

含孔洞缺陷的单晶镍拉伸行为：孔洞生长和聚集机理

宋 鹏, 刘 浩, 王路生, 丁 军, 易俊皓, 路世青, 黄 霞

(重庆理工大学 机械工程学院, 重庆 400054)

摘 要: 利用分子动力学模拟研究了孔洞中心形成平面与加载方向的夹角 (θ) 对单晶镍在单轴拉伸下孔洞生长和聚集行为的影响及机理。结果表明: 单晶镍的屈服应力和平均流动应力随着夹角 θ 的增加而下降, 应力下降速率随着夹角 θ 的增加而加快。当夹角 $\theta=90^\circ$ 时 (加载方向垂直于孔洞中心平面时), 单晶镍中孔洞独立生长时间最短且孔洞之间最先发生聚集, 导致其最易进入软化阶段, 这是由于夹角 $\theta=90^\circ$ 时, 单晶镍中最快的孔洞体积分数增长速率和损伤演化速率。当夹角 $\theta=90^\circ$ 时, 单晶镍中 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错长度的显著降低, 以及 fcc 晶体结构的原子数目向 Other 和 hcp 晶体结构的最大转变速率, 导致 $\theta=90^\circ$ 时单晶镍的损伤演化速率最快且损伤程度最剧烈。值得注意的是, 当 $\theta=90^\circ$ 时单晶镍中孔洞最易聚集是由于该条件下孔洞表面受到更大的拉应力作用。通过该工作, 旨在揭示金属材料在高应变率下的孔洞聚集行为及机理, 并对揭示其软化行为和断裂机理提供了理论指导。

关键词: 孔洞缺陷; 单晶镍; 孔洞聚集; 分子动力学

中图分类号: TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)11-3767-11

高应变率下延性金属的动态拉伸断裂行为是凝聚态物理、爆炸力学以及材料科学等多学科交叉, 且跨越微观、细观和宏观多个时空尺度的复杂问题, 它在工程爆破、高速碰撞、高速切削、高速运转的机器故障, 以及航空航天器和武器装备的防护等领域有着重要的应用^[1-3]。

材料的失效与缺陷的演化过程密不可分。在材料的制备过程中会不可避免的引入各种缺陷, 如空位、位错、晶界、孔洞、裂纹等。在高速加载的过程中, 缺陷的存在不仅能够影响材料的力学性能, 甚至能够改变材料的变形行为和断裂机制。孔洞作为晶体材料中典型且非常重要的一种体缺陷, 材料的力学性能与其生长和聚集密切相关^[4]。D. R. Curran 等人^[5]基于实验观察和大量回收样品的微观统计断裂力学, 提出了微孔洞成核-生长 (NAG 模型) 的模型, 发现孔洞的成核、生长和聚集是材料发生塑性变形和断裂的主要机制。孔洞通常在材料内部的薄弱处 (晶界、微晶粒、杂质等) 成核, 然后在拉应力作用下孔洞长大并聚集, 最终导致材料的断裂。因此, 在高应变率加载下孔洞间的相互聚集过程在材料动态断裂失效机理中扮演着重要的角色^[6]。一方面, 孔洞的快速聚集会导致材料的迅速软化; 另一方面, 孔洞聚集对构建软化函数和相应的断裂判据影响显著。然而,

由于孔洞聚集时间极短, 其难以直观且准确地观察该过程, 使得高应变率下的孔洞演化机理仍不清晰。因此, 理清材料在高应变率下的孔洞聚集行为及机理对揭示其软化行为和断裂机理具有重要意义。

近年来, 主要通过实验手段“冻结”损伤演化的各个时刻, 并通过对大量的回收样品进行显微观察来研究动态载荷下的损伤演化行为。V. A. Lubarda^[7]等人通过激光冲击实验发现空位的扩散无法实现孔洞生长。Y. Alinaghian^[8]等人通过将样品拉伸至不同的预应变, 研究了加工硬化对孔洞生长和聚集的影响, 发现孔洞生长速率随着预应变的增加而增加。然而, 实验手段难以精确的揭示动态损伤演化过程, 且实验设备要求较高, 实验过程较为复杂。分子动力学模拟技术相较于实验, 它能够更直观地观察到微观演化过程, 其在微观尺度下材料塑性变形、断裂等方面取得了不错的效果^[9-11]。F. L. Tang 等人^[12]、J. Marian^[13]和 L. F. Wang^[14]就采用分子动力学模拟的方法得出了与 V. A. Lubarda 相同的结论。王云天^[15]研究了高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长的影响, 发现孔洞在高温下更容易成核与生长。T. H. Gao^[16]研究了孔洞对高熵合金 (HEAs) FeNiCrCoCu 的力学性能影响, 揭示了较大的初始孔洞会降低其抗拉强度, 孔洞是产生初始应变的主要原因。Z. L. Yang^[17]等人研究了

收稿日期: 2023-07-04

基金项目: 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合项目 (U1530140); 重庆市教育委员会科学技术研究项目 (KJQN202001126); 重庆市自然科学基金面上项目 (cstc2020jcyj-msxmX0286)

作者简介: 宋 鹏, 男, 1981 年生, 硕士, 高级实验师, 重庆理工大学机械工程学院, 重庆 400054, E-mail: songkunmail@cqu.edu.cn

孔洞尺寸/位置对力学行为的影响, 结果表明, 孔洞半径越大, 剪应力越低, 模型断裂越早, 同时, 孔洞位置影响了位错分布。唐锦旗^[18]等人研究了不同晶向排列的双孔洞对单晶镁塑性变形的影响, 结果表明, 不同晶向排列的双孔洞对单晶镁的杨氏模量没有影响, 但对屈服强度和强度极限有较大的影响。寇佩佩^[19]等人研究了晶向和温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为的影响, 揭示了晶向和温度对含孔洞 TiAl-Nb 合金的力学性能影响。X. F. Lu^[20]等人研究了孔洞缺陷对 Ni-Co 合金纳米线的拉伸力学性能, 结果表明, 缺陷的引入对合金纳米线性能有很大的影响, 但表面孔洞缺陷相对于内部孔洞缺陷对力学性能影响更小。K. C. Katakam^[21]等人研究了含体积缺陷的纳米镍的拉伸与蠕变行为, 发现屈服强度和弹性模量随着孔洞数量的增加而降低, 多孔洞纳米镍的抗蠕变性低于单孔洞纳米镍。Z. G. Ruan^[22]等人研究了应变率和晶粒尺寸对多晶镍的力学性能影响, 随着应变率的增加, 应变率对杨氏模量影响较小, 屈服应力增大; 弹性模量和屈服应力随着晶粒尺寸的增大而增加。M. J. Wang^[23]等人研究了晶粒数对多晶镍纳米线单轴拉伸性能的影响, 发现相同直径的多晶纳米线的断裂强度随晶粒数的增加而降低, 多晶镍纳米线的断裂强度远低于单晶镍纳米线。B. Yang^[24]通过镍基单晶中 γ/γ' 相纳米压痕的分子动力学模拟, 发现缺陷模型中新位错的成核晚于完美模型, 这是因为孔洞的坍塌消耗了累积的应变能。S. Traiviratana^[25]发现孔洞表面剪切位错环的发射是导致孔洞生长的主要原因。J. P. Wang^[26]研究了孔洞位置对镍基单晶孔洞生长的影响, 发现界面模型的力学性能受孔洞与界面的相互作用影响, 同时材料的塑性变形是由 Shockley 部分位错和 Stair-rod 位错导致。X. B. Liu^[27]等人建立了含孔洞的 Al_2Cu 分子动力学模拟模型, 研究了孔洞大小、数量及孔洞分布对 Al_2Cu 力学性能的影响, 结果表明, 孔洞增大 Al_2Cu 的塑性和抗拉强度均明显下降; 孔洞增多 Al_2Cu 的塑性以及抗拉强度都有不同程度的下降; 改变孔洞分布, 孔洞连线方向与拉伸方向的夹角越小, Al_2Cu 表现出越强的塑性和抗拉强度。王环珠^[28]等人利用分子动力学的方法探究了孔洞位置排布对镁及镁合金塑性变形的影响, 结果表明, 双孔洞单晶镁在与加载方向平行时应力峰值及对应的应变程度最大。J. Y. Li^[29]等人利用分子动力学方法研究了对含有预置微裂纹 α -Ti 模型施加不同方向拉伸载荷, 研究模型内孔洞及位错的变化情况, 进一步揭示孔洞生长的机制与初始缺陷对材料吸收能量在不同划分区域的规律。研究发现: 当拉伸载荷沿着垂直于密排面的 [0001] 方向时, 预置裂纹愈合, α -Ti 会从 hcp 晶格转换为 fcc 晶格, 从而使晶体中的位错种类更多、密度更大。以上的研究主要聚焦于孔洞参数、温度、晶

粒数等对材料力学性能影响, 这对孔洞演化和失效机理提供了有益指导。然而, 孔洞聚集作为孔洞演化的重要阶段, 在上述研究中则鲜有报道。

孔洞聚集行为在孔洞演化过程中扮演着重要角色。

E. T. Seppälä^[30-31]等人采用准静态的加载方式研究了单晶铜中双孔洞的聚集行为, 发现孔洞间距等于孔洞半径时, 孔洞会出现聚集行为。G. P. Potirniche^[32]等人研究了尺寸效应对孔洞聚集过程的影响, 发现了尺寸效应对塑性滑移的成核和演化有较大影响, 进而导致孔洞聚集的不同。L. Y. Zhao^[33]研究了高应变率拉伸载荷下单晶铜的孔洞生长与聚集行为, 发现孔洞半径与孔洞间距会影响孔洞的聚集。W. H. Liu^[34]研究了晶体取向对孔洞的生长行为的影响, 发现孔洞排列平行于最大孔洞的生长方向时, 会导致晶体内部更容易出现聚集效应。X. Yang^[35]等人研究了高应变率下铝的孔洞成核、生长和聚集, 发现孔洞聚集的持续时间随着温度的升高而延长。以上研究都聚焦于孔洞间距和尺寸、晶体取向和温度等因素对孔洞聚集行为的影响, 促进了孔洞聚集行为的理解。然而, 上述研究主要聚集于单孔洞和双孔洞模型, 对于多孔洞模型的研究, 尤其是孔洞聚集行为的内在机理, 以及孔洞聚集对材料力学行为的影响机理尚无报道。

综上所述, 孔洞作为金属材料中的典型体缺陷, 聚集过程非常快速, 导致从实验手段上还缺乏对其微观机理的深入理解和分析, 这也限制了损伤演化在工程上的应用。同时, 采用分子动力学模拟在孔洞生长机理和孔洞聚集行为的研究中取得了较大的进展, 但对于孔洞聚集的微观机理, 尤其是多孔洞单晶镍聚集的微观机制仍缺乏深入的理解。本实验采用分子动力学方法研究含多孔洞单晶镍在拉伸作用下的孔洞生长和聚集过程, 揭示多孔洞中心形成平面与拉伸方向的夹角 (孔洞中心形成平面与拉伸加载方向的夹角) 对单晶镍孔洞聚集行为的影响及微观机理。

1 模拟方法

所有的分子动力学模拟采用大规模分子动力学模拟程序 LAMMPS^[36]实现。采用 X. W. Zhou^[37]等人文中提供的嵌入原子 (EAM) 势函数来描述原子间的相互作用, 研究表明, 该 EAM 势函数很好地描述了金属的晶格常数、弹性常数等性质。该势函数在单轴拉伸和压缩取得了不错效果^[32,38-39]。

多孔洞单晶镍模型的原子构型和孔洞分布如图 1 所示。模型的尺寸为 $50a \times 50a \times 50a$ (a 为单晶镍的晶格常数, 其值为 0.352 nm), x 、 y 、 z 坐标轴分别对应 [100]、[010]、[001] 晶向, 如图 1a 所示。模型中含有 3 个孔洞, 孔洞半径 R 为 $3a$, 各孔洞间距 L 为 $5R$, 加载方向沿 [100]

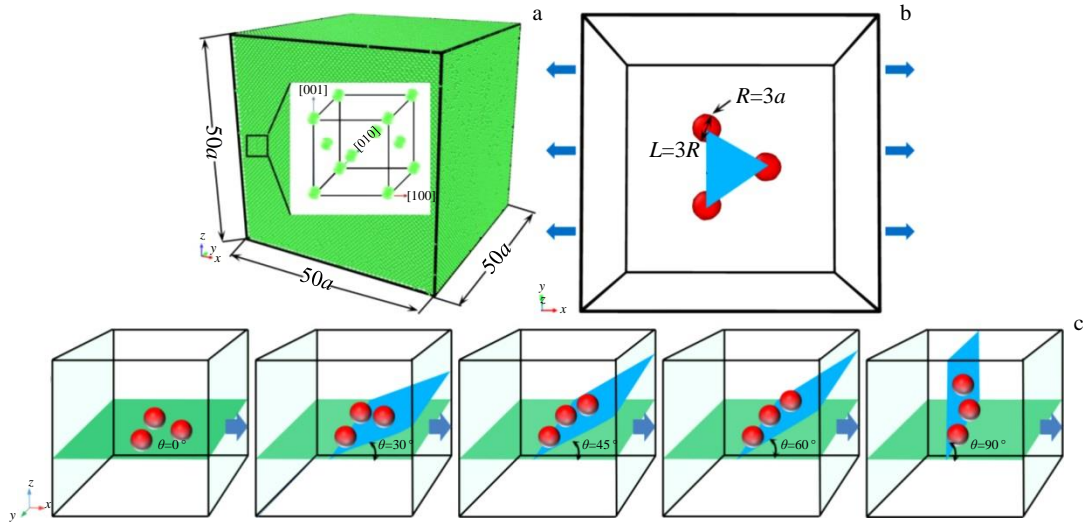


图 1 多孔洞单晶镍模型及孔洞分布: 模型构型与晶体结构, 模型加载示意图, 孔洞平面与拉伸加载方向的夹角示意图

Fig.1 Model and void distribution of porous single-crystal nickel: (a) model configuration and crystal structure, (b) schematic diagram of model loading, and (c) schematic diagram of the angle between the void plane and the direction of tensile loading

晶向 (蓝色箭头表示加载方向, 浅蓝色为孔洞中心连线所构平面), 如图 1b 所示。选取 5 种特殊夹角的孔洞分布, 不同夹角 (θ) 下的孔洞分布, 如图 1c 所示。值得注意的是, 含有孔洞和不含孔洞模型的原子数目分别为 400 000 和 393 740, 其相对误差在 1% 以内, 有效地避免了尺寸效应 (原子数量的差别所带来的误差)。其次, 为减小模型的边界效应, 模型的所有边界条件都采用周期性边界条件。采用 Velocity-Hoover 算法^[40]求解牛顿运动方程, 模拟时间步长为 1 fs。在 300 K 温度下, 采用高斯分布初始化模型中所有原子的热速度。采用共轭梯度法^[41]对模型进行能量最小化。模拟系统为 NPT, 采用 Nosé-Hoover^[42-43] 恒温恒压器使模拟体系的温度为 300 K, 压力为 0 Pa。对模型充分弛豫 35 ps 以达到平衡状态, 消除结构不稳定所带来的模型内部和表面的应力。弛豫结束后, 在 NVT 系统下沿 [100] 方向施加 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$

的应变率对模型施加单轴拉伸载荷。模拟结果采用开放可视化工具 (OVITO)^[44] 软件进行分析。采用临近列表分析法 (common neighbor analysis, CNA)^[45] 对晶体结构类型进行着色, 通过位错分析方法 (dislocation analysis, DXA)^[46] 识别晶体中的位错结构和类型。

2 计算结果和讨论

2.1 多孔洞单晶镍的力学性能

图 2 是不同夹角时多孔洞单晶镍应力-应变曲线与平均流动应力。在拉伸变形初期晶格排列不变, 材料处于弹性变形阶段, Zhao^[47] 等人把弹性阶段曲线的斜率定义为杨氏模量。各单晶镍模型中屈服前的应力应变曲线几乎重合, 表明夹角对单晶镍的杨氏模量影响较小。随着应变的继续增加, 位错在孔洞表面形核长大, 并从孔洞表面发射位错环^[26,31], 材料进入塑性阶段。材料屈服

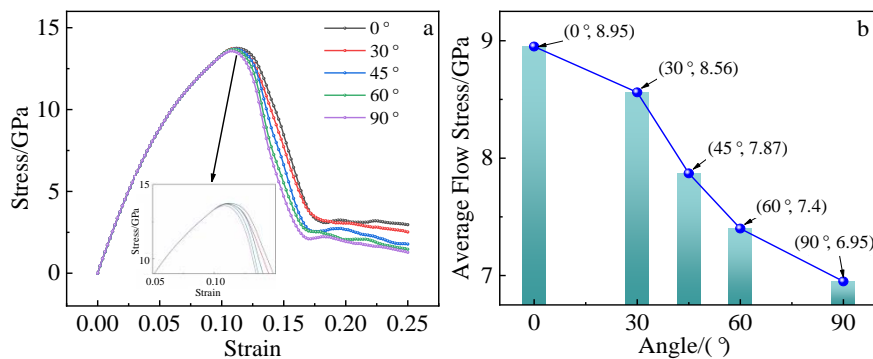


图 2 $\theta=0^\circ\sim 90^\circ$ 多孔洞单晶镍的应力-应变曲线与平均流动应力

Fig.2 Stress-strain curves (a) and average flow stress (b) of porous single-crystal nickel with $\theta=0^\circ\sim 90^\circ$

时, 屈服应力随着夹角的增加而降低, 在 $\theta=0\sim 90^\circ$ 下单晶镍屈服应力从 13.74 GPa 降低至 13.57 GPa, 如图 2a 所示, 表明夹角 θ 对屈服应力影响较小。图 2b 是 $\theta=0\sim 90^\circ$ 的平均流动应力, 平均流动应力^[48-52]是通过计算屈服点到 18% 应变之间所有应力计算得到, 对应平均流动应力分别为 8.95、8.56、7.87、7.40、6.95 GPa, $\theta=0\sim 90^\circ$ 下的平均流动应力减小了 22.3%, 这表明夹角增加对塑性阶段影响较大, $\theta=90^\circ$ 时应力下降速率最快, 损伤演化速率最快。图 3 是 $\theta=0\sim 90^\circ$ 屈服强度下的位错构型与数量。图 3a 是材料屈服时位错构型, 孔洞周围有大量的肖克莱位错环, 为孔洞的生长提供有利条件。图 3b 是多孔洞单晶镍在屈服时的位错数量与位错类型, $1/6\langle 112\rangle$ (Shockley)位错其值分别占到位错总数的 83.1%、80.3%、86.45%、82.5%、82.7%, 这表明材料屈服时, 位错类型主要以 $1/6\langle 112\rangle$ (Shockley)位错为主, 当进入塑性阶段后, 大量的 $1/6\langle 112\rangle$ (Shockley)位错运动会导致孔洞聚集, 材料发生软化现象。

材料在拉伸过程中体系内部会出现孔洞成核、生长和贯通的现象, 最终导致材料发生断裂失效, 因此, 统计拉伸过程中体系内部孔洞体积随时间的变化十分重要, 孔洞体积分数的增长速率也在材料损伤演化中扮演着重要角色。本研究采用了一种计算体系中孔洞体积的后处理统计方法, 该方法将整个模拟区域划分为相同大小的小立方体单元, 孔洞成核尺寸参数被认为是一个小立方体, 由于原子的热激活运动会使某些小立方体单元突然为空, 故将小立方体单元的边长设为 $1.02a$, a 为单晶镍的晶格常数。单晶镍为 fcc 晶体结构, 1 个晶胞内包含 4 个原子, 假定小立方体单元体内包含的原子个数 $N\leq 1$ 时, 该小立方体单元标记为空单元 (1), 否则为实体单元 (0), 则模拟区域的孔洞体积所有空单元计数之和乘以单个小立方体的体积, 整个体系的孔洞体积分数为孔洞体积分数除以整个体系体积^[53], 并且利用该方法得到的结果已被验证^[54]。图 4 为多孔洞单晶镍模型中

孔洞体积分数的演化过程。孔洞演化主要分为弹性阶段、独立生长阶段、快速生长阶段和稳定生长阶段^[55], 如图 4a 所示。值得注意的是, 孔洞体积分数在弹性阶段基本相同, 这是由于弹性变形诱导的晶格畸变对孔洞尺寸的影响较小所导致。在独立生长阶段, 随着孔洞附近的塑性变形的加剧, 孔洞体积分数呈现指数型趋势; 同时, 在该阶段的孔洞独立生长持续时间呈现减小趋势, t_{90} 和 t_0 分别为 4.6 ps 和 7.6 ps, 垂直加载相对于平行加载的孔洞独立生长时间减少了 36.8%, 表明垂直加载促进了单晶镍的孔洞聚集。在快速生长阶段, 随着应变的增加, 孔洞之间塑性交叠区开始相互作用, 孔洞开始快速聚集, 通过对快速生长阶段孔洞体积分数的线性拟合, $\theta=0\sim 90^\circ$ 下, 快速生长阶段孔洞体积分数的斜率 (用 k 值表示) 分别为 0.01107, 0.01112, 0.0112, 0.01141, 0.01158, 发现 $\theta=90^\circ$ 下的孔洞体积分数增长速率最快, 表明 $\theta=90^\circ$ 损伤演化速率最快。在稳定生长阶段, 随着孔洞体积的增加和位错的传播, 应力几乎全部释放, 整个空间充满了位错, 在这个阶段孔洞体积分数大致随应变呈线性增加, 生长进入平稳阶段, 孔洞体积分数增长速率在某一固定值之间波动。

图 5 是应力-孔洞体积演化曲线, 图中的点划线表示孔洞成核时刻 (t_1) 对应的孔洞体积分数^[15], 虚线表示屈服时 (t_2) 对应的孔洞体积分数, 图中孔洞成核时刻约为 20 ps, 表明夹角对孔洞成核影响较小。值得注意的是, 孔洞成核时刻早于屈服时刻, 这是由于孔洞的存在促进了位错在孔洞附近形核^[15]。同时, 随着夹角 θ 的增加, 单晶镍进入塑性阶段的时间提前, 相比夹角 $\theta=0^\circ$, 夹角 $\theta=90^\circ$ 下单晶镍发生屈服所需时间提前 0.8 ps, 这可能是因为孔洞成核与屈服点之间, $\theta=90^\circ$ 时孔洞周围位错运动更加剧烈。

综上所述, 夹角对材料的力学性能有较大的影响, 当材料进入塑性变形之后, $\theta=90^\circ$ 下的材料屈服应力最低

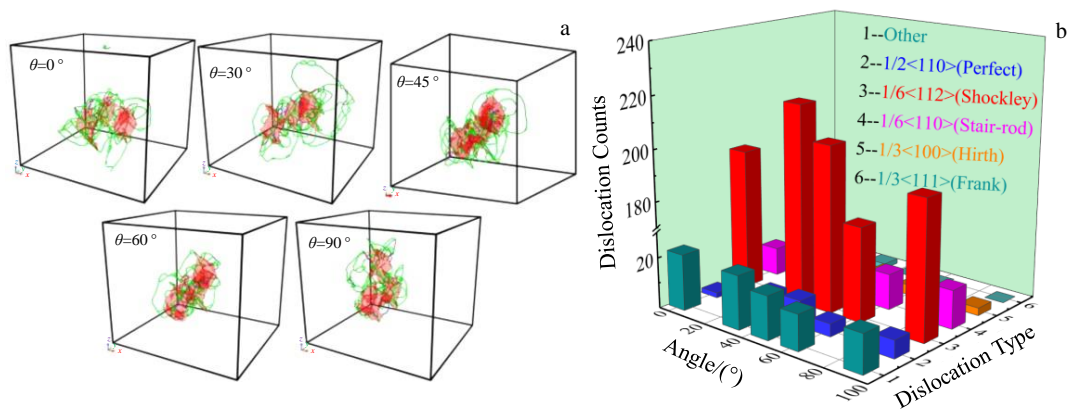


图 3 多孔洞单晶镍屈服时的位错构型与数量

Fig.3 Dislocation configuration (a) and dislocation counts and dislocation type (b) of porous single-crystal nickel at yield

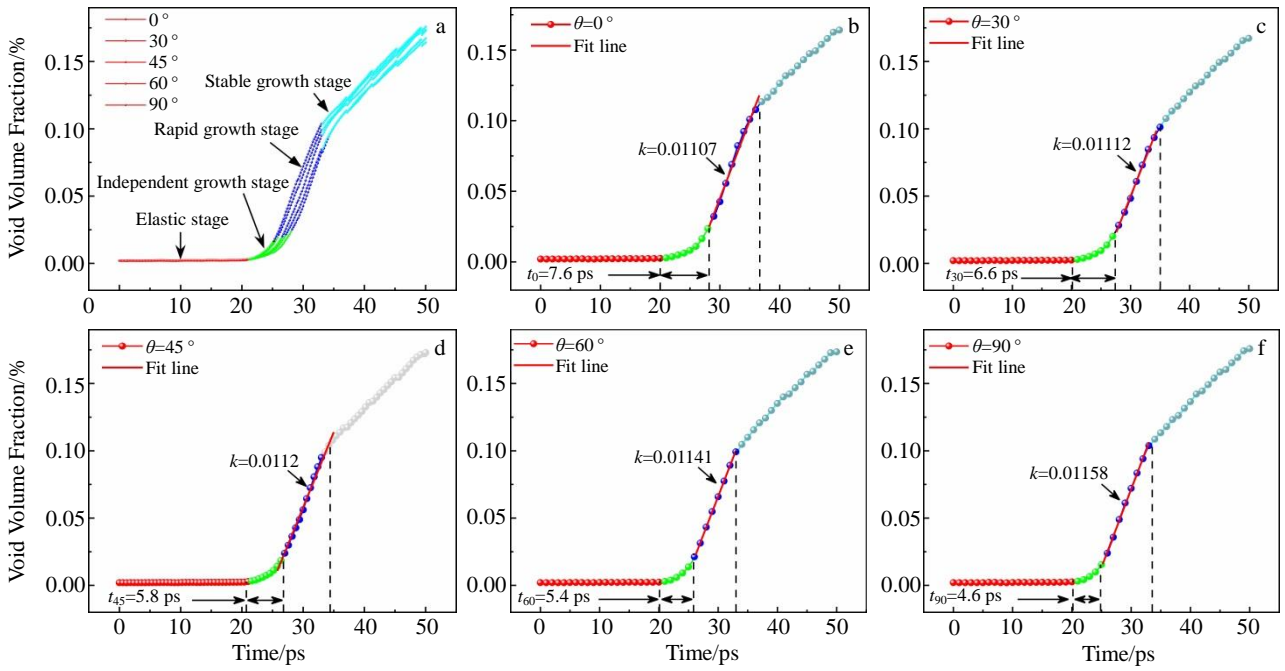


图 4 $\theta=0^{\circ}\sim 90^{\circ}$ 多孔单晶镍模型中孔洞体积分数及演化过程

Fig.4 Void volume fraction at different pinch angles (a), void volume fraction (b-f) evolution of porous single-crystal nickel model for $\theta=0^{\circ}\sim 90^{\circ}$

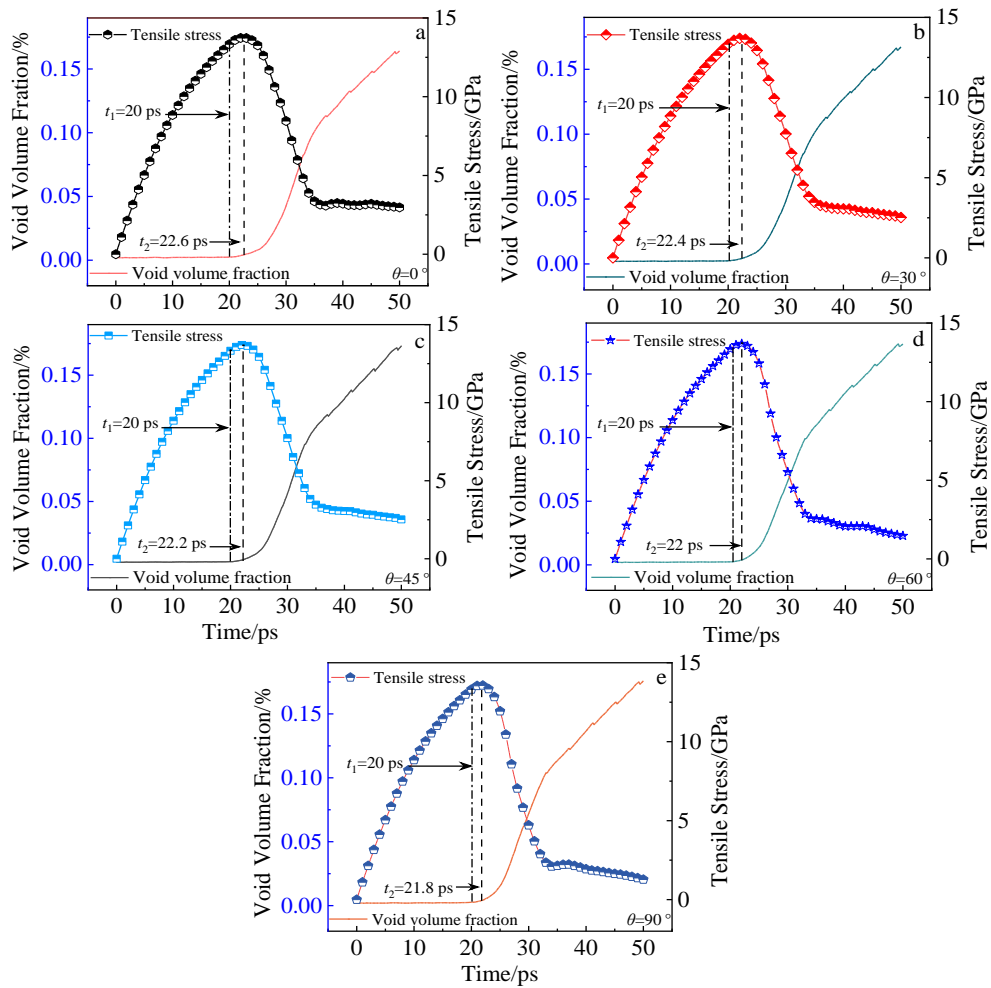


图 5 $\theta=0^{\circ}\sim 90^{\circ}$ 的多孔单晶镍在拉伸过程中的应力-孔洞体积演化

Fig.5 Stress-void volume evolution of porous single-crystal nickel in tension: (a) $\theta=0^{\circ}$; (b) $\theta=30^{\circ}$; (c) $\theta=45^{\circ}$; (d) $\theta=60^{\circ}$; and (e) $\theta=90^{\circ}$

且应力下降速率最快，孔洞的存在导致了以孔洞为位错源的材料会提前位错成核时间，材料最先进入塑性阶段。在 $\theta=90^\circ$ 时，孔洞体积分数独立生长阶段时间最短且快速增长阶段的 k 值最大，这表明在该夹角下孔洞塑性交叠区作用剧烈，孔洞之间最先聚集，导致在该夹角下损伤演化速率最快。

2.2 多孔洞单晶镍的微结构演化

图 6 是夹角 θ 为 0° 时，单晶镍在拉伸过程中的应力-位错长度时程曲线。其中，在应变到达 B 点之前，材料处于弹性阶段，A 点对应 Shockley 部分位错形核点，其对应时间也与孔洞成核相符合，表明孔洞成核主要由 Shockley 部分位错发射位错环形成。当材料屈服后，Other 位错与 Stair-rod 位错开始发射（B 点）。在模拟过程中，Shockley 部分位错在总位错长度中所占比最大，其长度是其它位错总长度的数倍，表明 Shockley 部分位错在塑性变形过程中占据主导。位错的增加导致滑移运

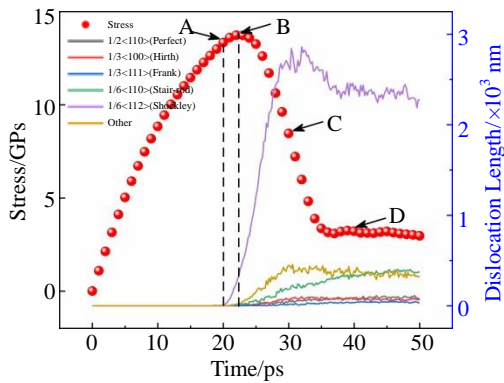


图 6 在 $\theta=0^\circ$ 时应力，位错长度时程曲线

Fig.6 Curves of stress, dislocation length vs time at $\theta=0^\circ$

动更容易进行，导致应力下降，最终导致材料屈服应力的降低。在拉伸变形后期，孔洞聚集导致孔洞之间快速贯通形成新的表面，该表面会吸收和湮灭位错，导致位错数量显著降低。图 7 是 $\theta=0^\circ$ 下孔洞微观演化图，图 7a 对应于模拟开始后 $t=18$ ps 时刻的孔洞位错图像，孔洞首先沿垂直于拉伸方向的表面生长，形状类似于扁球体。随着应变的增加，孔洞表面开始出现位错环如图 7b 所示，孔洞周围开始通过发射不全位错长大。当 $t=20.2$ ps 时刻，位错环开始合并为一个更大的位错环，在位错相交的地方孔洞首次成核如图 7c 所示。图 7d 是当材料进入塑性变形以后，位错运动导致孔洞之间塑性交叠区开始作用，孔洞开始了明显的增大和相互影响。图 7e 对应图 6 中 C 点，由于孔洞之间塑性交叠区的作用导致孔洞之间相互聚集，同时孔洞内部的融合会有新的表面产生，导致部分位错运动湮灭在新表面处。图 7f 中对应图 6 中 D 点，此时处于应力-应变后期的波动部分，所有位错数量基本不变，这是因为此时材料已经形成断裂面，且表面积基本保持不变，位错的产生与位错的湮灭基本维持动态平衡。寇佩佩等人^[4]研究孔洞尺寸对含 Nb 单晶 γ -TiAl 合金中孔洞和位错的演化过程与文中孔洞和位错演化过程基本一致；庞卫卫等人^[56]研究含双孔洞单晶铜中纳米孔洞的成核现象也得到与上述分析类似的结果。

为了深入分析夹角对位错的影响，各位错长度随加载时间的变化曲线如图 8 所示，图中时间轴上的标记点分别为孔洞成核时间与屈服应力时间。不同夹角下孔洞成核到进入塑性变形期间，仅仅存在 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错；进入塑性变形之后，other 位错开始增长，在 20~30 ps 时间段内其占比略高于其余 4 种位错；

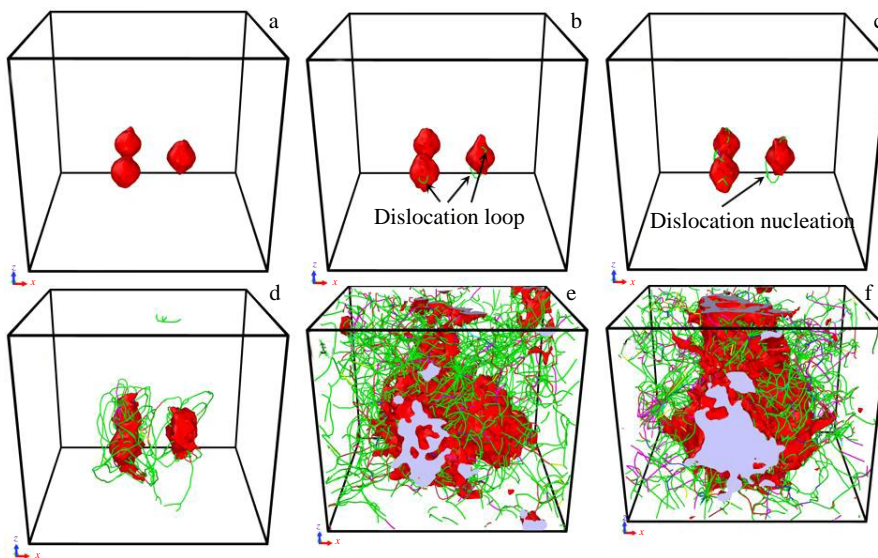


图 7 不同时刻下， $\theta=0^\circ$ 时模型中孔洞及位错演化过程

Fig.7 Evolution of hole and dislocation for the model at $\theta=0^\circ$ under different moments: (a) $t=18$ ps, (b) $t=20.2$ ps, (c) $t=22$ ps, (d) $t=24.8$ ps, (e) $t=28.6$ ps, and (f) $t=30.4$ ps

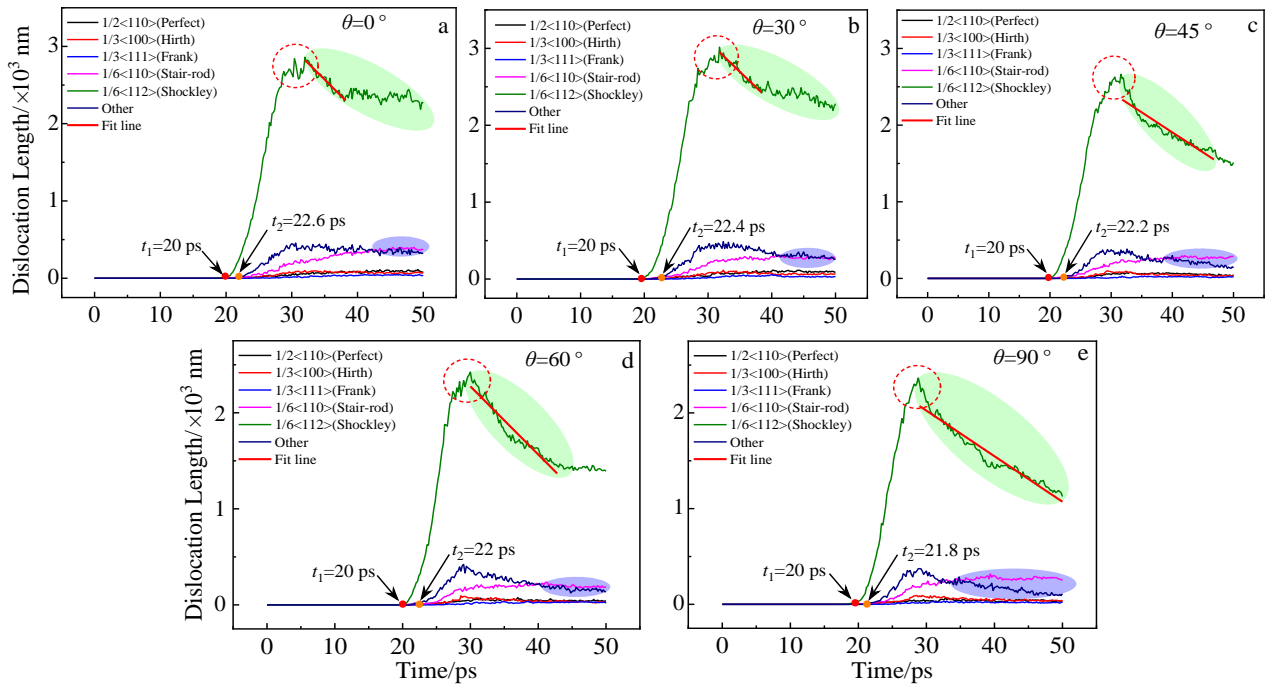


图 8 $\theta=0^\circ \sim 90^\circ$ 多孔单晶镍位错长度演化

Fig.8 Dislocation length evolution of porous single-crystal nickel: (a) $\theta=0^\circ$, (b) $\theta=30^\circ$, (c) $\theta=45^\circ$, (d) $\theta=60^\circ$, and (e) $\theta=90^\circ$

不同的是, 夹角的增加导致了 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错在达到峰值以后持续下降 (如图中 Fit linear 与浅绿色区域), 峰值附近处的图形成“尖锐” (红色虚线圆圈); 同时, Other 位错的变化趋势大致与 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错变化趋势相同, 但夹角的增加导致 Other 位错在 $\theta=90^\circ$ 下 $t=35$ ps 后, 其位错长度明显低于 $1/6\langle 110 \rangle$ (Stair-rod) 位错, 也发现在 $\theta=45^\circ$ 时 other 位错在约 38 ps 后其位错长度略低于 $1/6\langle 110 \rangle$ (Stair-rod) 位错。分析认为, 相对于其它夹角, 当 $\theta=90^\circ$ 时进入塑性阶段, $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错快速且持续运动, 导致孔洞塑性区相互影响剧烈, 孔洞最先聚集, 孔洞在相互聚集贯通之后持续形成新的表面, $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错长度快速且持续性的减少也说明该夹角下新的表面积增长快速且基本维持在某一增长速率范围, 最终造成在该夹角下损伤演化速率快且持续时间长, 导致材料形成更严重的损伤。综上可知, 孔洞成核主要是通过发射 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错环形成, 孔洞的生长主要是 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错的运动, 其对塑性变形能力贡献最大。当 $\theta=90^\circ$ 时, $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错长度在进入塑性变形后的持续降低, 这表明该夹角下的位错运动激烈, 损伤演化程度更大。

图 9 给出了多孔单晶镍在拉伸作用下晶体结构类型的转化。原子类型转化整体趋势基本相同。当孔洞成核时 (t_1), fcc 晶体结构的原子数量开始减少, Other 晶体结构的原子数量增多, 主要是 fcc 晶体结构的原子

向 Other 晶体结构的原子发生变化; 应变的增加使材料进入塑性阶段 (t_2), hcp 晶体结构的原子数量开始增加, 直到 fcc 晶体结构的原子数量到达最低点。不同的是, fcc 晶体结构的原子数量的转化随着夹角的增加其降至最低点的时间减小且降至最低点的 fcc 晶体结构的原子数目更多, 即在 $\theta=90^\circ$ 下 fcc 晶体结构的原子转化速率更快 (图中 k 的绝对值), 这是由于当孔洞中心连线形成的平面与孔洞最易增长方向位于同一平面的时候, 孔洞之间更容易聚集, 这表明更快的转化速率使得损伤演化速率增加。图 10 给出了 $\theta=0^\circ \sim 90^\circ$ 下单晶镍原子排列构型。图 10a 为刚进入塑性变形时刻, 图 10b 为 fcc 晶体结构的原子数量最低点所对应的时刻, 将模型在多孔洞的中心连线处进行切片观察。从 $\theta=0^\circ$ 下的切片发现位错的发射与孔洞自由表面呈现 45° [45], 由 Other 晶体结构原子构成的切面损伤表面积在 $\theta=90^\circ$ 更大, 当进入到 fcc 晶体结构的原子数目最低点时, 同样观察到由 Other 晶体结构原子构成的切面损伤表面积在 $\theta=90^\circ$ 更大, 然而在该角度的应变却最小, 这表明材料达到相同损伤时, 在 $\theta=90^\circ$ 只需要更小的应变, 同时, 切面的损伤表面积大小表明孔洞在该夹角下孔洞之间影响较大, 孔洞更容易聚集, 损伤演化速率更快。

2.3 夹角对孔洞聚集的影响

想要更加直观的分析夹角对孔洞聚集的影响, 有必要从微观结构上直接分析, 图 11 是利用可视化软件 Ovito 进行 DXA 分析后孔洞聚集时刻与聚集时刻位错密

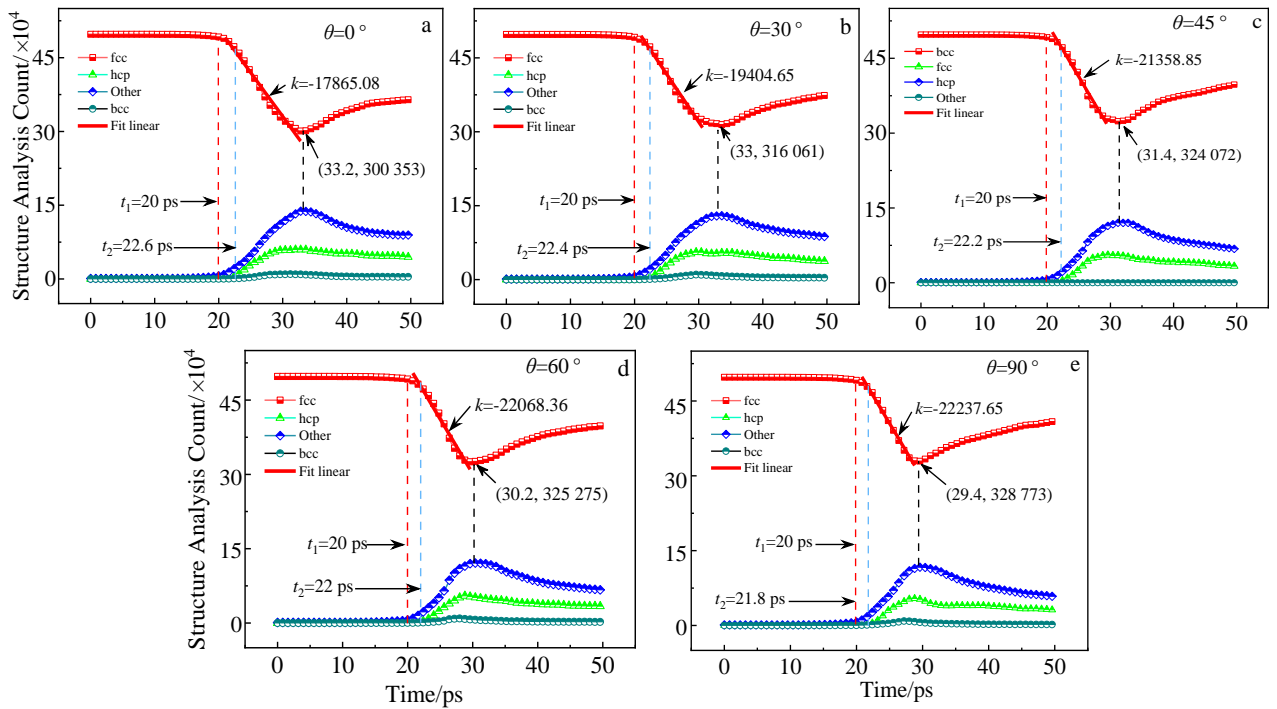


图 9 多孔洞单晶镍 $\theta=0^\circ\sim 90^\circ$ 的原子晶体结构类型转化

Fig.9 Atomic structure transformation of porous single-crystal nickel: (a) $\theta=0^\circ$; (b) $\theta=30^\circ$; (c) $\theta=45^\circ$; (d) $\theta=60^\circ$; and (e) $\theta=90^\circ$

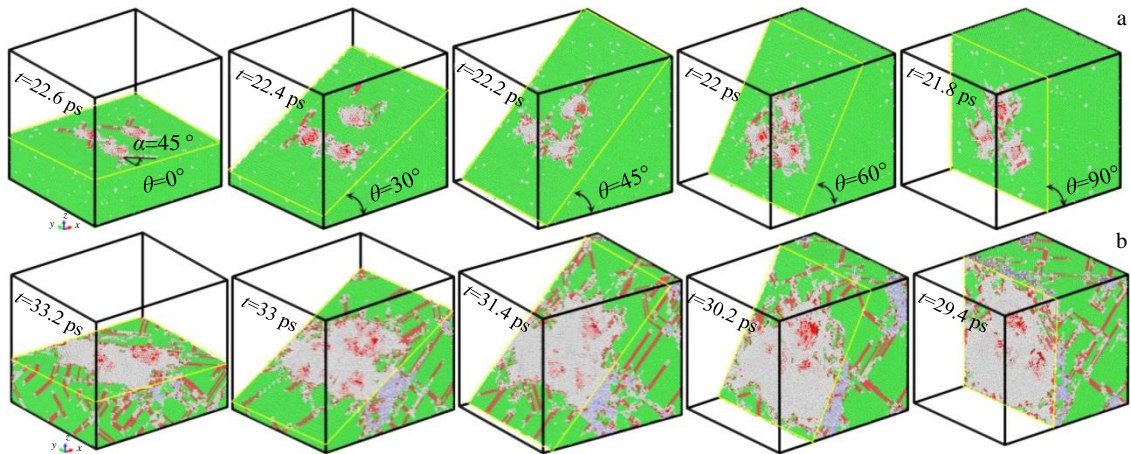


图 10 $\theta=0^\circ\sim 90^\circ$ 多孔洞单晶镍屈服时刻及 fcc 剧烈转变后原子排列构型

Fig.10 Atomic arrangement of porous single-crystal nickel at $\theta=0^\circ\sim 90^\circ$ at the moment of yield (a) and after violent transformation of fcc (b)

度图。为更加准确的判断出夹角对孔洞聚集的影响，借助位错密度分析。选取位错密度的含义是：当孔洞在相同时刻的聚集，位错密度的大小可以帮助分析下一阶段的损伤演化情况。位错密度由 DXA 计算，其公式如下：

$$\rho = \frac{l_{total}}{V} \quad (1)$$

其中， l_{total} 是模型中的总位错长度， V 表示此刻的模型体积。

根据图 11 分析，随着夹角的增加，多孔洞聚集的时间在 $\theta=0^\circ\sim 60^\circ$ 下呈现减少的趋势，但在 $\theta=60^\circ$ 与 $\theta=90^\circ$ 夹角下，孔洞聚集时间相同，借助位错密度分析可知，

在相同时刻下， $\theta=90^\circ$ 的位错密度比 $\theta=60^\circ$ 高出约 64.9%，这就意味着在此之后 $\theta=90^\circ$ 下的损伤演化程度强于 $\theta=60^\circ$ ，随着应变的增加最终 $\theta=90^\circ$ 下的孔洞更容易聚集，塑性阶段的损伤演化速率更快，这表明夹角越大孔洞越容易聚集，夹角对孔洞聚集影响较大，这与唐锦旗^[18]等人研究双空洞不同构型对单晶镁孔洞聚集有明显影响的结论类似；L. Y. Zhao^[33]等人发现孔洞初始表面间距对应力三轴度峰值影响明显，并且应力三轴度峰值可用于指示是否会发生孔洞聚集，也表明初始孔洞表面间距对孔洞聚集有明显影响。

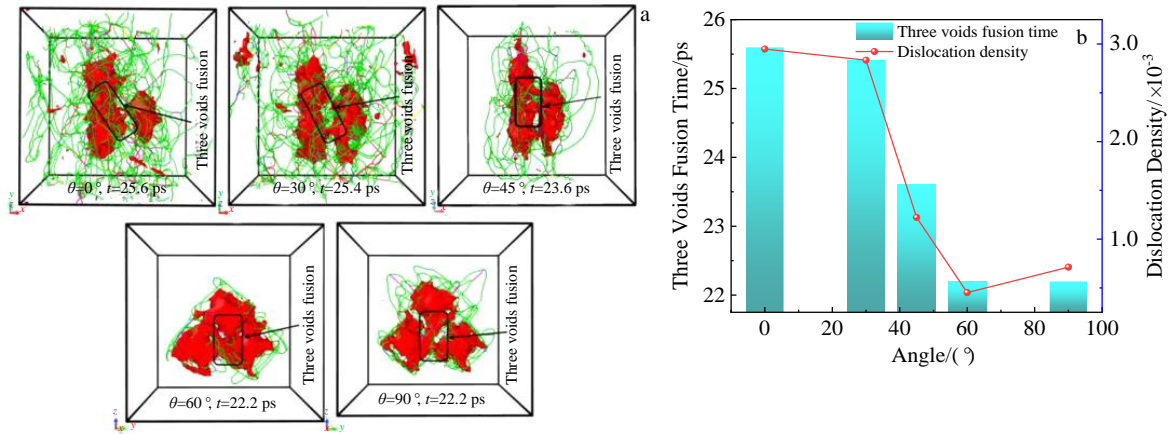


图 11 Ovito 软件分析得孔洞聚集图与聚集时刻位错密度

Fig.11 Void coalescence map (a) and dislocation density (b) for $\theta=0^{\circ}\sim 90^{\circ}$ obtained from Ovito software

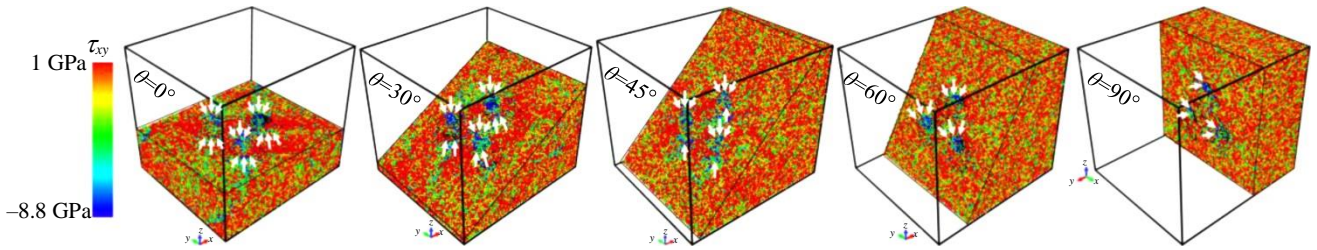


图 12 多孔洞单晶镍在孔洞聚集时刻的应力分布

Fig.12 Stress distribution of porous single-crystal nickel at the moment of void coalescence

图 12 是多孔洞单晶镍在孔洞聚集时刻的应力 (τ_{xy}) 分布图, 图中红色原子表示拉应力, 蓝色原子表示压应力, 由于剪切应力是位错运动的主要原因, 孔洞生长主要依赖于拉应力, 相反, 压应力 (图中白色箭头所示) 会抑制孔洞生长。在 $\theta=0^{\circ}$ 时, 压应力主要呈现对称 (左上、右下) 分布; $\theta=30^{\circ}$ 时, 右下侧的压应力减小; $\theta=45^{\circ}$ 时, 右下侧的压应力明显减小; $\theta=60^{\circ}$ 时, 几乎无右下侧压力, 此时, 压应力只作用在左上侧; $\theta=90^{\circ}$ 时, 左上侧压应力明显减小。这表明随着夹角增大会增加孔洞表面拉应力, 从而促进孔洞生长和聚集。

3 结论

1) 在 $\theta=0^{\circ}\sim 90^{\circ}$ 下, 夹角的增加使屈服应力从 13.74 GPa 降低至 13.57 GPa, 呈现降低趋势; 夹角的增加使平均流动应力明显下降, 从夹角 $\theta=0^{\circ}$ 的 8.95 GPa 降低到夹角 $\theta=90^{\circ}$ 的 6.95 GPa, 导致 $\theta=90^{\circ}$ 时应力下降速率最快, 损伤演化速率最大。分析表明, 夹角的增加减少了孔洞独立生长阶段的时间, 孔洞快速增长阶段的孔洞体积分数增长速率最快, 导致在 $\theta=90^{\circ}$ 下孔洞最先聚集, 应力下降速率最快, 材料最先出现软化现象, 孔洞损伤演化速率最快。

2) 以孔洞为位错源的单晶镍, 通过发射 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错环成核, 成核位于屈服之前, fcc 晶体结构只向 Other 晶体结构转化。材料在塑性阶段, $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错对塑性变形能力起主导作用。但当加载方向垂直于孔洞所构平面 ($\theta=90^{\circ}$), $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) 位错长度持续减少, 切面的损伤表面积最大, 这说明 $\theta=90^{\circ}$ 时, 更激烈的位错运动, 使得孔洞之间相互影响更大, 孔洞生长与聚集更容易, 损伤演化速率加快。

3) 多孔洞单晶镍在微观下的孔洞聚集时间表明, $\theta=0^{\circ}\sim 60^{\circ}$ 的孔洞聚集时间呈现递减现象, $\theta=60^{\circ}$ 与 $\theta=90^{\circ}$ 时孔洞聚集时刻相同, 但 $\theta=90^{\circ}$ 下的位错密度高出 $\theta=60^{\circ}$ 约 64.9%。同时, $\theta=90^{\circ}$ 时, 其孔洞表面的应力主要以拉应力为主, 所受的压应力更小, 更有利于孔洞生长。表明孔洞在 $\theta=90^{\circ}$ 会更容易出现生长与聚集, 夹角的增加使得演化速率加快。

参考文献 References

[1] Li W H, Yao X H, Branicio P S *et al.* *Acta Materialia*[J], 2017, 140: 274
 [2] Ikkurthi V R, Hemani H, Sugandhi R *et al.* *Procedia*

- Engineering*[J], 2017, 173: 1177
- [3] Liao Y, Xiang M Z, Zeng X G *et al. Mechanics of Materials*[J], 2015, 84: 12
- [4] Kou Peipei(寇佩佩), Feng Ruicheng(冯瑞成), Li Haiyan(李海燕) *et al. Materials Reports(材料导报)*[J], 2020, 34(14): 14 140
- [5] Curran D R, Seaman L, Shockey D A. *Physics Reports* [J], 1987, 147(5-6): 253
- [6] Deng Xiaoliang(邓小良), Zhu Wenjun(祝文军), Song Zhenfei(宋振飞) *et al. Journal of Physics(物理学报)*[J], 2009, 58(7): 1
- [7] Lubarda V A, Schneider M S, Kalantar D H *et al. Acta Materialia*[J], 2004, 52(6): 1397
- [8] Alinaghian Y, Asadi M, Weck A. *International Journal of Plasticity*[J], 2014, 53: 193
- [9] Xiong L, Mcdowell D L, Chen Y. *Scripta Materialia*[J], 2012, 67(7-8): 633
- [10] Farrissey L, Ludwig M, Mchugh P E *et al. Computational Materials Science*[J], 2000, 18(1): 102
- [11] Zhang Y Q, Jiang S Y, Zhu X M *et al. Physics Letters A*[J], 2016, 380(35): 2757
- [12] Tang F L, Cai H M, Bao H W *et al. Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232
- [13] Marian J, Knap J, Ortiz M. *Acta Materialia*[J], 2005, 53(10): 2893
- [14] Wang L F, Liu J Q, Dong Y *et al. Sensors & Actuators B Chemical*[J], 2014, 205: 168
- [15] Wang Yuntian(王云天), Zeng Xiangguo(曾祥国), Yang Xin(杨鑫). *Journal of Physics(物理学报)*[J], 2019, 68(24): 17
- [16] Gao T H, Song H, Wang B *et al. International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2022, 237: 107 800
- [17] Yang Z L, Yang Q Y, Zhang G W *et al. Physics Letters A*[J], 2018, 382(11): 781
- [18] Tang Jinqi(唐锦旗), Yao Junping(尧军平), Lv Zhao(吕昭) *et al. Journal of Plasticity Engineering(塑性工程学报)*[J], 2022, 28(12): 148
- [19] Kou Peipei(寇佩佩), Feng Ruicheng(冯瑞成), Li Haiyan(李海燕) *et al. Materials Reports(材料导报)*[J], 2021, 35(10): 10114
- [20] Lu X F, Yang P F, Luo J H *et al. RSC Advances*[J], 2019, 9(44): 25 817
- [21] Katakam K C, Yedla N. *Materials Chemistry and Physics*[J], 2022, 277: 125 560
- [22] Ruan Z G, Wu W P, Li N. *Wuhan University Journal of Natural Sciences*[J], 2018, 23: 71
- [23] Wang M J, Zhang J, Ragab T *et al. 2021 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO)*[C]. New York: IEEE, 2021: 386
- [24] Yang B, Zheng B L, Hu X J *et al. Computational Materials Science* [J], 2016, 114: 172
- [25] Traiviratana S, Bringa E M, Benson D J *et al. Acta Materialia* [J], 2008, 56(15): 3874
- [26] Wang J P, Liang J W, Wen Z X *et al. Computational Materials Science*[J], 2019, 160: 245
- [27] Liu X B, Xiong Z, Fang Z *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2019, 48(9): 2745
- [28] Wang Huanzhu(王环珠), Xue Chun(薛春), Yang Qianhua(杨千华) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2021, 50(4): 1391
- [29] Li J Y, Song J C, Zhang X *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2021, 50(1): 116
- [30] Seppälä E T, Belak J, Rudd R E. *Physical Review Letters*[J], 2005, 93(24): 24 550
- [31] Seppälä E T. *Physical Review B* [J], 2005, 71(6): 64 112
- [32] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Wagner G J *et al. International Journal of Plasticity* [J], 2006, 22(2): 257
- [33] Zhao L Y, Liu Y. *Mechanics of Materials*[J], 2020, 151(1-2): 103 615
- [34] Liu W H, Zhang X M, Tang J G *et al. Computational Materials Science*[J], 2007, 40(1): 130
- [35] Yang X, Zeng X G, Wang J *et al. Mechanics of Materials*[J], 2019, 135: 98
- [36] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117: 1
- [37] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G. *Physical Review B*[J], 2004, 69(14): 144 113
- [38] Wang W D, Yi C L, Fan K Q. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2013, 23(11): 3353
- [39] Kedharnath A, Kapoor R, Sarkar A. *Computers & Structures*[J], 2021, 254: 106 614
- [40] Grubmüller H, Heller H, Windemuth A *et al. Molecular Simulation*[J], 1991, 6(1-3): 121
- [41] Xiang H G, Li H T, Fu T *et al. Acta Materialia*[J], 2017, 138: 131
- [42] Hoover W G. *Physical Review A General Physics*[J], 1985, 31: 1695
- [43] Hoover W G. *Physical Review A*[J], 1996, 34: 2499
- [44] Stukowski A. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 15 012
- [45] Honeycutt J D, Andersen H C. *Journal of Physical Chemistry*[J], 1987, 1(19): 4950
- [46] Stukowski A, Albe K. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(8): 85 001
- [47] Zhao Yanhong, Li Yingjun, Yang Zhian *et al. Chinese J Comput Phys*[J], 2006, 23(3): 343
- [48] An Minrong(安敏荣), Li Silan(李思澜), Su Mengjia(宿梦嘉) *et al. Journal of Physics(物理学报)*[J], 2022, 71(24): 12

- [49] Liu Shu-Lan, Yang Hui-Jing. *Materials Today Communications*[J], 2022, 31: 103 296
- [50] Li X Y, Wei Y J, Lu L *et al.* *Nature*[J], 2010, 464(7290): 877
- [51] Pal S, Reddy K V, Deng C. *Materials Letters*[J], 2022, 324: 132 821
- [52] Yang Zehao(杨泽豪). *Mechanics Research(力学研究)*[J], 2021, 10 (4): 9
- [53] Cui Y, Chen Z T. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016, 25(2): 25 007
- [54] Yang X, Zeng X G, Wang F *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2022, 210: 111 060
- [55] Pang Weiwei (庞卫卫), Zhang Guangcai(张广财), Xu Aiguo(许爱国) *et al.* *Computational Physics(计算物理)*[J], 2011, 28(4): 540
- [56] Pang Weiwei(庞卫卫), Zhang Ping(张平), Zhang Guangcai(张广财) *et al.* *Chinese Science: Physics, Mechanics, Astronomy(中国科学: 物理学、力学、天文学)*[J], 2012, 42(5): 11

Tensile Behavior of Single-Crystal Nickel Containing Void Defects: Void Growth and Coalescence Mechanisms

Song Kun, Liu Hao, Wang Lusheng, Ding Jun, Yi Junhao, Lu Shiqing, Huang Xia
(College of Mechanical Engineering, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, China)

Abstract: Molecular dynamics simulations were used to investigate the effect and mechanism of the angle (θ) between the plane of void center formation and the loading direction on void growth and coalescence behavior in single-crystal nickel under uniaxial tension. The results show that the yield stress and average flow stress of single-crystal nickel decrease with increasing θ , and the rate of stress decrease accelerates with increasing θ . When $\theta=90^\circ$ (loading direction perpendicular to the plane of void center), the independent growth time of voids in single-crystal nickel is the shortest and void coalescence occurs first, leading to the easiest way to entering the softening stage. This is due to the fastest growth rate of void volume fraction and damage evolution rate in single-crystal nickel when $\theta=90^\circ$. When $\theta=90^\circ$, the significant reduction of $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley) dislocation length and the maximum transformation rate of atomic number from fcc crystal structure to Other and hcp crystal structures in single-crystal nickel lead to the fastest damage evolution rate and the most severe damage level. It is worth noting that voids in single-crystal nickel are most likely to coalesce when $\theta=90^\circ$, due to the larger tensile stress on the void surface under this condition.

Keywords: void defects; single-crystal nickel; void coalescence; molecular dynamics

Corresponding author: Huang Xia, Professor, College of Mechanical Engineering, Chongqing University of Technology, Chongqing 400054, P. R. China, E-mail: huangxia@cqut.edu.cn