

层错四面体对单晶铜层裂行为影响的分子动力学研究*

朱琪¹⁾²⁾ 王升涛¹⁾ 赵福祺¹⁾ 潘昊^{1)†}

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100088)

(2019年9月18日收到; 2019年11月14日收到修改稿)

层错四面体是一种典型的三维空位型缺陷, 广泛存在于受辐照后的面心立方金属材料中, 对材料的力学性能有显著的影响. 目前, 关于层错四面体对辐照材料层裂行为的影响还缺乏深入系统的研究. 本文使用分子动力学方法模拟了含有层错四面体的单晶铜在不同冲击速度下的层裂行为, 对整个冲击过程中的自由表面速度及微结构演化等进行了深入的分析. 研究发现, 层错四面体在冲击波作用下会发生坍塌, 并进一步诱导材料产生位错、层错等缺陷. 在中低速度加载下, 层错四面体坍塌引起的缺陷快速向周围扩展, 为孔洞提供了更宽的形核区域, 促进了孔洞的异质成核, 造成材料层裂强度大幅度减小. 当冲击速度较高时, 层错四面体坍塌导致的局部缺陷对材料的层裂强度不再有明显影响.

关键词: 层裂, 层错四面体, 冲击, 分子动力学

PACS: 62.20.mm, 61.80.-x, 62.50.Ef, 02.70.Ns

DOI: 10.7498/aps.69.20191425

1 引言

结构材料长期辐照后的力学性能变化是影响核反应堆服役期间安全性和可靠性的重要因素之一, 因此深入研究辐照材料的力学性能具有极其重要的工程意义. 结构材料经辐照后会产生大量缺陷, 如氦泡、孔洞、位错环等^[1]. 对于面心立方晶体结构材料, 辐照缺陷主要表现为大量的堆垛层错四面体 (stacking fault tetrahedron, SFT) 结构^[1-6]. SFT 是一种典型的三维空位型缺陷, 由 4 个 {111} 层错面和 6 条 (110) 方向的压杆位错组成, 其大小根据材料和辐照条件的不同略有不同, 一般情况下棱长约为 2—3 nm, 数密度约为 10^{22} — 10^{24} m⁻³^[5,6].

材料经受辐照后的微结构和力学性能变化已

经受到了广泛关注. Shao 等^[7] 和 Zhou 等^[8] 应用分子动力学分别模拟了含 He 泡、孔洞单晶铝材料在方波和衰减波加载下的层裂行为; Lin 等^[9] 和 Qiu 等^[10] 研究了空位型缺陷对单晶铜、镍层裂行为的影响, 发现空位的存在会明显降低材料的层裂强度, 且其影响程度与材料晶体取向有关. 辐照产生的 SFT 对材料的力学性能的影响也进行了大量的实验和理论研究. 大量实验表明, 辐照后产生的 SFT 会使材料出现硬化、脆化和屈服后软化的现象. Dai 和 Victoria^[11] 对辐照后的铜进行了拉伸试验, 观察到材料内部形成了明显的无缺陷通道, 导致材料发生软化. Edwards 等^[12] 对铜及其合金材料进行了一系列辐照实验, 发现随着辐照剂量的增大, 材料屈服应力逐渐增大, 韧性降低, 应变硬化系数逐渐减小. 在理论研究方面, 大量工作主要关注 SFT 与位错^[13-21]、晶界^[22-25] 等缺陷的相互作

* 科学挑战专题 (批准号: TZ2018001) 和国家自然科学基金 (批准号: 11702031) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: Pan_hao@iapcm.ac.cn

用, 研究表明, SFT 能够阻碍位错的滑移并导致材料屈服应力升高、韧性降低. 运用分子动力学方法, Osetsky 等 [15] 和 Fan 等 [17] 模拟了刃型位错、螺型位错及混合位错与 SFT 之间的相互作用, 发现 SFT 可能发生剪切变形、湮灭、旋转或转化为其他缺陷. Wu 等 [24] 模拟了不同尺寸的 SFT 在含孪晶边界和晶界的 Al, Ni, Cu, Ag 等金属中的稳定性. Arsenlis 和 Wirth [19] 以及 Krishna 等 [20] 采用标量形式描述 SFT 缺陷, 分别发展了基于连续位错密度和基于微观率无关理论的晶体塑性模型; Xiao 等 [21] 进一步采用张量形式描述 SFT 缺陷, 对 SFT 与位错之间的空间作用规律进行了细致刻画. 此外, 还有部分研究关注了 SFT 对不含初始位错的面心立方晶体材料的力学性能的影响 [26–29]. 研究表明, 相比于完美晶体, SFT 的存在使得材料的位错成核应力降低了一半 [26]. 在不同方向的载荷作用下, SFT 的结构会发生不同的转变, 并对材料的压缩、拉伸过程造成不同程度的影响 [29].

总体来说, 目前对 SFT 的研究主要针对的是准静态或常应变率加载条件, 而对于冲击加载条件下 SFT 对材料动态力学性能的影响, 研究关注较少. 层裂是延性金属材料在冲击加载下的一种典型破坏形式, 深入研究 SFT 对材料层裂行为的影响具有重要意义. 为了进一步探究 SFT 在冲击加载条件下对材料层裂行为的影响及其内在机理, 本文采用分子动力学模拟方法对含有一定密度 SFT 的单晶铜的层裂行为进行模拟研究, 重点关注不同冲击速度下材料中 SFT 的微结构演化及其对层裂强度、损伤演化的影响.

2 模型与方法

使用大规模分子动力学模拟软件 *lammmps* 模拟含有 SFT 的单晶铜的层裂损伤行为, 作为对比, 对不含 SFT 的完美单晶铜也进行了相同条件的模拟. 模型使用 Mishin 等 [30] 在 2001 年提出的关于铜的嵌入原子法势函数, 该势函数能准确模拟铜材料在冲击加载下的力学行为. 本文初始构型如图 1 所示, 模型大小为 $15.9 \text{ nm} \times 16.0 \text{ nm} \times 45.1 \text{ nm}$, 约含有 9.6×10^5 个原子, SFT 结构置于靶板中部 (图 1(b)), x, y, z 坐标轴方向分别为 $[1 \bar{1} 0]$, $[1 1 \bar{2}]$ 和 $[1 1 1]$, 沿 $[1 1 1]$ 方向对模型进行不同速度的冲击加载.

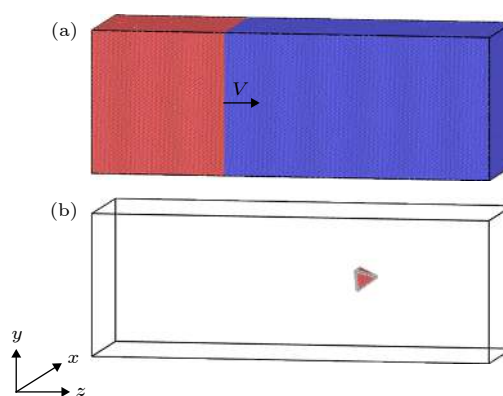


图 1 模拟初始构型 (a) 整体构型, 箭头方向代表冲击方向; (b) 模型中的层错四面体分布

Fig. 1. Initial configuration of the simulation system: (a) The equilibrated atomic configuration, and the arrow denotes the direction of impact; (b) the internal distribution of SFT.

本文采用 Silcox-Hirsch 机制 [31] 产生 SFT, 即通过三角形空位层演化形成 SFT. 首先在模型中心 $[1 1 1]$ 面上移除一个包含 55 个原子的正三角形原子层, 形成边长约为 2.5 nm 的三角形空位盘, 随后对模型施加三维周期性边界条件, 采用 NPT 系综将模型在 300 K, 0 bar ($1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$) 条件下弛豫 100 ps, 使其产生 SFT 并达到平衡状态. 图 2 为 SFT 形成过程微观图像, 历时约 1 ps, 最终在模型中部形成棱长约为 2.5 nm 的 SFT 结构. SFT 在模型中的数密度约为 $1.3 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$, 这与金属铜在辐照实验中产生的 SFT 大小和密度 [5,6] 基本一致.

冲击过程采用 NVE 系综, x, y 方向采用周期

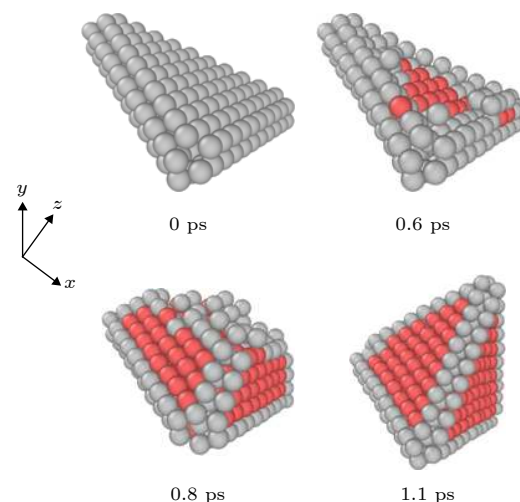


图 2 SFT 的形成过程

Fig. 2. Snapshots of SFT formation.

性边界条件, 冲击方向 z 采用自由边界条件, 计算时间步长为 0.1 fs. 为了模拟层裂过程, 将模型以 1:2 的比例分为飞片和靶板两部分. 飞片 (图 1(a) 中红色部分原子) 在 $[1\ 1\ 1]$ 方向上以一定的初速度 $2U_p$ (U_p 为冲击压缩过程中靶板的粒子速度) 撞击右侧靶板, 因此冲击脉冲分别在飞片和靶板内部产生. 冲击波到达飞片和靶板的自由表面后反射回两束相向而行的稀疏波, 两稀疏波在靶板中部相遇形成拉伸脉冲, 如果拉伸应力脉冲足够强, 经过一定的时间后, 靶板就会发生层裂. 为研究不同冲击速度下 SFT 的演化及其对层裂行为的影响, 本文模拟了 U_p 为 0.5—1.25 km/s 时材料的层裂行为.

本文统计了应力、温度等物理量沿冲击方向 (z 方向) 的分布, 分析所用应力为维里应力^[32]. 使用可视化软件 ovito^[33] 对模拟结果进行分析处理, 其中使用共近邻分析法 (common neighbor analysis, CNA)^[34] 来分析模拟过程中的微结构变化, 使用位错抽取算法 (dislocation extraction algorithm, DXA)^[35] 来分析位错演化情况.

3 结果与讨论

3.1 层裂强度

层裂强度是表示材料抵抗断裂破坏能力的重要参数, 在分子动力学模拟中, 通常用样品层裂过程中的最大拉伸应力 ($-\sigma_{33,\max}$) 作为层裂强度^[9]. 不同冲击速度下含 SFT 铜与完美单晶铜的层裂强度如图 3 所示. 作为对比, 图 3 还给出了 Luo 等^[36] 针对完美单晶铜的分子动力学模拟所得部分结果.

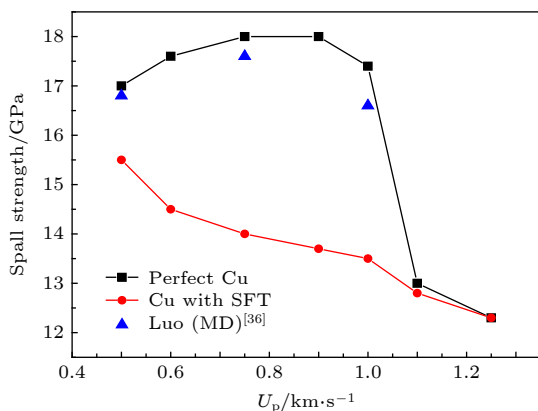


图 3 不同 U_p 对应的层裂强度分布图

Fig. 3. Relationship between particle velocity U_p and spall strength of perfect Cu and Cu with SFT.

从图 3 可以看出, 随着 U_p 的增大, 完美单晶铜的层裂强度呈现先增大后减小的趋势, 这与 Luo 等^[36] 的分子动力学模拟所得结果是一致的. $U_p \leq 1.0$ km/s 时, 在同等加载条件下, 含有 SFT 铜的层裂强度比完美单晶铜的要小得多, 且两者之间的差值随着 U_p 的增大先增大后减小. U_p 为 0.5 km/s 时, 含 SFT 铜的层裂强度为 15.5 GPa, 比相同加载条件下的完美单晶铜 (17 GPa) 低 1.5 GPa; U_p 为 0.75 km/s 时, 含 SFT 铜的层裂强度为 14 GPa, 比相同加载条件下的完美单晶铜 (18 GPa) 低 4 GPa; 而当 U_p 达到 1.25 km/s 时, 两者的层裂强度均降低为 12.5 GPa. 可见, 中低速度 ($U_p \leq 1.0$ km/s) 加载下, SFT 的存在降低了材料的层裂强度, 且其影响在中等速度冲击时最为显著. 当 U_p 达到 1.25 km/s 及以上时, 两者的层裂强度基本相同, SFT 的存在对材料层裂强度不再有影响. 下面对不同速度冲击下材料内部的微结构演化及应力温度分布情况进行详细分析.

3.2 层裂过程

为了进一步深入分析层裂过程中材料内部微结构的演化情况, 采用 CNA^[34] 和 DXA^[35] 来分析微结构的演化. 图 4 给出了 U_p 分别为 0.5 和 0.75 km/s 时, SFT 在压缩过程中的演化形态图及相应的位错演化图. SFT 在冲击波作用下会发生坍塌, 0.5 km/s 时 (见图 4(a)), 当冲击波扫过 SFT 时, SFT 从顶部开始坍塌 (2.67 ps), 形成 Shockley 不完全位错, 随着 Shockley 不完全位错在 $(\bar{1}\ 1\ 1)$, $(1\ \bar{1}\ 1)$, $(1\ 1\ \bar{1})$ 滑移面上滑移, 三个面上的堆垛层错逐渐湮灭, 同时压杆位错消失. 最终 Shockley 不完全位错与 SFT 底部 $(1\ 1\ 1)$ 面上的压杆位错作用 (2.83 ps), 形成 Frank 位错, 在 $(1\ 1\ 1)$ 面上留下一个由 Frank 位错环包围的三角形层错面 (2.96 ps). 0.75 km/s 时 (见图 4(b)), 由于冲击压力较大, SFT 的坍塌在不到 0.2 ps 的时间内快速完成, 结构破坏较快, 其结构演化无法像 0.5 km/s 时平稳规则, 但坍塌完成后同样形成了一个三角形层错面 (2.49 ps). SFT 坍塌后在 Frank 位错环的三个顶点附近开始发射位错, 并随着 Shockley 不完全位错的滑移在 $\{1\ 1\ 1\}$ 面上形成堆垛层错 (图 4(a), 3.17 ps), 冲击速度越大, 压缩过程中形成的位错、堆垛层错等缺陷就越多, 过程中所耗散的能量也越大. 在更高的冲击速度下, 如 U_p 为 1.25 km/s 时,

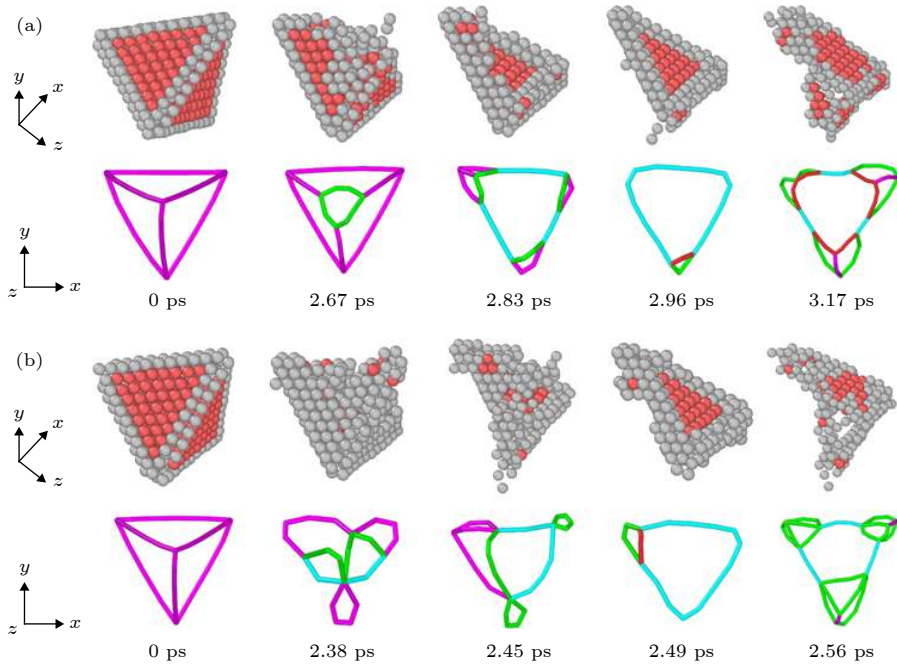


图 4 压缩过程中 SFT 的演化形态图及对应的位错演化图 (其中, 玫红色线是压杆位错, 绿色线是 Shockley 不完全位错, 浅蓝色线是 Frank 不完全位错, 红色线是其他位错) (a) $U_p = 0.5$ km/s; (b) $U_p = 0.75$ km/s

Fig. 4. Snapshots of SFT configuration and dislocation evolution at different deformation stages during shock compression: (a) $U_p = 0.5$ km/s; (b) $U_p = 0.75$ km/s. The rose red line represents the stair-rod dislocation, the green line represents the Shockley partial dislocation, the light blue line represents the Frank partial dislocation, and the red line is the undefined dislocation.

样品在冲击过程就会产生位错等缺陷, SFT 与这些缺陷相互作用, 其演化过程就更加复杂, 并且, 由于强冲击下材料产生大量缺陷, SFT 和它引发的位错、层错等不再是影响材料层裂行为的主要因素, 因此这里不再具体讨论更高速度下 SFT 的演化过程.

图 5 给出了 U_p 分别为 0.75 和 1.25 km/s 时材料在压缩和拉伸过程中内部微结构的演化规律, 其中, 绿色、红色和蓝色原子分别表示面心立方、堆垛层错和其他缺陷原子. 速度为 0.75 km/s 的情况下 (图 5(a)), 对于完美单晶铜, 冲击波在 4.6 ps 时到达右侧自由表面, 在冲击压缩过程中材料只发生弹性变形, 材料内部没有形成位错、层错等缺陷. 随后, 从两端自由面反射回的稀疏波在靶板中部相遇, 形成拉伸脉冲, 在拉伸应力的作用下, 靶板中部开始出现孔洞形核 (8.7 ps), 随后孔洞成长、合并, 最终导致材料断裂 (16 ps). 对于含 SFT 铜, SFT 的存在降低了材料的屈服强度, 材料在压缩过程中便发生塑性变形, SFT 坍塌并进一步形成位错、堆垛层错等缺陷 (4.6 ps); 这些缺陷结构随后在拉伸应力作用下进一步演化, 形成了较宽的孔洞形核区 (8.7 ps). 观察拉伸过程中层裂图像可知,

完美单晶铜在 16 ps 时已接近完全断裂状态, 断裂面较光滑平整, 而含 SFT 铜还未完全断裂, 这与含 SFT 铜的层裂区较宽、孔洞演化较慢有关. 当速度达到 1.25 km/s 时 (图 5(b)), 两种样品的压缩拉伸微观图像不再有明显区别, 这与在此冲击速度下两种样品层裂强度相同的结论一致. 较大的冲击压力使得材料在冲击压缩阶段就发生塑性变形, 产生大量缺陷原子 (4.2 ps), 与强冲击产生的缺陷相比, 由 SFT 引起的缺陷不再具有显著影响; 在随后的拉伸过程中, 这些缺陷为孔洞提供了形核点, 能够看出, 此时在两种样品内部都形成了较宽的孔洞形核区 (11 ps), SFT 的存在对材料层裂损伤演化的影响几乎可以忽略不计.

3.3 孔洞成核与演化

关于层裂初期样品内部的孔洞演化过程, 图 6 给出了 U_p 为 0.75 km/s 时不同时刻材料内部的微结构切片图像及相关位错演化图, 其中绿色、红色和蓝色原子分别表示面心立方、堆垛层错和其他缺陷原子. 在 8.0 ps 时, 完美单晶铜在拉伸应力作用下开始形成位错, 并伴有缺陷原子出现; 随后位错进一步增殖, 在 8.7 ps 时, 孔洞开始形核, 可以看

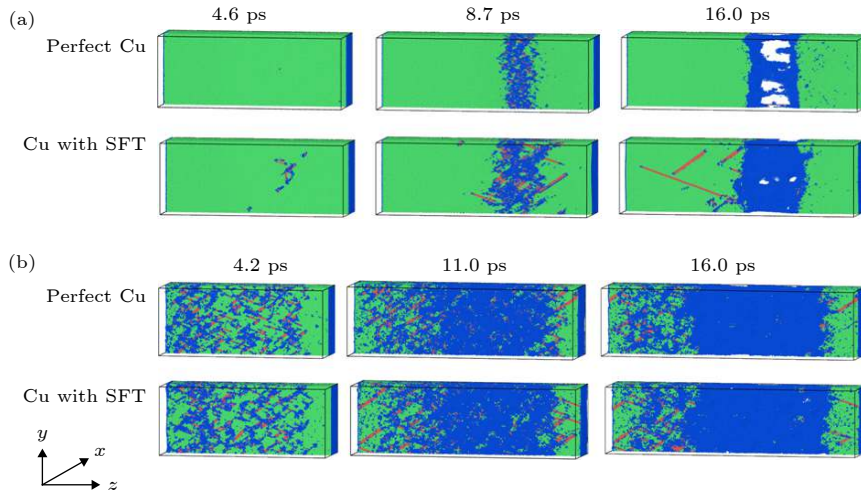


图 5 不同冲击速度下单晶铜在压缩和拉伸过程中的微结构演化图 (a) $U_p = 0.75$ km/s; (b) $U_p = 1.25$ km/s

Fig. 5. Atomic configuration in Cu crystal during shock compression and tension at different impact velocity: (a) $U_p = 0.75$ km/s; (b) $U_p = 1.25$ km/s.

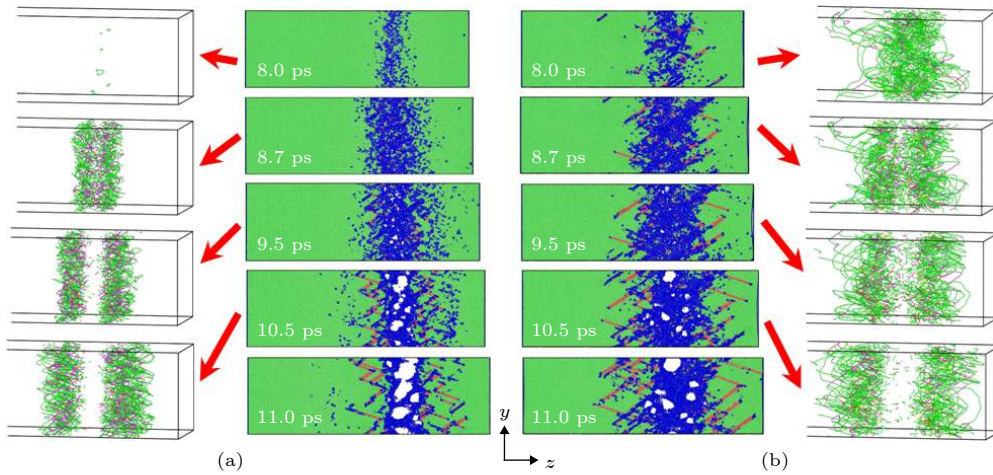


图 6 $U_p = 0.75$ km/s 时孔洞演化图像及位错分布图 (a) 完美单晶铜; (b) 含 SFT 铜

Fig. 6. Void and dislocation evolution during spallation at $U_p = 0.75$ km/s: (a) Perfect crystal Cu; (b) Cu with SFT.

出, 初期孔洞均匀集中分布在样品中部一个较窄的区域内 (9.5 ps). 随后, 位错继续向两侧扩展并伴随堆垛层错产生, 孔洞在局部区域内快速成长合并 (10.5 ps), 造成材料的快速断裂失效 (11 ps). 而对于含 SFT 铜, 在 8.0 ps 时样品中已分布有大量位错、层错等缺陷, 这是前期压缩过程中的缺陷演化导致的, 这些缺陷在拉伸应力作用下进一步向周围扩展, 形成了更宽的孔洞成核区. 孔洞成核开始于 9.5 ps, 较相同速度冲击下的完美单晶铜 (8.7 ps) 要晚 0.8 ps. 此外, 可以观察到, 含 SFT 铜的孔洞形核区域较完美单晶铜要宽得多, 孔洞的分布更为分散, 大小不均匀, 孔洞演化速度也要比完美单晶铜慢得多. 在 11 ps 时, 完美单晶铜的孔洞成长合并导致材料接近完全断裂状态, 而含 SFT 铜内的

孔洞仍呈现离散的状态.

图 7 给出了 U_p 为 0.75 km/s 时孔洞演化过程中对应的应力及温度变化图. 8.0 ps 时, 含 SFT 铜中的拉伸应力较完美单晶铜要小得多, 但温度整体较完美单晶铜要高. 这与含 SFT 铜在压缩过程发生了塑性变形有关, SFT 坍塌导致位错的形核增殖和层错的产生, 一部分冲击能量因此而耗散, 引起温度升高, 拉伸过程中的应力水平也随着缺陷的生成而大大降低. 8.7 ps 时, 完美单晶铜的层裂区域开始出现孔洞形核, 此区域应力降低, 温度开始上升; 9.5 ps 时, 层裂区域的孔洞进一步增长, 应力大幅度降低, 温度大幅度升高并迅速超过含 SFT 铜该区域的温度, 这说明完美单晶铜在此过程中的塑性变形较含 SFT 铜剧烈, 这和完美单晶铜中孔

洞演化速度更快是一致的. 在 9.5 ps 时, 含 SFT 铜的层裂区也开始出现孔洞的形核和增长, 该区域应力降低, 温度升高. 可以发现, 一旦发生孔洞成核, 含 SFT 铜的局部峰值温度要远低于完美单晶铜的峰值温度, 而整体温升区域却较完美单晶铜的更宽, 说明含 SFT 铜形成孔洞的区域更宽, 这与在微观图中观察到的孔洞形核现象是一致的.

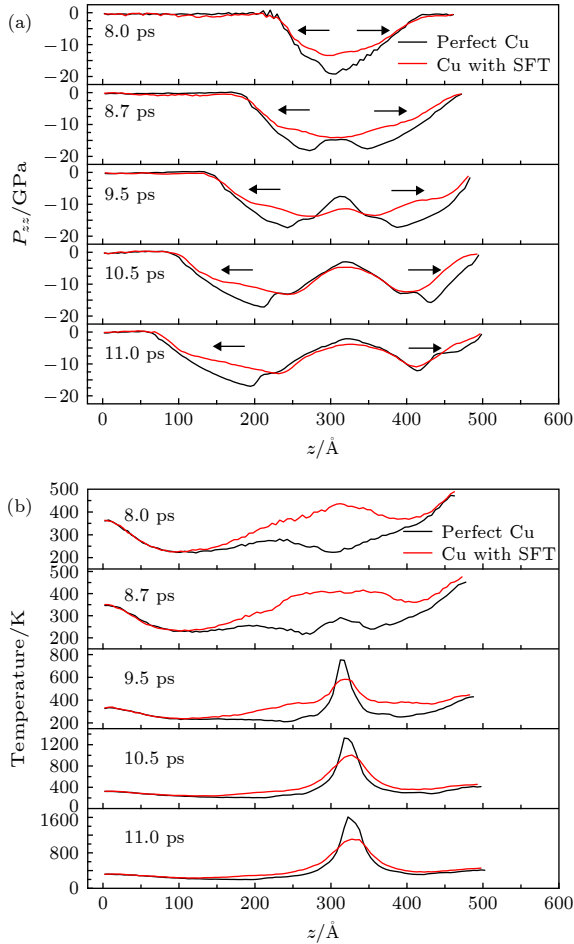


图 7 $U_p = 0.75$ km/s 时孔洞演化对应的应力温度分布图 (a) 应力; (b) 温度
Fig. 7. Stress and temperature profiles for single crystal copper at $U_p = 0.75$ km/s: (a) Stress; (b) temperature.

3.1 节的结果表明: 在中低冲击速度下, SFT 的存在显著降低了样品的层裂强度, 3.2 节的层裂过程和本节的微结构演化规律为此提供了微观尺度上的解释. 一方面, SFT 缺陷的存在降低了材料的屈服强度 [29], 使材料在较低的压缩应力下便发生塑性变形, SFT 坍塌诱发位错、层错等缺陷的增殖演化, 为孔洞提供了更宽的形核点, 同时塑性变形导致材料区域温度升高, 材料层裂强度下降; 另一方面 SFT 坍塌及缺陷演化耗散了部分冲击能,

材料在拉伸阶段所受拉应力下降, 孔洞生长动力不足, 使得含 SFT 材料的损伤演化速率较低, 孔洞生长合并较慢.

3.4 自由表面速度曲线

样品自由表面速度曲线能在一定程度上反映材料的层裂损伤过程, 是宏观层裂实验的重要分析内容 [37]. 通常若材料发生层裂, 自由表面速度下降到第一个极小值后会重新回跳, 产生 Pullback 信号. 一般来说, Pullback 信号的临界点对应于微孔洞的成核; 速度曲线峰值与第一个极小值之间的幅值 (Pullback 幅值) 可作为预估层裂强度的依据, 幅值越大则层裂强度越大; Pullback 信号后的回跳斜率代表了损伤演化速率, 斜率越大则损伤演化速率越大; Pullback 信号后的速度回跳幅值在一定程度上反映了层裂区域的损伤程度, 幅值越大则损伤程度越大.

图 8 给出了 U_p 分别为 0.75 和 1.25 km/s 时含 SFT 铜与完美单晶铜的自由表面速度曲线对比

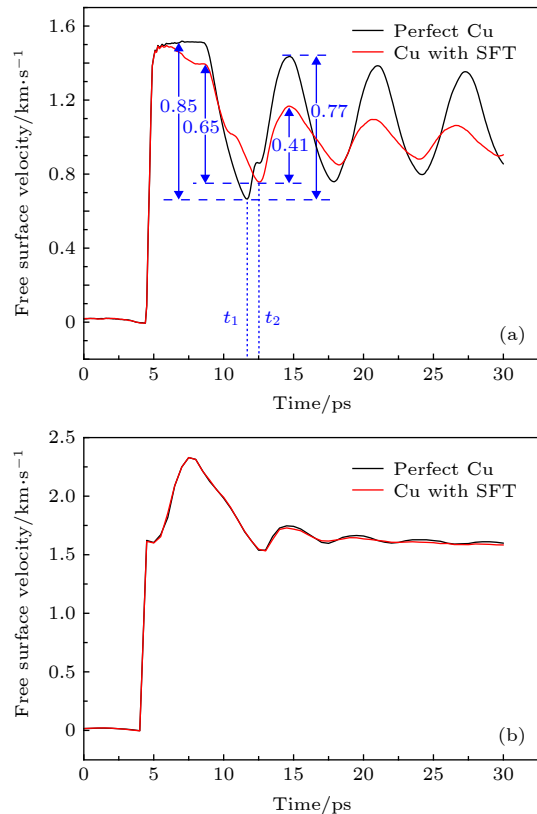


图 8 不同 U_p 对应的自由表面速度曲线图 (a) $U_p = 0.75$ km/s; (b) $U_p = 1.25$ km/s
Fig. 8. Free surface velocity evolution history for single crystal copper at different velocities: (a) $U_p = 0.75$ km/s; (b) $U_p = 1.25$ km/s.

图. 在速度为 0.75 km/s 时 (图 8(a)), 含有 SFT 的铜的最大速度已无法维持在平台峰值速度, 说明在冲击压缩过程中由于 SFT 的坍塌及缺陷演化已经耗散了部分冲击能. 观察二者的 Pullback 幅值, 含 SFT 铜的 Pullback 幅值 (0.65 km/s) 明显要比完美单晶铜的 Pullback 幅值 (0.85 km/s) 小, 即 SFT 的存在降低了铜材料的层裂强度; 同时含 SFT 铜产生 Pullback 信号的时间 (t_2) 明显晚于完美单晶铜 (t_1), 说明含 SFT 铜的孔洞成核时间较晚; 比较二者 Pullback 信号后的回跳斜率和回跳幅值, 发现含 SFT 铜的回跳斜率和回跳幅值均比完美单晶铜的要小, 说明含 SFT 铜的损伤演化速率降低, 局部损伤程度也有一定程度的减小, 这与冲击过程中的能量耗散造成的拉伸应力降低有关. 而当速度达到 1.25 km/s 时 (图 8(b)), 二者的自由表面速度曲线几乎重合, 此时两种材料的层裂强度、损伤情况等基本一致, SFT 的存在对材料的层裂行为不再有明显影响. 以上对自由表面速度的分析与前面在微观结构中所得分析结论是一致的.

4 结 论

采用分子动力学方法对含 SFT 铜和完美单晶铜在不同冲击速度加载下的层裂损伤行为进行了模拟研究. 结果表明, SFT 在冲击速度达到一定值时会发生坍塌破坏, 从而进一步影响材料的层裂损伤行为, 且其影响在不同冲击强度下表现不同. 在中低冲击速度 ($U_p \leq 1.0$ km/s) 条件下, 完美单晶铜在冲击压缩过程中不产生缺陷, 也不发生塑性变形, 而含 SFT 铜由于 SFT 的坍塌而产生了局部的缺陷和塑性变形, 层裂强度显著降低. SFT 在冲击压缩过程中引发的局部缺陷为拉伸过程中孔洞的形核提供了更宽的形核区域, 同时 SFT 坍塌及塑性变形耗散了部分冲击能, 造成拉伸应力幅值降低, 导致孔洞成核生长动力不足, 损伤演化速率降低. 在较高冲击速度 ($U_p = 1.25$ km/s) 条件下, 完美单晶铜和含 SFT 铜在压缩冲击波的作用下均产生了大量塑性变形和缺陷, SFT 坍塌导致的局部缺陷对拉伸过程中孔洞成核与演化以及层裂强度的影响几乎可以忽略不计. 此外, 本文仅关注在 [1 1 1] 方向冲击加载下 SFT 对材料层裂行为的影响, 由于 SFT 具有方向性, 对于不同冲击方向下 SFT 对层裂行为的影响还需要更深入的研究.

参考文献

- [1] Zinkle S J, Busby J T 2009 *Mater. Today* **12** 12
- [2] Yoshida N, Akashi Y, Kitajima K, Kiritani M 1985 *J. Nucl. Mater.* **133** 405
- [3] Zinkle S J, Farrell K 1989 *J. Nucl. Mater.* **168** 262
- [4] Hashimoto N, Byun T S, Farrell K 2006 *J. Nucl. Mater.* **351** 295
- [5] Schäublin R, Yao Z, Baluc N, Victoria M 2005 *Philos. Mag.* **85** 769
- [6] Fabritsiev S A, Pokrovsky A S 2007 *J. Nucl. Mater.* **367** 977
- [7] Shao J L, Wang P, He A M, Duan S Q, Qin C S 2014 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **22** 025012
- [8] Zhou T T, He A M, Wang P, Shao J L 2019 *Comput. Mater. Sci.* **162** 255
- [9] Lin E Q, Shi H, Niu L 2014 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **22** 035012
- [10] Qiu T, Xiong Y N, Xiao S F, Li X F, Hu W Y, Deng H Q 2017 *Comput. Mater. Sci.* **137** 273
- [11] Dai Y, Victoria M 1996 *MRS. Symp. Proc.* **439** 319
- [12] Edwards D J, Singh B N, Bilde-Sørensen J B 2005 *J. Nucl. Mater.* **342** 164
- [13] Lee H J, Wirth B D 2009 *Philos. Mag.* **89** 821
- [14] Osetsyky Y N, Stoller R E, Rodney D, Bacon D J 2005 *Mater. Sci. Eng., A* **400** 370
- [15] Osetsyky Y N, Rodney D, Bacon D J 2006 *Philos. Mag.* **86** 2295
- [16] Fan H, El-Awady J A, Wang Q 2015 *J. Nucl. Mater.* **458** 176
- [17] Fan H, Wang Q, Ouyang C 2015 *J. Nucl. Mater.* **465** 245
- [18] Martínez E, Uberuaga B P, Beyerlein I J 2016 *Phys. Rev. B* **93** 054105
- [19] Arsenlis A, Wirth B D, Rhee M 2004 *Philos. Mag.* **84** 3617
- [20] Krishna S, Zamiri A, De S 2010 *Philos. Mag.* **90** 4013
- [21] Xiao X Z, Song D K, Xue J M, Chu H J, Duan H L 2015 *Int. J. Plast.* **65** 152
- [22] Zhang L, Lu C, Tieu K, Shibuta Y 2018 *Scr. Mater.* **144** 78
- [23] Wu L P, Yu W S, Hu S L, Shen S P 2017 *Int. J. Plast.* **97** 246
- [24] Wu L P, Yu W S, Hu S L, Shen S P 2018 *Comput. Mater. Sci.* **155** 256
- [25] Xiao X Z, Song D K, Chu H J, Xue J M, Duan H L 2015 *Int. J. Plast.* **74** 110
- [26] Salehinia I, Bahr D F 2012 *Scr. Mater.* **66** 339
- [27] Figueroa E, Tramontina D, Gutierrez G, Bringa E 2015 *J. Nucl. Mater.* **467** 677
- [28] Salehinia I, Lawrence S K, Bahr D F 2013 *Acta Mater.* **61** 1421
- [29] Zhang L, Lu C, Tieu K, Su L, Zhao X, Pei L 2017 *Mater. Sci. Eng., A* **680** 27
- [30] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [31] Silcox J, Hirsch P B 1959 *Philos. Mag.* **4** 1356
- [32] Thompson A P, Plimpton S J, Mattson W 2009 *J. Chem. Phys.* **131** 154107
- [33] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [34] Stukowski A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [35] Stukowski A, Albe K 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 085001
- [36] Luo S N, Qi A, Germann T C, Han L B 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 013502
- [37] Pei X Y, Peng H, He H L, Li P 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 034601 (in Chinese) [裴晓阳, 彭辉, 贺红亮, 李平 2015 物理学报 **64** 034601]

Effect of stacking fault tetrahedron on spallation of irradiated Cu via molecular dynamics study*

Zhu Qi¹⁾²⁾ Wang Sheng-Tao¹⁾ Zhao Fu-Qi¹⁾ Pan Hao^{1)†}

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*)

(Received 18 September 2019; revised manuscript received 14 November 2019)

Abstract

Stacking fault tetrahedron (SFT) is a common type of three-dimensional vacancy clustered defect in irradiated FCC metals and alloys, which has a great influence on the mechanical properties of the materials. Previous researches mostly concentrated on the effect of SFT on the mechanical response of material under quasi-static or constant strain rate loading condition, while very few studies focused on its influence on mechanical properties under the shock loading condition. Spallation is a typical failure mode of ductile metal material under shock loading, and the initial defects in the material have a great influence on the spallation behavior. In this study, molecular dynamics simulation is carried out to investigate the influence of SFT on spallation behavior of irradiated copper single crystal under different shock intensities. Copper single crystal with a perfect structural model is also investigated under the same simulation condition for comparison. The model is divided into two parts: the flyer and the target. The shock wave is generated by moving the flyer at a velocity in a range of 1.0–2.5 km/s along the [111] crystallographic orientation to achieve the desired shock-state particle velocity U_p in a range of 0.5–1.25 km/s. The time evolution of pressure, free surface velocity and corresponding microstructure, are analyzed in detail to illuminate the spallation behavior of the Cu with SFT. It is revealed that the SFT collapses during shock compression and induces the generation of dislocations and stacking faults in the material. Subsequently, spallation happens when the voids nucleate and grow in the region of dislocations and stacking faults. Moreover, the materials show different spallation behaviors at different shock intensities. When $U_p \leq 1.0$ km/s, only elastic deformation occurs in perfect single crystal copper under shock compression, but in the copper with SFT, local defects appear and plastic deformation occurs due to the collapse of SFT under shock compression. The influence of SFT on spallation is most pronounced at a medium shock intensity. When $U_p = 0.75$ km/s, the local defects caused by the collapse of SFT provide a wider nucleation area for the voids and promote the heterogeneous nucleation of the voids, resulting in the decreasing of the spall strength. The void nucleation of single crystal copper with SFT is found to be much later than the perfect one and the rate of spall damage evolution also decreases due to energy dissipation during SFT's collapse and plastic deformation. When U_p increases to 1.25 km/s, shock compression induces many defected atoms in both samples, so the SFT has little influence on the spall strength and spall damage of the materials.

Keywords: spallation, stacking fault tetrahedron, shock, molecular dynamics

PACS: 62.20.mm, 61.80.-x, 62.50.Ef, 02.70.Ns

DOI: 10.7498/aps.69.20191425

* Project supported by the Science Challenge Project, China (Grant No. TZ2018001) and the National Nature Science Foundation of China (Grant No.11702031).

† Corresponding author. E-mail: Pan_hao@iapcm.ac.cn