

# Molecular Dynamics Study of High Strain Rate of Single Crystal Copper Cavity Nucleation and Growth Process

Yun Liu, Qian Zhao, Guanghui Lin, Jiehong Lei\*

Physics and Space Science of Institute, West China Normal University, Nanchong Sichuan  
Email: [jiehonglei@126.com](mailto:jiehonglei@126.com)

Received: May 5<sup>th</sup>, 2018; accepted: May 22<sup>nd</sup>, 2018; published: May 29<sup>th</sup>, 2018

---

## Abstract

The femtosecond laser can achieve high strain rates. We have investigated the damage evolution by void growth and coalescence of single crystal Cu at high strain rates using molecular dynamics simulation. The free surface velocities of single crystal Cu for the flyer velocity at 1.5 km/s and 2.0 km/s are calculated. The strain rates are  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  and  $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  respectively when  $v_0$  are 1.5 km/s and 2.0 km/s. The microvoid evolution during the failure is presented, and the corresponding void distribution and void volume fraction are calculated. The results explain that the mechanism of damage evolution of single crystal Cu at high strain rates. In addition, the effect of strain rates on void nucleation and growth is analyzed. The results provided a theoretical basis for the experimental study of metal spallation under the femtosecond laser.

## Keywords

Void Nucleation and Growth, Molecular Dynamics, High Strain Rate

---

# 分子动力学研究高应变率对单晶铜空洞成核和生长过程的影响

刘 芸, 赵 倩, 林光会, 雷洁红\*

西华师范大学物理与空间科学学院, 四川 南充  
Email: [jiehonglei@126.com](mailto:jiehonglei@126.com)

收稿日期: 2018年5月5日; 录用日期: 2018年5月22日; 发布日期: 2018年5月29日

---

\*通讯作者。

文章引用: 刘芸, 赵倩, 林光会, 雷洁红. 分子动力学研究高应变率对单晶铜空洞成核和生长过程的影响[J]. 物理化学进展, 2018, 7(2): 104-110. DOI: [10.12677/japc.2018.72013](https://doi.org/10.12677/japc.2018.72013)

## 摘要

利用分子动力学模拟研究了高应变率下单晶Cu空洞生长和聚集的损伤演化。计算单晶Cu在1.5 km/s和2.0 km/s时飞片速度的自由表面速度。当 $v_0$ 分别为1.5 km/s和2.0 km/s时,应变率分别为 $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 和 $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。介绍了失效过程中的微观空间演变,并计算了相应的空隙分布和空隙体积分数。结果解释了高应变率下单晶Cu损伤演化的机制。另外,分析了应变率对空隙形核和生长的影响。这些结果为飞秒激光下金属层裂的实验研究提供了理论基础。

## 关键词

空洞形核和生长, 分子动力学, 高应变率

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

飞秒激光具有峰值功率高,作用时间短和非线性吸收特性[1][2][3]。通过飞秒激光加载,目标变形仅在激光脉冲在短时间内发生并且可以实现高应变率。脉冲持续时间内可忽略热传导和流体运动。热损伤和热影响区大大减少。极高的温度和高压使得超短脉冲激光能够适用于所有可以确定和控制消融过程的材料。由于其特点,飞秒激光器在过去几年中得到了迅速发展,现在在物理,化学,生物学,光电子学等领域得到了广泛的应用[4]-[9]。近几十年来,飞秒激光技术发展迅速,对飞秒激光驱动的固体材料激波特性的研究引起了人们的广泛关注。在Badger [10][11][12]等人的早期工作中,他们使用频率干涉法测量了Al材料中飞秒激光驱动的冲击波。然后李[12]等人利用超快显微镜技术研究了玻璃基片上3~10微米厚的铝膜中的冲击波的过程。之后,J. P. Cuq-lelandais [13]采用VISAR测试方法测量了30 J, 300 fs,飞秒激光在100微米厚的铝膜中驱动的冲击波的自由表面速度。结果表明,速度为0.9 km/s,冲击压力目标为160 GPa。这些以前的结果集中在实验测量冲击波的自由表面速度和剥落强度。然而,关于损伤演化的微观进展的信息很少。

随着计算机的发展,数值模拟也成为研究的有用工具。近年来,分子动力学模拟已经在各种研究领域被广泛应用于高效率。基于分子动力学的金属材料微观损伤和剥落研究取得了很大进展。Shao等[14]用MD模拟了单晶铝的失效模式。在他们的研究中,介绍了失效过程中的微观组织演变,并计算和讨论了相应的压力和温度分布。Xiang等[15]对单晶铅中的微裂纹进行了MD模拟,发现经典裂纹和微裂纹的损伤均以空化为主。Rawat等人[16]进行了MD模拟以研究温度对铜空洞成核和生长的影响。他们发现随着温度的升高,核化和生长阈值逐渐下降。Fan等[17]研究了bcc Fe中的空穴形核和生长机制,模拟了bcc Fe中小空位团簇的演化。然而,在高应变率下损伤演化的研究很少。关于应变率对空隙形核和生长的影响的研究仍然很少。因此有必要从微观角度研究飞秒激光与金属材料相互作用的物理过程和机理。在这项工作中,我们的目标是研究单晶Cu在高应变率下的空洞演变,并得到应变率对空隙形核和生长的影响结果。研究结果为飞秒激光金属层裂实验研究提供了理论基础。

## 2. 物理模型和计算方法

本文模拟工作运用 Lammmps 软件实现,采用仿真模型由  $x, y$  和  $z$  方向上的  $45 \times 45 \times 120$  个单元组成。笛卡尔  $x, y$  和  $z$  轴分别对应于  $[100]$ ,  $[010]$  和  $[001]$  结晶学方向。模拟样品由  $\sim 106$  个原子组成。在冲击波加载之前,系统在恒定压力温度集合下在 5 K 和 10 K 下通过速度重新缩放和每 10 个 MD 步骤的各向同性体积缩放来平衡,沿  $x$  和  $y$  方向采用周期性边界条件以减少边界效应。选择 5 K 的低初始温度以减少初始系统的热波动,并且不影响本文的主要结论。加载过程是通过飞行器撞击目标产生的,为了在自由表面附近产生冲击波加载,我们将左薄层(15a)设置为飞行板并将最后一个区域(105a)设置为目标。因此,通过调整冲击速度  $v_0$ , 模拟不同的冲击载荷过程。

## 3. 模拟结果和讨论

模拟的自由表面速度见前期的工作[18]。自由表面速度被广泛用于推断层裂强度和应变率。从前期工作中我们获得了由自由表面速度导出的层裂强度和应变率  $\dot{\epsilon}$ 。V0 分别为 1.5 km/s 和 2.0 km/s 时,应变率分别为  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  和  $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。图 1 和图 2 显示了不同应变率下不同时间空洞分布的快照[18]。

仿真结果表明,单晶 Cu 材料的断裂行为仍然具有韧性断裂特征。空缺的传播时间很长。空洞不是来源于简单空缺的积累,而是来自空缺重叠的空缺。错位核心具有一定的规模。空洞生长取决于其表面发射的错位。非常窄的表面不利于位错成核。所以在各种断层重叠配置中,只有重叠形成较大间隙空位串的配置才能发展成空洞。由于单轴应变仅发生部分位错和位错,由于断层重叠而形成的空位和初始空隙是一根棒,并垂直于加载方向。在单晶金属板样品的冲击卸载过程中可以发现高应变下的单轴拉伸过程。在这个过程中尽管经历了冲击压缩过程中的塑性应变,卸载过程中的许多区域都可能具有单晶单轴拉伸断裂的特征,这可以在细致的回收样品中观察到类似的形态。

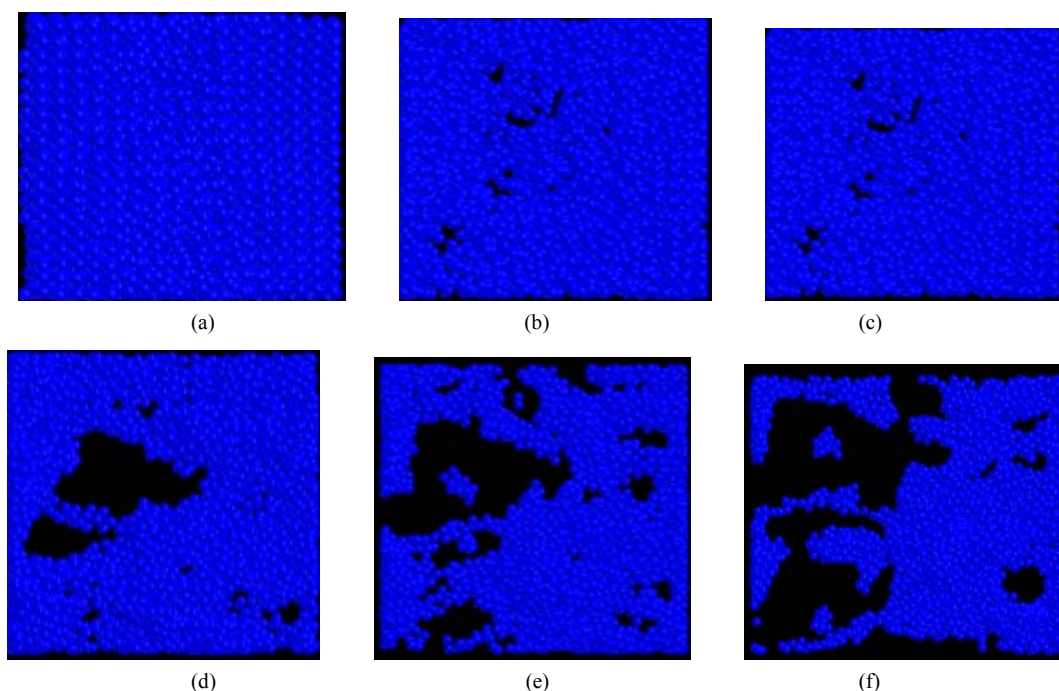
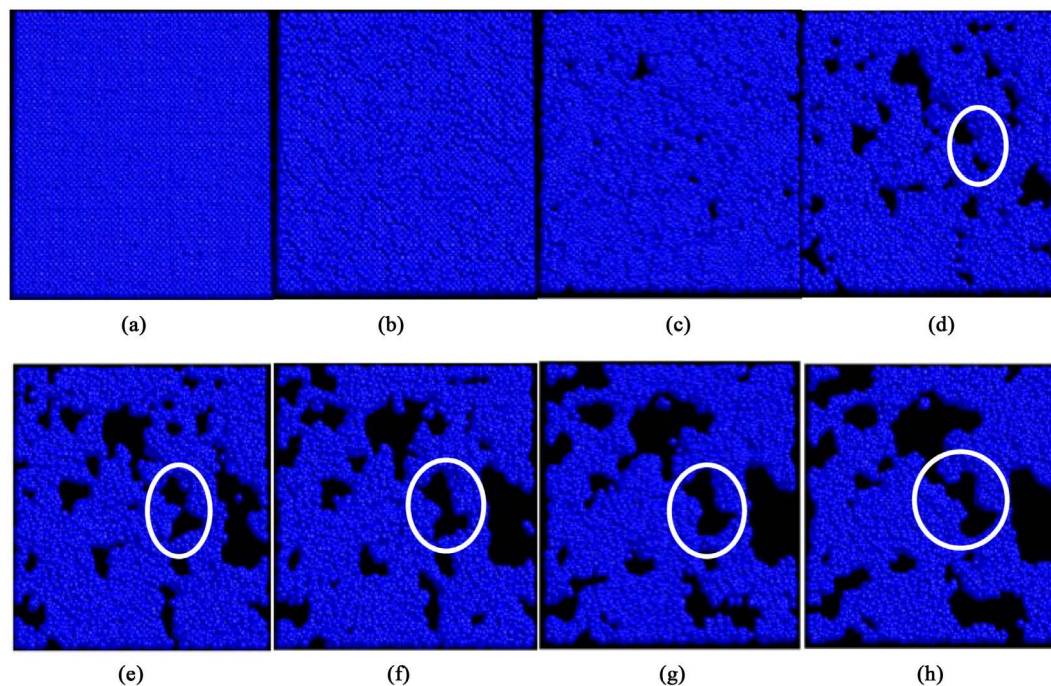


图 1. 应变率为  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  时不同时刻单晶铜的空洞分布快照(a) 10 ps; (b) 11 ps; (c) 12 ps; (d) 13 ps; (e) 14 ps; (f) 15 ps [18]

Figure 1. Snapshots of void distribution for single crystal copper triaxially deformed at  $\dot{\epsilon} = 1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ . (a) 10 ps, (b) 11 ps, (c) 12 ps; (d) 13 ps; (e) 14 ps; (f) 15 ps [18]



**图 2.** 应变率为  $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  时不同时刻单间铜中空洞及分布情况. (a) 8 ps; (b) 9 ps; (c) 10 ps; (d) 11 ps; (e) 12 ps; (f) 13 ps; (g) 14 ps; (h) 15 ps [18]

**Figure 2.** Snapshots of void distribution for single crystal copper triaxially deformed at  $\dot{\epsilon} = 1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ . (a) 8 ps; (b) 9 ps; (c) 10 ps; (d) 11 ps; (e) 12 ps; (f) 13 ps; (g) 14 ps; (h) 15 ps [18]

从文献[18]中我们可以知道空洞体积分布的时间演变可以分为以下几个阶段：

- 1) 曲线的初始部分，由成核产生的空洞体积率大于空洞体积增长率。
- 2) 在空洞体积随时间呈指数增长的阶段，生长所产生的空洞体积主要通过成核而产生。
- 3) 在线性生长阶段，空洞体积的增加主要是由于聚集。

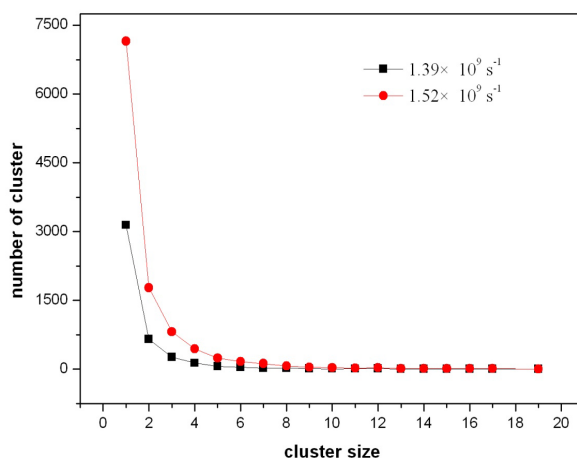
我们发现随着应变率降低，成核和增长阈值出现了延迟。此外，我们可以看到，在空洞体积随着时间呈指数增长的阶段，空洞体积随着应变率的增加而增大。它表明随着应变率的增加，空洞体积迅速增加。

图 3 显示了在不同应变率下的团簇尺寸分布。同样发现，随着应变率增加，小团簇的数量增加，但是大团簇的数量仍然取代，这反映了空隙 - 有核区域随着应变率的增加。

在图 4 中，我们显示了随着时间的推移，不同规模的空置群集数量的演变。从图中可以看出，当时间为  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  时，点空位随时间增加，而空位簇数量在 12 ps 前随时间增加。与图 1(a)，图 1(b)和图 1(c)相比，出现了空洞，并且数量随着点空置量的增加而增加。随着空位簇的增加，大空洞开始出现，数量也增加。在这个地区，由生长所产生的空洞在核化过程中占主导地位。12 ps 后，两个点的空位以及空位簇的数量随时间减少。在图 1(d)，图 1(e)和图 1(f)中，相邻的空洞相互作用形成一个较大的接头，伴随着空位簇数的减少，其中空隙体积的增加是由于聚集。上面的内容和图 5 说明了空洞的成核和生长过程。点空位增多，空洞形成，空洞逐渐增大，相邻空洞相互作用形成较大的接缝，最后形成层裂。与图 4(b)和图 2 相比，可以得出上述结论。

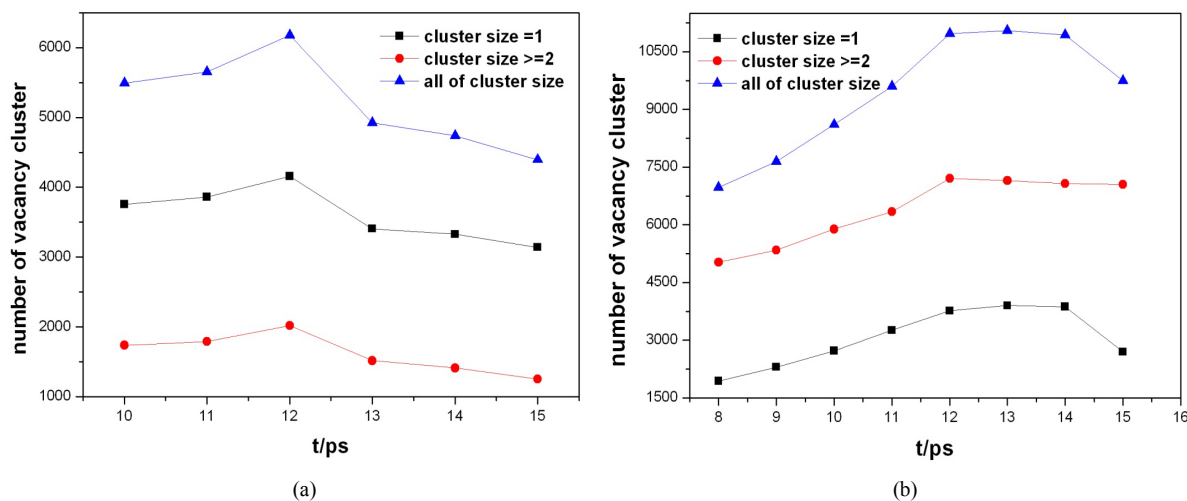
#### 4. 结论

通过分子动力学模拟，我们研究了高应变率下单晶 Cu 的空洞形核和生长。在这项工作中，首先，我



**Figure 3.** Distribution of vacancy cluster sizes at different strain rates

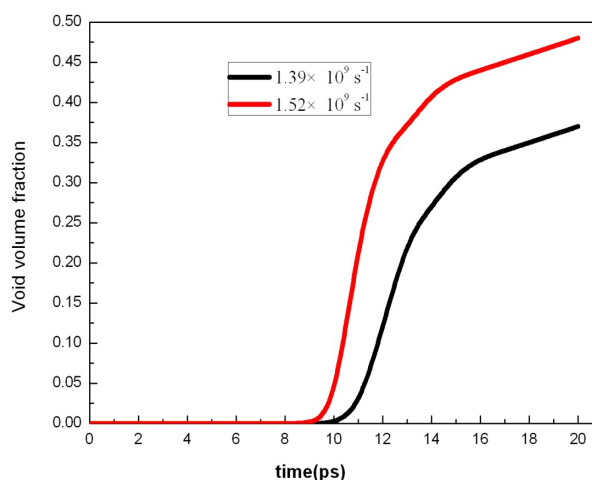
**图 3.** 不同应变率下空位簇大小的分布



**图 4.** 不同尺寸空位簇的数量随时间变化的关系(a) =  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ ; (b) =  $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$

**Figure 4.** The evolution of the number of different size vacancy clusters over time (a) =  $1.39 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ ; (b) =  $1.52 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$

们通过计算自由表面速度来获得应变率。这是首次研究在高应变率下 Cu 层裂演变过程。其次，采用图像自适应阈值分割方法，对高应变率下的空洞分布和空洞体积分数进行统计计算和讨论。空洞演化的过程是成核，生长和聚结的过程。随着应变率的降低，成核和生长阈值出现延迟，这表明随着应变率的增加，空洞的形成被打破。另外，在空洞体积随时间呈指数增长的阶段，随着应变率的增加，曲线的斜率增加。事实证明随着应变率的增加，空洞体积增加得更快。最后，我们统计分析了不同时间和应变率下不同大小空位群的数量。这是一种新的分析方法，通过分析空位群来推断空洞演化的过程。随着应变速率的增加，小团簇的数量增加，但大团簇的数量依然存在，这反映了随着应变速率的增加，空洞-有核区域的扩展。此外，随着时间的推移，不同大小的空位簇的数量的演变说明了空洞的成核和生长过程。图像自适应阈值分割方法可以发现，点空位增加和空洞形成，空洞逐渐增加，然后相邻空隙相互作用形成较大的接缝，最后形成层裂。结果解释了高应变率下单晶铜损伤演化的机制。研究结果为飞秒激光金属层裂实验研究提供了理论基础。



**Figure 5.** Void volume fraction for single crystal copper deformed triaxially at different strain rates [18]

**图 5.** 单晶铜在不同应变率下变形的空洞体积分数[18]

## 基金项目

四川省科技厅应用基础研究面上项目(2017JY0145)。

## 参考文献

- [1] Xu, X.F., Cheng, C.R. and Chowdhury, I.H. (2004) Molecular Dynamics Study of Phase Change Mechanisms during Femtosecond Laser Ablation. *Journal of Heat Transfer*, **126**, 727-734. <https://doi.org/10.1115/1.1797011>
- [2] Perez, D. and Lewis, L.J. (2002) Ablation of Solids under Femtosecond Laser Pulses. *Physical Review Letters*, **89**, 255504-255507. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.255504>
- [3] Luo, S.-N., Germann, T.C. and Tonks, D.L. (2010) Anisotropic Shock Response of Columnar Nanocrystalline Cu. *Journal of Applied Physics*, **107**, 1-7. <https://doi.org/10.1063/1.3437654>
- [4] Luscher, D.J., Bronkhorst, C.A., Alleman, C.N. and Addessio, F.L. (2013) A Model for Finite-Deformation Nonlinear Thermomechanical Response of Single Crystal Copper under Shock Conditions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **61**, 1877-1894.
- [5] Lin, E.Q., Shi, H.J. and Niu, L.S. (2014) Effects of Orientation and Vacancy Defects on the Shock Hugoniot Behavior and Spallation of Single-Crystal Copper. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **22**, 121-129. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/22/3/035012>
- [6] Luo, S.-N., An, Q., Germann, T.C. and Han, L.-B. (2009) Shock-Induced Spall in Solid and Liquid Cu at Extreme strain Rates. *Journal of Applied Physics*, **106**, 253-768. <https://doi.org/10.1063/1.3158062>
- [7] Chau, R., Stölken, J., Asoka-Kumar, P., Kumar, M. and Holmes, N.C. (2010) Shock Hugoniot of Single Crystal Copper. *Journal of Applied Physics*, **107**, 5067-2071. <https://doi.org/10.1063/1.3283924>
- [8] Zhao, K.J., Chen, C.Q., Shen, Y.P. and Lu, T.J. (2009) Molecular Dynamics Study on the Nano-Void Growth in Face-Centered Cubic Single Crystal Copper. *Computational Materials Science*, **46**, 749-754. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.04.034>
- [9] He, A.M., Duan, S.Q., Shao, J.-L., Wang, P. and Qin, C.S. (2012) Shock Melting of Single Crystal Copper with a Nanovoid: Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Applied Physics*, **112**, 247. <https://doi.org/10.1063/1.4757949>
- [10] Evans, R., Badger, A.D., *et al.* (1996) Time- and Space-Resolved Optical Probing of Femtosecond-Laser-Driven Shock Waves in Aluminum. *Physical Review Letters*, **77**, 3359-3362.
- [11] Funk, D.J., Moore, D.S., McGrane, S.D., *et al.* (2004) Ultrafast Studies of Shock Waves Using Interferometric Methods and Transient Infrared Absorption Spectroscopy. *Thin Solid Films*, **453-454**, 542-549.
- [12] Huang, L., Yang, Y.Q., *et al.* (2009) Measurement of Transit Time for Femtosecond-Laser-Driven Shock Wave through Aluminium Films by Ultrafast Microscopy. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **42**, 045502-045508.
- [13] Cuq-Lelandais, J. P., Boustie, M., Berthe, L., *et al.* (2009) Spallation Generated by Femtosecond Laser Driven Shocks

in Thin Metallic Targets. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **42**, 065402-065402.

- [14] Shao, J.-L., Wang, P., He, A.-M., Duan, S.-Q. and Qin, C.-S. (2013) Molecular Dynamics Study on the Failure Modes of Aluminium under Decaying Shock Loading. *Journal of Applied Physics*, **113**, 349-356. <https://doi.org/10.1063/1.4802671>
- [15] Xiang, M.Z., Hu, H.B., Chen, J. and Long, Y. (2013) Molecular Dynamics Simulations of Micro-Spallation of Single Crystal Lead. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **21**, 055005-055010. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/21/5/055005>
- [16] Rawat, S., Warriar, M., Chaturvedi, S. and Chavan, V.M. (2012) Effect of Material Damage on the Spallation Threshold of Single Crystal Copper: A Molecular Dynamics Study. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **20**, 386-386. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/1/015012>
- [17] Brommer, P. and Mousseau, N. (2012) Comment on “Mechanism of Void Nucleation and Growth in bcc Fe: Atomistic Simulations at Experimental Time Scales”. *Physical Review Letters*, **108**, 125501-125508. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.219601>
- [18] 雷洁红, 谷渝秋. 冲击波加载下单晶铜动态破坏微观过程的分子动力学研究[J]. 原子能科学技术, 2016, 50(5): 769-773.

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>  
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2168-6122, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>  
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: [japc@hanspub.org](mailto:japc@hanspub.org)