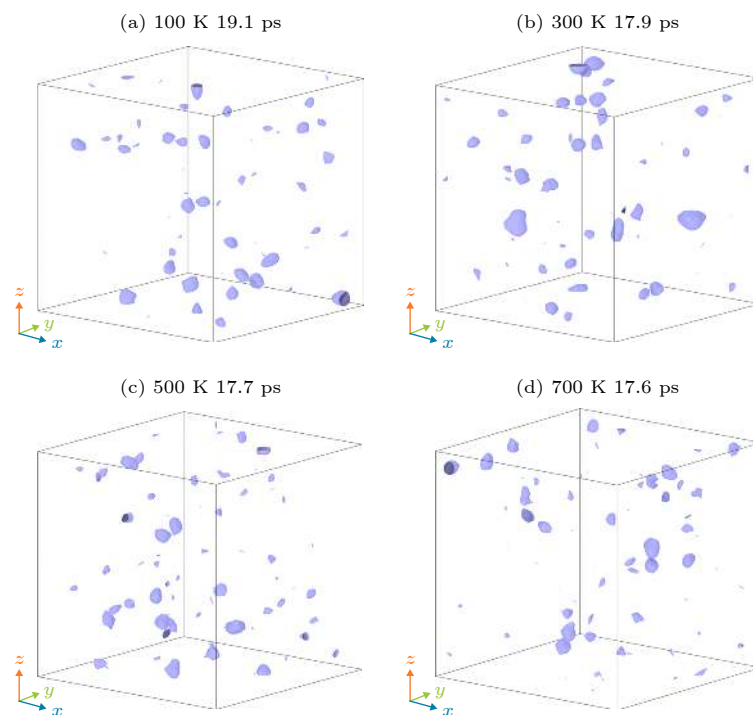


图 8 100—700 K 温度下拉应力时程曲线第二峰值点孔洞分布

Fig. 8. Void distribution on the second-peak of tensile stress at 100–700 K.

第一个峰值内发生了相变,为了探讨拉应力时程曲线第一个峰值内是否发生了相变,对分子动力学模拟结果进行了 RDF 分析和 CNA.

3.4 径向分布函数分析

径向分布函数通过给定某个粒子的坐标,计算其他粒子在空间的分布概率随距离变化情况,常用于研究物质内部的有序性.晶体具有规则的周期性结构,原子在其晶格位置附近波动,由于晶体有序的结构,径向分布函数有长程的峰,在晶体结构转变或被破坏后,长程的峰消失,因此可以用径向分布函数来反应模拟体系内部晶体结构变化.使用 Ovito 软件计算了 100—1100 K 温度下整个系统 RDF 变化情况,100—700 K 温度下选取了 0 ps、拉应力时程曲线的四个特征点对应时间,900—1100 K 温度下选取了 0 ps、孔洞成核时间、拉应力峰值时间以及拉应力峰值后 1 ps,如图 10 所示.可以看出,在 100—700 K 温度下 0 ps 时系统内部长程有序,远距离处依然有较明显的曲线波动,在拉应力时程曲线第一个峰值时远距离处的曲线波动开始减弱;特征点 B 过后,远距离的曲线波动基本消失,只有近距离内出现明显的曲线波动,系统内部长程有序消失.在 900—1100 K 温度下,0 ps 时系统内部长程有序,孔洞成核使系统内部长程有

序减弱,在拉应力达到峰值后,内部长程有序完全消失.

RDF 分析表明,100—700 K 温度下拉应力达到第一个峰值后系统内部长程有序开始消失,表明在拉应力达到第一个峰值后系统内部发生了结构改变;在 900—1100 K 温度下,孔洞成核引起系统内部长程有序消失.

3.5 共邻分析

RDF 分析表明,拉应力时程曲线的第一个峰值内系统内部可能发生了相变,使用 Ovito 软件中的自适应共邻分析方法,对系统的晶体结构变化进行了分析.图 11 给出了 100—1100 K 温度下系统内部晶体结构变化情况,图中 FCC 代表面心立方结构、BCC 代表体心立方结构、HCP 代表密排六方结构、Other 代表未知结构.100—700 K 温度下选取拉应力时程曲线的四个特征点对应的的时间,900—1100 K 温度下选取孔洞成核时间与拉应力峰值时间,将模型中间进行切片观察,切片厚度为 5 Å,图中使用黑色圆圈将内部孔洞标示出来.

从图 11 可以看出:在 100—700 K 温度下拉应力达到第一个峰值时,系统内部出现 FCC, HCP 和未知结构,随着拉应力的降低, FCC, HCP 和未知结构数量逐渐增多;在拉应力达到特

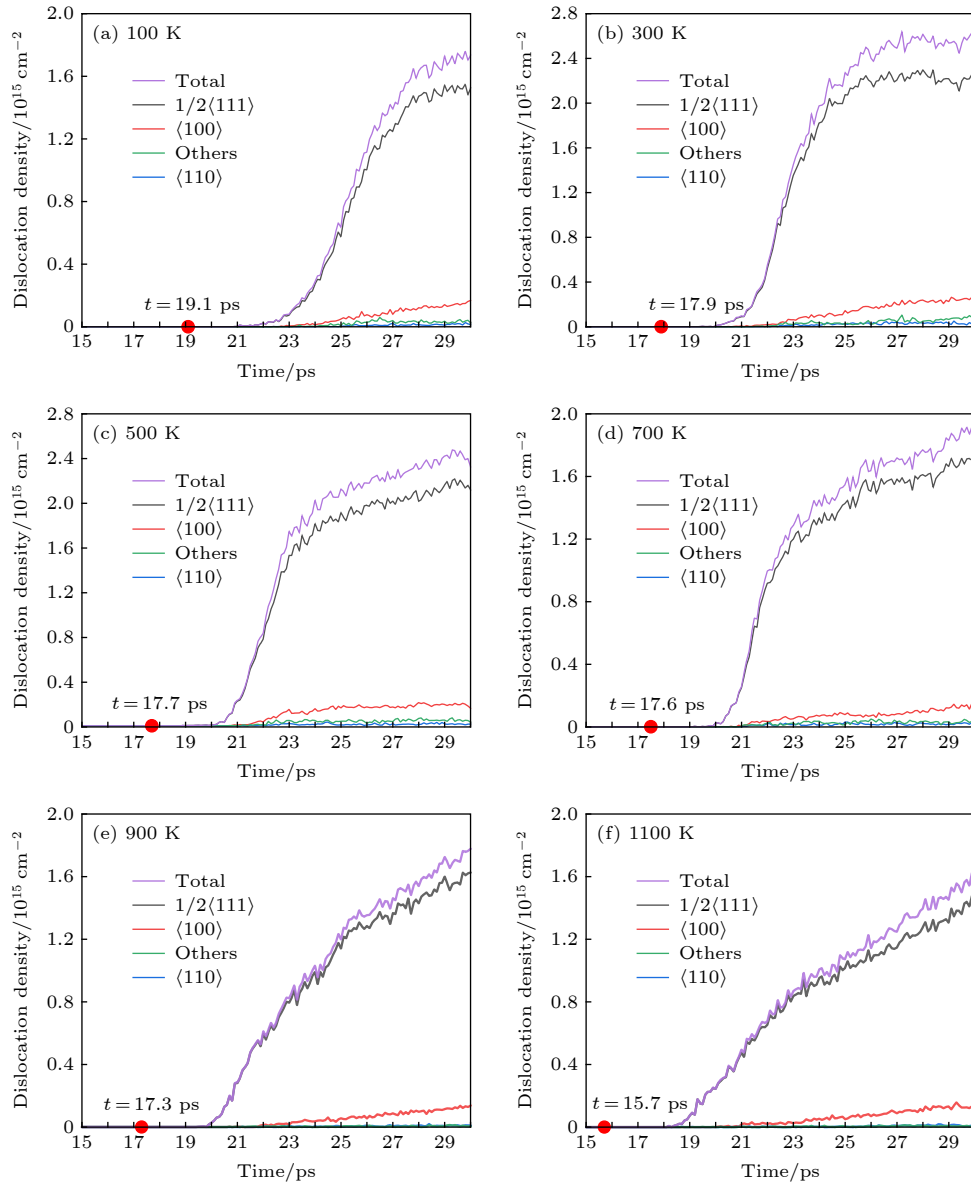


图 9 100—1100 K 温度下位错密度变化情况 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K

Fig. 9. Evolution of dislocation density as a function of time at 100–1100 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

征点 C 时, 大部分 BCC 结构已经转变为 FCC, HCP 和未知结构, 只有少量 BCC 结构留存; 在拉应力达到第二个峰值时, 可以观察到多个孔洞出现, 孔洞被未知结构包围. RDF 分析表明, 拉应力时程曲线的第一个峰值内系统内部发生了相变, BCC 结构转变为 FCC, HCP 和未知结构, 没有孔洞出现; 在第二个峰值时, 只有少量 BCC 结构留存, 孔洞在未知结构区域内成核. 在 900—1100 K 温度下系统内部未知结构数量增多, FCC 结构数量有所减少, 特别是在 1100 K 温度下, 系统内部出现大量的未知结构, 在拉应力达到峰值时可以看到明显的孔洞出现, 孔洞被未知结构包围. 在铁纳

米管和纳米晶体铁的单轴拉伸分子动力学模拟中也出现了 BCC 结构到 HCP 结构的相变出现^[42,43]. 本文中出现的 BCC 结构到 HCP 结构的转变可能是 α - ϵ 相变, 在铁的冲击加载实验和分子动力学模拟中都有观察到^[44–47].

图 11 定性地给出了系统内部结构变化情况, 为定量地描述系统的结构变化, 计算了 100—1100 K 温度下 FCC, BCC, HCP 和未知结构随时间的变化情况, 如图 12 所示. 从图 12 可以看出, BCC 结构首先转变为未知结构, 在拉应力时程曲线达到第一个峰值后, FCC, HCP 结构开始出现; FCC, HCP 结构在拉应力时程曲线达到第二个峰值后占

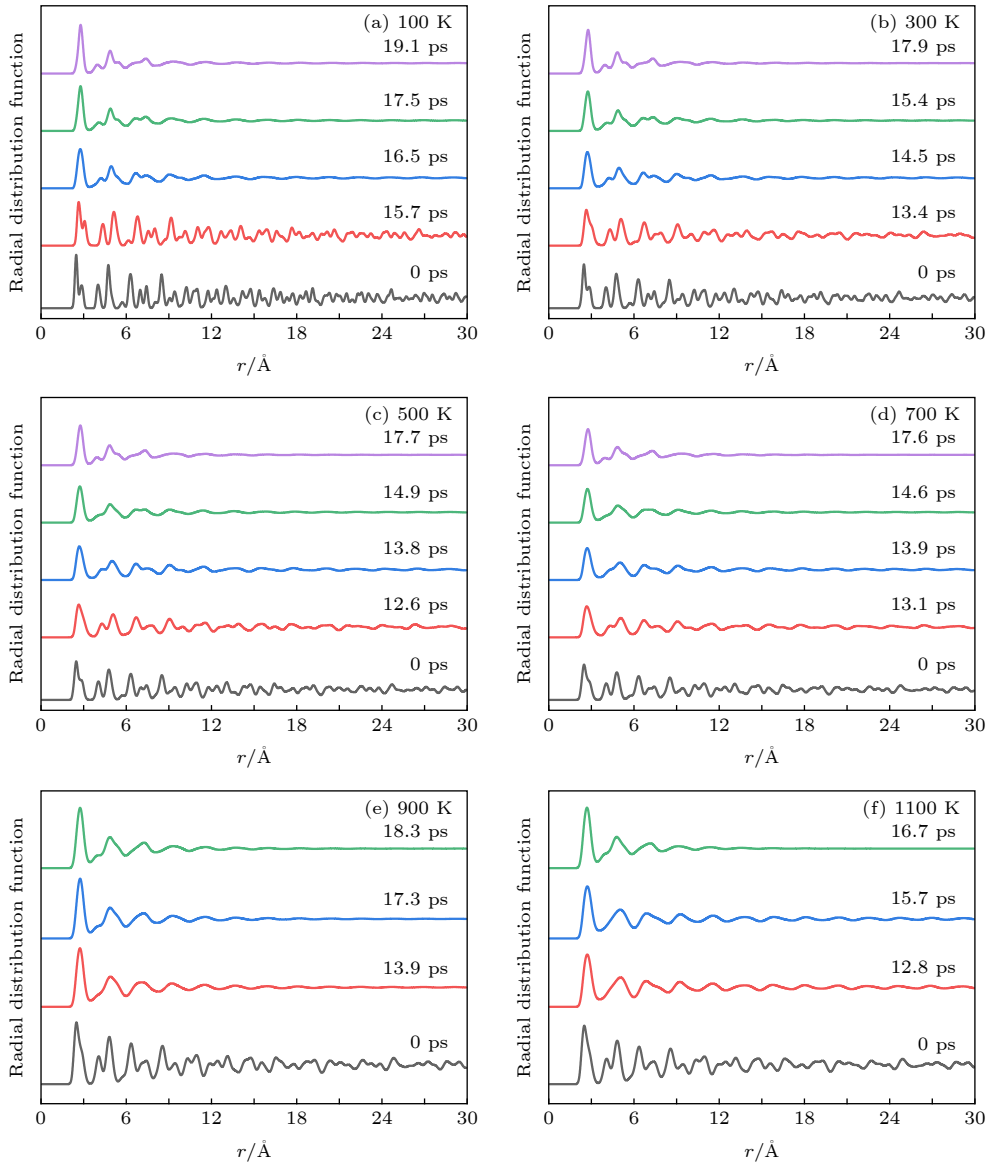


图 10 100—1100 K 温度下径向分布函数变化情况 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K

Fig. 10. Radial distribution function of the system at 100–1100 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

比达到最大. 在 100—300 K 温度下, 二者占比约为 30%, 随着温度的升高, FCC 结构占比下降, 500 K 时占比约为 25%, 700 K 时占比约为 20%; BCC 结构占比最低点出现在 FCC, HCP 占比峰值之后, 100 K 时约为 10%, 并且随着温度的升高 BCC 结构占比逐渐降低, 900 K 温度下约为 2%. 从图 7 可以看出孔洞体积分数在第二个拉应力峰值后开始快速增长, 对比图 12 结构占比变化, 可以发现孔洞体积的快速增长导致 FCC, HCP 结构占比降低, BCC 结构占比再次升高, 引起这种变化的机理将在以后的文章中进行进一步的分析.

对 100—700 K 温度下拉应力时程曲线的分析

表明系统内部首先发生了相变, 随后孔洞成核与生长, 但是随着温度的升高, 在 900—1100 K 温度下拉应力时程曲线只有一个峰值出现. 从图 12 可以看出, 在孔洞成核之前系统内部已经发生相变, FCC, HCP 结构占比已经开始增长, 但与 100—700 K 温度下不同的是, BCC 到 FCC, HCP 的相变并未导致拉应力的降低, 原因可能是 FCC, HCP 相变发生的时间与孔洞成核的时间非常接近, 孔洞成核时 FCC, HCP 相变的数量非常少, 因此由 FCC, HCP 相变引起的拉应力降低幅度很小, 拉应力只出现一个峰值. 结合图 7 孔洞体积分数变化情况, 在拉应力达到峰值后孔洞体积分数开始快

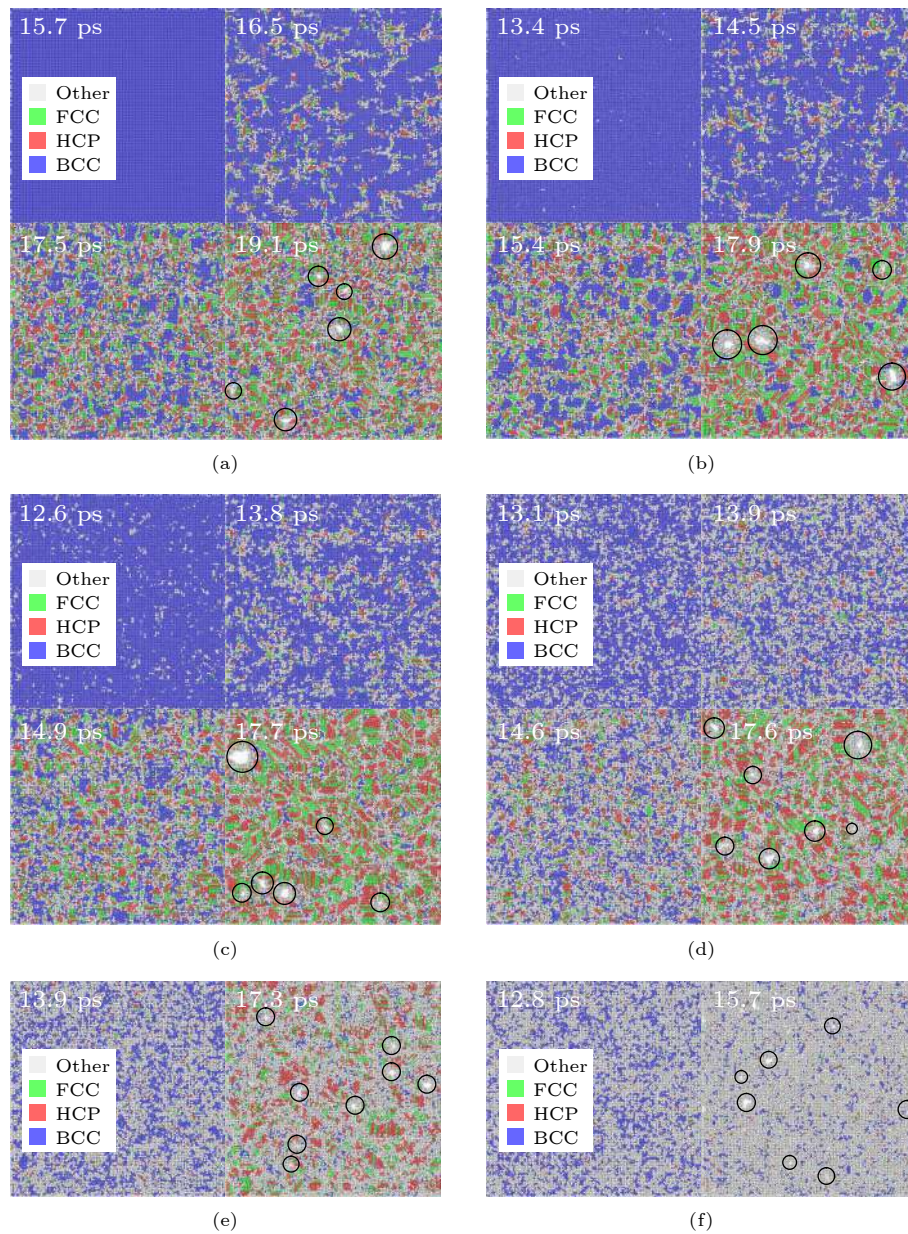


图 11 100—1100 K 温度下内部结构变化 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K

Fig. 11. Snapshots for the structural changes at 100–1100 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

速增长, 这表明孔洞成核与生长是导致 900—1100 K 温度下拉应力降低的主要原因^[30,48]. 因此, 在 100—700 K 温度下, 拉应力下降的原因首先是系统内部发生相变, BCC 结构向 FCC, HCP 和未知结构转变, 然后是孔洞成核与生长; 在 900—1100 K 温度下, 孔洞成核与生长是导致拉应力下降的主要原因.

为了对比初始 BCC 结构与重生成的 BCC 结构之间的区别, 选取模型中部进行切片观察, 为了能够更加明显地辨识孪晶结构, 选择切片厚度为 2 Å. 图 13 给出了 300 K 温度下系统内部结构变化情况, 红色箭头标示出孪晶出现的区域. 从图 13 可以看出, FCC 和 HCP 结构在拉应力第二个峰值

之后转变为 BCC 结构, 孔洞被未知结构包围, 当孔洞周围的未知结构原子随着孔洞生长而移动时, 导致原本属于 FCC 和 HCP 结构的原子重新排列, 再次产生 BCC 结构. 对比 24, 30 和 0 ps 时的 BCC 结构, 可以发现重新生成的 BCC 结构与初始 BCC 结构并不相同, 重新出现的 BCC 结构可能是变形孪晶的结果^[49], 与 BCC 结构 Mo 和 BCC 结构 Ta 的孔洞生长分子动力学模拟中出现的变形孪晶情形相似^[50].

通过孔洞体积分数, DXA, RDF, CNA 等分析方法对分子动力学模拟结果进行了分析, 结果表明拉应力时程曲线的第一个峰值内系统内部发生

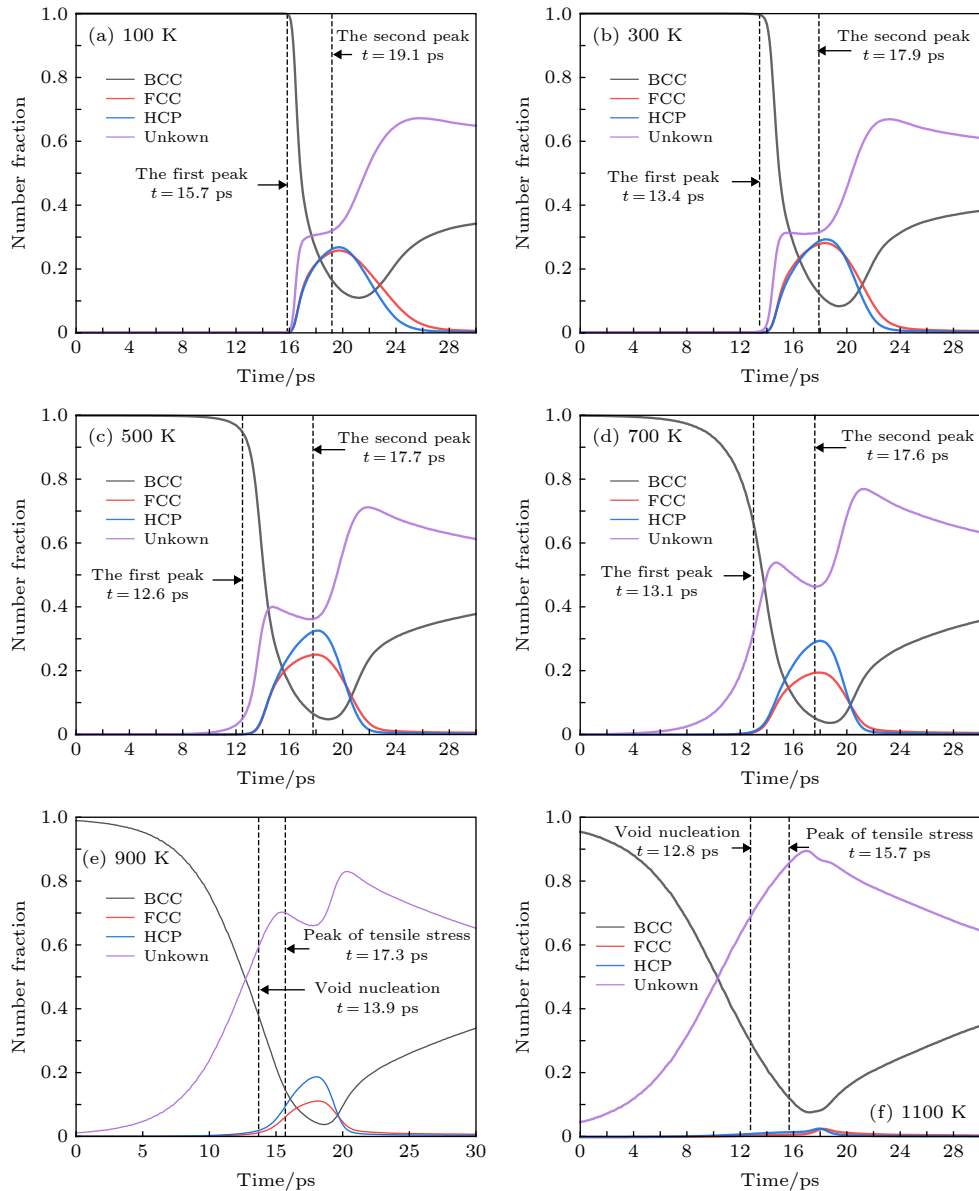


图 12 100—1100 K 温度下内部晶体结构占比 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K

Fig. 12. Crystal structure fraction as a function of time at 100–1100 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

了相变, 单晶铁原有的 BCC 结构转变为 FCC, HCP 和未知结构, 没有出现位错引起的塑性变形; 在拉应力时程曲线的第二个峰值内孔洞开始成核与生长, 孔洞体积的快速增长使 FCC 和 HCP 结构占比降低, 孔洞的生长导致 BCC 结构重新产生, 但与初始的 BCC 结构不同, 新出现的 BCC 结构可能是变形孪晶的结果。

3.6 温度对原子键能及系统势能的影响

图 14 是铁原子键能在不同体系温度下的变化情况, 图中 ϵ 是摩尔键能, 单位 kJ/mol, 摩尔键能的计算参照 Eberhart 和 Horner^[51] 的文章提出的

方法, 计算时间点为 0 ps, 即模拟体系充分弛豫后的时刻, 计算所需数据来自美国国家标准与技术研究院 (NIST)^[52]. 从图 14 可以看出, 铁原子键能在 100 K 时为 104.68 kJ/mol, 随着模拟体系温度的升高, 铁原子键能逐渐降低, 在 1100 K 时铁原子键能为 93.99 kJ/mol, 降低幅度为 10.21%. 这表明温度的升高显著影响了铁原子键能, 在高温下铁原子键能明显降低。

图 15 是不同温度下系统势能随时间变化情况. 从图 15 可以看出, 系统总势能随着温度的升高而增加. 在 100—700 K 温度下, 拉应力时程曲线第一个峰值 (图中红色圆圈标示) 导致系统势能

减小, 但幅度不大, 并且随着温度升高这种影响越来越低, 此时系统内部并未有孔洞成核, 是相变引

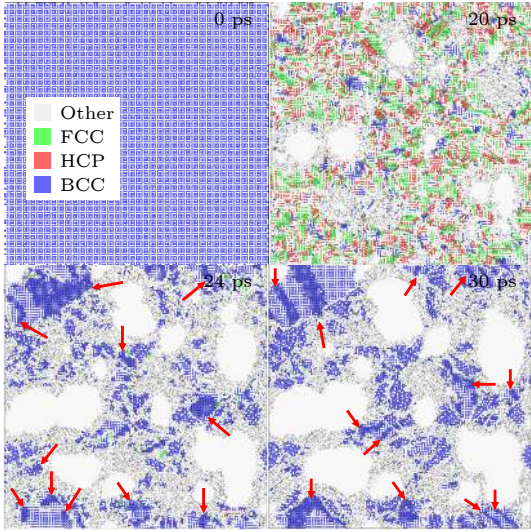


图 13 300 K 温度下系统内部结构变化

Fig. 13. Structural changes at different time at 300 K.

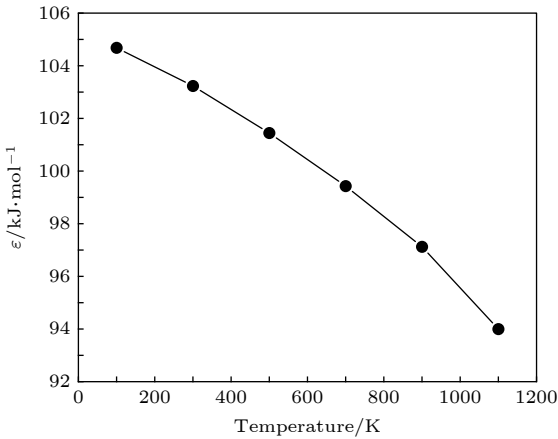


图 14 300—1100 K 温度下铁原子键能

Fig. 14. Bond energy of iron at 300–1100 K.

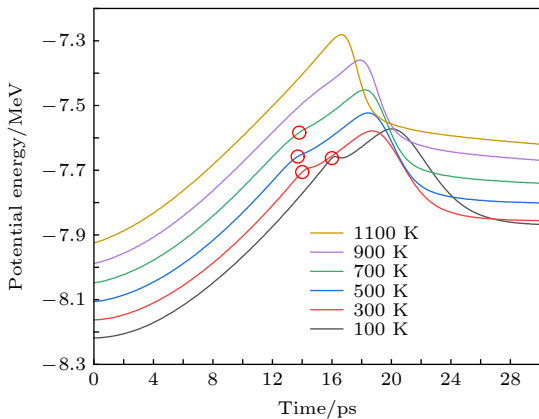


图 15 100—1100 K 温度下系统势能

Fig. 15. Potential energy of the system at 100–1100 K.

起的系统势能变化; 系统势能峰值出现在拉应力时程曲线第二个峰值拐点之后, 此时孔洞体积分数快速增长, 表明孔洞成核与生长引起势能降低. 在 900—1100 K 温度下, 系统势能随时间持续增长, 势能曲线的峰值出现在拉应力时程曲线拐点之后, 随后快速降低, 表明在高温下孔洞成核与生长是导致势能降低的主要原因. 当有孔洞成核时, 原子间的相互作用会变得更强烈, 同时键长缩短, 导致势能的快速下降.

3.7 NAG 模型

Curran 等^[3]和 Seaman 等^[53]通过对铝和铜等金属材料的研究, 揭示出其断裂是大量准球形空洞成核和生长的结果. 通过研究发现单位体积的孔洞数量以及孔洞体积与拉应力呈指数关系, 从而提出一种考虑微孔洞成核和生长效应的损伤模型——NAG 模型. NAG 模型是一种微细观物理模型, 主要用于描述金属材料中孔洞的成核和生长而发生的损伤过程. 通过 3.2 部分对孔洞体积的分析, 发现单晶铁在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率 100—1100 K 温度下孔洞体积非线性增长阶段与 NAG 模型相符合. 因此计算了 100—1100 K 温度下 NAG 模型参数并且分析了温度对 NAG 模型参数的影响.

3.7.1 NAG 模型介绍

孔洞的总体积由两部分组成: 孔洞成核体积和孔洞生长体积.

1) 孔洞成核体积

当材料中的拉应力 P_s 超过材料成核阈值 P_{n0} 时, 新的孔洞生成, 成核率按下式计算:

$$\dot{N} = \dot{N}_0 \exp\left(\frac{P_s - P_{n0}}{P_1}\right) \quad (P_s > P_{n0}), \quad (1)$$

$$\dot{N} = 0 \quad (P_s \leq P_{n0}), \quad (2)$$

式中, \dot{N}_0 为成核率阈值 (材料常数), P_1 为成核拉应力敏感系数 (材料常数), P_s 为拉应力.

在 Δt 时间间隔内孔洞成核体积由下式计算:

$$\Delta V_n = 8\pi \dot{N} \Delta t R_n^3, \quad (3)$$

式中 R_n 为形核尺寸参数. 在 NAG 模型的计算中, 形核尺寸参数 R_n 的值为 3.1 Å, 即 1.01 倍铁的晶格常数, 也是孔洞体积分析中立方体方格的尺寸.

2) 孔洞生长体积

当拉应力 P_s 超过孔洞生长阈值 P_{g0} 时, 成核的孔洞就会生长, 这时新的孔洞体积由下式计算:

$$V_g = V_{v0} \exp \left[\frac{3}{4} \left(\frac{P_s - P_{g0}}{\eta} \right) \Delta t \right], \quad (4)$$

式中, V_{v0} 为在每个时间间隔初始时的孔洞体积, η 为材料黏度, 在 Δt 时间间隔内孔洞成核与生长的总体积为

$$V_v = V_{v0} \exp \left[\frac{3}{4} \left(\frac{P_s - P_{g0}}{\eta} \right) \Delta t \right] + \Delta V_n. \quad (5)$$

每个数据点的相对误差 ϕ 定义如下:

$$\phi = 1 - \frac{V_{MD}}{V_{NAG}}, \quad (6)$$

式中, V_{MD} 为分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟中得到的孔洞体积分数, V_{NAG} 为 NAG

模型得到的孔洞体积分数.

相对平方误差 Σ 定义如下:

$$\Sigma = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \phi^2}, \quad (7)$$

式中 M 为数据点总数.

3.7.2 NAG 参数分析

对于任意给定的一组 NAG 参数, 在已知拉应力时程曲线的前提下, 可以得到孔洞总体积随时间变化的函数关系. 参数拟合采用基于改进遗传算法编写的 C 语言程序进行, 得到了 100—1100 K 温度下 NAG 模型拟合参数 (P_{n0} , P_1 , \dot{N}_0 , P_{g0} , η), 使

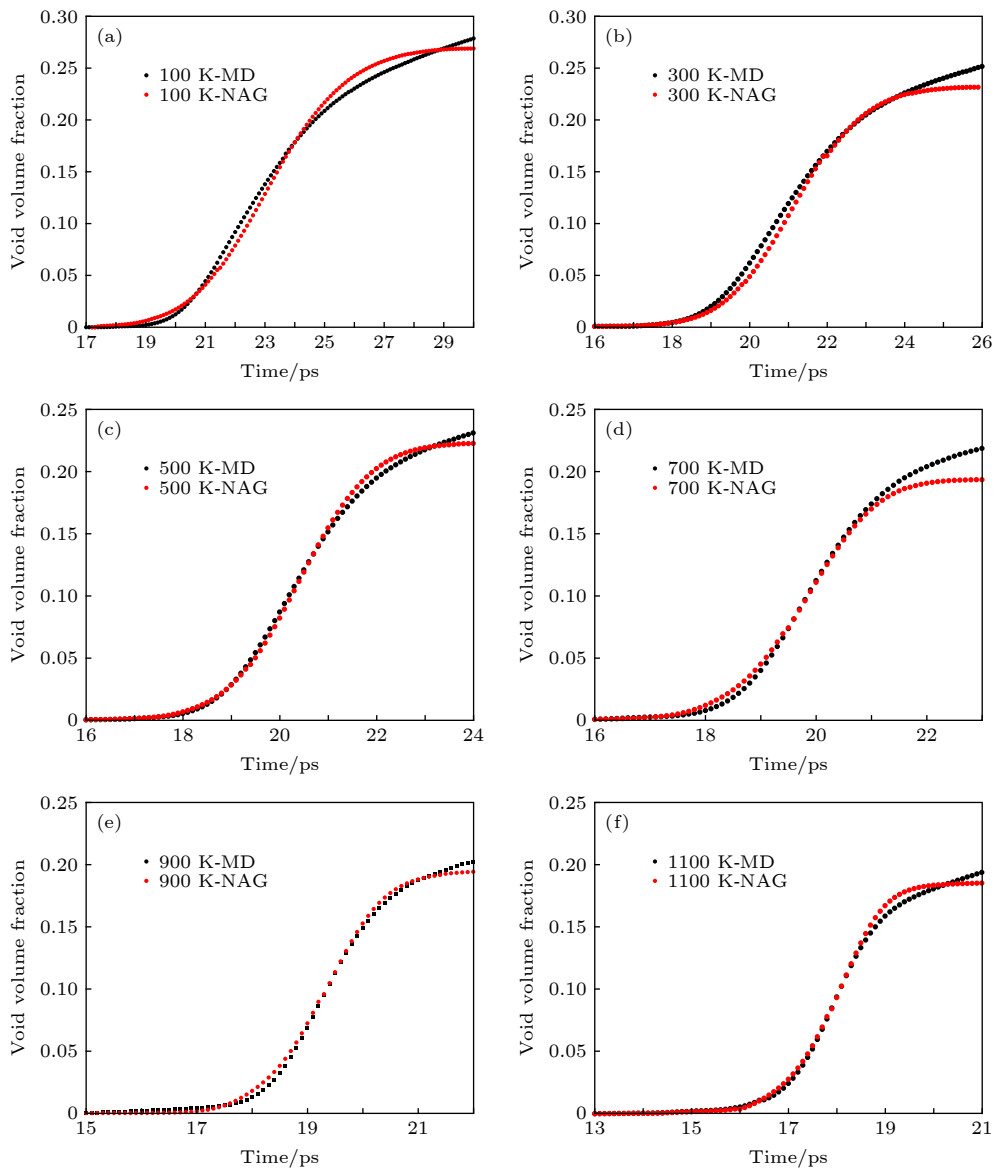


图 16 100—1100 K 温度下 NAG 与 MD 的孔洞体积分数结果的对比 (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K
 Fig. 16. Comparison of void volume fraction between the NAG model and MD at 100–1100 K: (a) 100 K; (b) 300 K; (c) 500 K; (d) 700 K; (e) 900 K; (f) 1100 K.

表 2 100—1100 K 温度下 NAG 模型最佳拟合参数
Table 2. Best-fit NAG parameters at 100–1100 K.

	P_{n0}/Pa	P_1/Pa	$\dot{N}_0/\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$	P_{g0}/Pa	$\eta/\text{Pa}\cdot\text{s}$	R_n/m	Σ
100 K	1.61×10^{10}	1.42×10^7	7.10×10^{15}	2.75×10^9	1.72×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.15
300 K	1.55×10^{10}	2.35×10^7	1.22×10^{15}	2.48×10^9	2.20×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.18
500 K	1.51×10^{10}	1.18×10^7	5.91×10^{14}	2.15×10^9	1.83×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.14
700 K	1.50×10^{10}	3.31×10^7	1.37×10^{16}	2.02×10^9	2.17×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.17
900 K	1.46×10^{10}	2.76×10^7	3.29×10^{15}	1.98×10^9	2.53×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.12
1100 K	1.33×10^{10}	1.87×10^7	1.88×10^{14}	1.95×10^9	2.11×10^{-1}	3.1×10^{-10}	0.17
低碳钢 ^[54]	1.12×10^9	1.0×10^8	2.5×10^{14}	2.0×10^8	2.778×10^2	3.0×10^{-5}	

用拟合得到的 NAG 模型参数计算了孔洞的体积分数变化情况, 并与 MD 模拟的结果进行了对比, 如图 16 所示. 从图 16 可以看出, 不同温度下单晶铁的孔洞体积分数变化与 NAG 模型符合较好.

除了与 MD 结果进行对比之外, 还将 100—1100 K 温度下 NAG 模型拟合参数 (P_{n0} , P_1 , \dot{N}_0 , P_{g0} , η) 与实验中得到的低碳钢 (mild steel) NAG 模型参数^[54]进行了对比, 详见表 2.

从表 2 可以看出:

1) 单晶铁的孔洞成核阈值 (P_{n0}) 远高于低碳钢中的成核阈值, 差距在 10 倍以上. 这是由于低碳钢是多晶结构, 存在大量的缺陷, 孔洞在晶界处更容易成核^[2], 而在单晶铁中不存在这些缺陷, 所以孔洞成核阈值更高.

2) 单晶铁的孔洞成核拉应力灵敏度系数 (P_1) 较低, 约为低碳钢的 20%, 这表明单晶铁中的成核速率对拉应力的敏感性比多晶材料的敏感性高得多.

3) 与低碳钢相比, 单晶铁的材料黏度 η 非常低, 相差约 1000 倍;

4) 随着温度的升高, 孔洞成核阈值 P_{n0} 和孔洞生长阈值 P_{g0} 都逐渐减小. 高温下, 原子运动更加剧烈, 加速了原子间相互分离的趋势, 导致孔洞成核与生长阈值降低;

5) 成核阈值与生长阈值的比值在单晶铁与低碳钢中相差不大, 单晶铁的成核阈值 P_{n0} 约为生长阈值 P_{g0} 的 6 倍, 低碳钢中成核阈值是生长阈值的 5 倍^[54].

4 结 论

本文使用分子动力学模拟方法, 研究了 100—1100 K 温度下单晶铁在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率三轴拉

伸加载的动态响应, 通过拉应力变化、孔洞体积分数以及微结构分析研究了单晶铁的动态响应以及温度效应的影响, 并且对 NAG 模型在高应变率下单晶铁中的适用性进行了探讨, 得到以下主要结论.

1) 在 100—700 K 温度下, 拉应力时程曲线出现两个峰值, 采用 DXA, RDF, CNA 和孔洞体积分数等方法对结果进行了分析. 分析表明, 100—700 K 温度下拉应力时程曲线的第一个峰值内系统内部发生了相变, 原有的 BCC 结构转变为 FCC, HCP 和未知结构, 在第一个峰值之后孔洞开始成核与生长. 在 900—1100 K 温度下, 拉应力时程曲线只有一个峰值出现, 孔洞成核与生长是导致拉应力下降的主要原因.

2) 随着温度的升高, 系统内部拉应力峰值降低, 最大拉应力为 100 K 时的 21.4 GPa, 最小拉应力为 1100 K 时的 13.7 GPa, 降低幅度为 35.9%; 系统总势能随温度升高而增加, BCC 结构转变为 FCC, HCP 和未知结构会导致系统势能降低, 但降幅不大, 孔洞快速生长是导致势能快速降低的主要原因.

3) 孔洞成核在发生 HCP, FCC 相变之后与拉应力达到峰值之前 (100—700 K 是拉应力时程曲线第二个峰值之前) 发生, 孔洞在未知结构区域内成核, 孔洞的生长推动周边原子的移动, 使 FCC 和 HCP 结构排列转变为新的 BCC 结构, 新产生的 BCC 结构不同于初始的 BCC 结构, 可能是变形孪晶的结果.

4) 孔洞体积分数的增长可以分为三个阶段, 第一阶段由孔洞成核主导, 此时孔洞体积分数增长较慢, 第二阶段由孔洞生长主导, 此时孔洞体积分数增长最快, 呈指数型增长, 第三阶段由孔洞贯穿主导, 此时孔洞体积分数呈线性增长, 速度适中. 孔洞在高温下更容易成核与生长, 100 K 温度下孔

洞体积分数快速增长阶段 S2 的时间是 1100 K 温度下的 2.5 倍。孔洞的快速生长阶段与拉应力的峰值相对应, 因此高温下拉应力下降速率随孔洞体积分数快速增长阶段时间缩短而加快。

5) NAG 模型可以用来描述单晶铁在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变率 100—1100 K 温度下孔洞体积非线性增长, 在 100—1100 K 温度下拟合结果与 MD 结果都符合较好, 误差在 20% 以内。与低碳钢相比, 单晶铁的拉应力敏感系数与黏度更低。随着温度的升高, 单晶铁的孔洞成核和生长阈值逐渐降低。

本文的分析结果有助于更全面地了解单晶铁在高速冲击下的动态响应, 研究结果可以为建立考虑温度影响的单晶铁在高应变率下的损伤模型提供参考。本文研究只考虑了温度的影响, 然而金属材料在高应变率下的动态响应受多个因素影响, 温度只是重要因素之一, 因此后续研究将考虑多种因素共同作用, 例如晶粒尺寸、预置孔洞、应变率等因素与温度共同作用对单晶铁的动态响应的影响。

参考文献

- [1] Zhu J S, Hu X M, Wang P, Chen J, Xu A G 2010 *Adv. Mech.* **40** 400 (in Chinese) [朱建士, 胡晓棉, 王裴, 陈军, 许爱国 2010 *力学进展* **40** 400]
- [2] Remington T P, Hahn E N, Zhao S, Flanagan R, Mertens J C E, Sabbaghianrad S, Langdon T G, Wehrenberg C E, Maddox B R, Swift D C, Remington B A, Chawla N, Meyers M A 2018 *Acta Mater.* **158** 313
- [3] Curran D R, Seaman L, Shockey D A 1987 *Phys. Rep.* **147** 253
- [4] Kanel G I, Razorenov S V, Utkin A V, Fortov V E, Baumung K, Karow H U, Rusch D, Licht V, Davison L, Graham R A 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 7162
- [5] Antoun T, Curran D R, Razorenov S, Seaman L, Kanel G I, Utkin A V 2003 *Spall Fracture* (New York: Springer) pp217–220
- [6] Molinari A, Wright T W 2005 *J. Mech. Phys. Solids* **53** 1476
- [7] Xi T, Fan W, Chu G B, Shui M, He W H, Zhao Y Q, Xin J T, Gu Y Q 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 040202 (in Chinese) [席涛, 范伟, 储根柏, 税敏, 何卫华, 赵永强, 辛建婷, 谷渝秋 2017 *物理学报* **66** 040202]
- [8] Bai Q S, Zhang K, Shen R Q, Zhang F H, Miao X X, Yuan X D 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 234401 (in Chinese) [白清顺, 张凯, 沈荣琦, 张飞虎, 苗心向, 袁晓东 2018 *物理学报* **67** 234401]
- [9] Lee O S, Choi H B, Kim H M 2011 *J. Mech. Sci. Technol.* **25** 143
- [10] Minich R W, Cazamias J U, Kumar M, Schwartz A J 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2663
- [11] Murphy W J, Higginbotham A, Kimminau G, Barbrel B, Bringa E M, Hawreliak J, Kodama R, Koenig M, McBarron W, Meyers M A, Nagler B, Ozaki N, Park N, Remington B, Rothman S, Vinko S M, Whitcher T, Wark J S 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 065404
- [12] Li Y, Guo Y, Hu H, Wei Q 2009 *Int. J. Impact Eng.* **36** 177
- [13] Ashitkov S I, Komarov P S, Agranat M B, Kanel G I, Fortov V E 2013 *JETP Lett.* **98** 384
- [14] Zaretsky E B, Kanel G I 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 195901
- [15] Chen Y T, Tang X J, Li Q Z 2010 *Chin. Phys. B* **19** 056402
- [16] Gurson A L 1977 *J. Eng. Mater. Technol.* **99** 2
- [17] Johnson J N 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 2812
- [18] Remington B A, Bazan G, Belak J, Bringa E, Colvin J D, Edwards M J, Glendinning S G, Kalantar D H, Kumar M, Lasinski B F, Lorenz K T, McNaney J M, Pollaine S M, Rowley D, Stölken J S, Weber S V, Wolfer W G, Caturla M, Ivanov D S, Zhigilei L V 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2587
- [19] Rawat S, Raole P M 2018 *Comput. Mater. Sci.* **154** 393
- [20] Liao Y, Xiang M, Zeng X, Chen J 2015 *Mech. Mater.* **84** 12
- [21] Hahn E N, Germann T C, Ravelo R, Hammerberg J E, Meyers M A 2017 *Acta Mater.* **126** 313
- [22] Wang H, Gao N, Lv G H, Yao Z W 2018 *Chin. Phys. B* **27** 066104
- [23] Wang Y C, Zhang Y, Kawazoe Y, Shen J, Cao C D 2018 *Chin. Phys. B* **27** 116401
- [24] Gao N, Gao F, Wang Z G 2017 *Chin. Phys. Lett.* **34** 172
- [25] Mayer A E 2014 *Mech. Solids* **49** 649
- [26] Shao J L, Wang P, Zhang F G, He A M 2018 *J. Phys. Condens. Matter* **30** 255401
- [27] Ma W, Zhu W J, Zhang Y L, Jing F Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066404 (in Chinese) [马文, 祝文军, 张亚林, 经福谦 2011 *物理学报* **60** 066404]
- [28] Sugandhi R, Warriar M, Chaturvedi S 2015 *Appl. Soft Comput.* **35** 113
- [29] Rawat S, Warriar M, Chaturvedi S, Chavan V M 2011 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **19** 025007
- [30] Yang X, Zeng X G, Wang J, Wang J B, Wang F, Ding J 2019 *Mech. Mater.* **135** 98
- [31] Rudd R E, Belak J F 2002 *Comput. Mater. Sci.* **24** 148
- [32] Ikkurthi V R, Hemani H, Sugandhi R, Rawat S, Pahari P, Warriar M, Chaturvedi S 2017 *Procedia Eng.* **173** 1177
- [33] Mendelev M I, Han S, Srolovitz D J, Ackland G J, Sun D Y, Asta M 2003 *Philos. Mag.* **83** 3977
- [34] Zhao K, Ringdalen I G, Wu J Y, He J Y, Zhang Z L 2016 *Comput. Mater. Sci.* **125** 36
- [35] Kadav K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2006 *AIP Conf. Proc.* **845** 236
- [36] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [37] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [38] Hemani H, Warriar M, Sakthivel N, Chaturvedi S 2014 *J. Mol. Graphics Modell.* **50** 134
- [39] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [40] Stukowski A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [41] Dingley D J, Hale K F 1966 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **295** 55
- [42] Xie H, Yu T, Fang W, Yin F, Khan D F 2016 *Chin. Phys. B* **25** 126201

- [43] Yuan F 2012 *Sci. China, Ser. G* **55** 1657
- [44] Jensen B J, Gray G T, Hixson R S 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 103502
- [45] Smith R F, Eggert J H, Swift D C, Wang J, Duffy T S, Braum D G, Rudd R E, Reisman D B, Davis J P, Knudson M D, Collins G W 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 223507
- [46] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
- [47] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064120
- [48] Wang J, Yip S, Phillpot S, Wolf D 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 4182
- [49] Patriarca L, Abuzaid W, Sehitoglu H, Maier H J, Chumlyakov Y 2013 *Mater. Charact.* **75** 165
- [50] Rudd R E 2009 *Philos. Mag. A* **89** 3133
- [51] Eberhart J G, Horner S 2010 *J. Chem. Educ.* **87** 608
- [52] Chase M W 1998 *NIST-JANAF Thermochemical Tables 4th* (Washington DC: American Chemical Society and American Institute of Physics for the National Institute of Standards and Technology) p1221
- [53] Seaman L, Curran D R, Shockey D A 1976 *J. Appl. Phys.* **47** 4814
- [54] Ikkurthi V R, Chaturvedi S 2004 *Int. J. Impact Eng.* **30** 275

Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate^{*}

Wang Yun-Tian Zeng Xiang-Guo[†] Yang Xin

(MOE Key Laboratory of Deep Earth Science and Engineering, College of Architecture and Environment,

Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 14 June 2019; revised manuscript received 9 October 2019)

Abstract

In this work, we investigate the triaxial deformation of single crystal iron at a strain rate of $5 \times 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ by using molecular dynamics simulation through the embedded atomic method, and thus study the temperature effect on the void nucleation and growth, and we also discuss the applicability of nucleation and growth (NAG) model in single crystal iron. The molecular dynamics model size is $28.55 \text{ nm} \times 28.55 \text{ nm} \times 28.55 \text{ nm}$ and contains 2×10^6 atoms. The results show that the maximum tensile stress of single crystal iron decreases with temperature increasing. The maximum tensile stress reduces 35.9% when temperature rises from 100 K to 1100 K. We find that at 100–700 K temperatures, there are two peaks in the tensile stress-time profile. To ascertain the origin of the double-peak in the stress-time profile, we compute the void volume fraction evolution. In addition, we conduct the dislocation analysis, radial distribution function analysis and common neighbor analysis. The analysis results show that the relaxation of tensile stress in the first peak of stress-time profile takes place through the structural change and the body-centered cubic crystal structure transforming into face-centered cubic crystal structure, hexagonal close packed crystal structure and other structures. We find that there are no voids' nucleation in the first peak of stress-time profile. The second-peak of stress-time profile proceeds through the nucleation and growth of voids. And the rapid increase of the void volume fraction corresponds to the rapid decline of the tensile stress. The void volume evolution can be divided into three stages. With the increase of temperature, the double peak characteristic of the tensile stress-time profile disappears at 900–1100 K. While at 900–1100 K the nucleation and growth of voids are the only way to release the built-up stress. It is shown that the nucleation and growth of voids are more preferred at high temperature than at low temperature. The nucleation and growth of voids in single iron under high strain rate follow the NAG model. We calculate the best-fit NAG parameters at 100–1100 K, and analyze the sensitivity of NAG parameters to temperature. It is shown that the nucleation and growth threshold of the single crystal iron are much higher than those of mild steel. The results can be useful for developing the fracture models of iron at high strain rate to describe the dynamic damage on a continuum length scale.

Keywords: single crystal iron, void nucleation and growth, temperature effect, molecular dynamics

PACS: 61.82.Bg, 61.72.Qq, 68.60.Dv, 71.15.Pd

DOI: [10.7498/aps.68.20190920](https://doi.org/10.7498/aps.68.20190920)

^{*} Project supported by the Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China and the China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. U1430119, U1530140).

[†] Corresponding author. E-mail: xiangguozeng@scu.edu.cn