

DOI: 10.11883/bzycj-2022-0203

# 单晶与纳米多晶锡层裂的分子动力学研究\*

杨鑫<sup>1</sup>, 赵晗<sup>2</sup>, 高学军<sup>1</sup>, 陈臻林<sup>1</sup>, 王放<sup>3</sup>, 曾祥国<sup>2</sup>

(1. 成都理工大学环境与土木工程学院, 四川成都 610059;

2. 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, 四川成都 610065;

3. 西南大学材料与能源学院, 重庆 400715)

**摘要:** 低熔点金属的层裂是目前延性金属动态断裂的基础科学问题之一。采用非平衡态分子动力学方法模拟了冲击压力在 13.5~61.0 GPa 下单晶和纳米多晶锡的经典层裂和微层裂过程。研究表明: 在加载阶段, 冲击速度不影响单晶模型中的波形演化规律, 但影响纳米多晶模型中的波形演化规律, 其中经典层裂中晶界滑移是影响应力波前沿宽度的重要因素; 在单晶模型中, 经典层裂和微层裂中孔洞成核位置位于高势能处; 在纳米多晶模型中, 经典层裂中的孔洞多在晶界(含三晶界交界处)处成核, 并沿晶定向长大, 产生沿晶断裂, 而微层裂中孔洞在晶界和晶粒内部成核, 导致沿晶断裂、晶内断裂和穿晶断裂; 孔洞体积分数呈现指数增长, 相同冲击速度下单晶和纳米多晶 Sn 孔洞体积分数变化规律一致; 经典层裂中孔洞体积分数曲线的两个转折点分别表示孔洞成核与长大的过渡和材料从损伤到断裂的灾变性转变。

**关键词:** 非平衡态分子动力学; 单晶与纳米多晶锡; 应力波演化; 断裂方式; 孔洞体积分数

中图分类号: O383; O347.4

国标学科代码: 13035; 13015

文献标志码: A

## Molecular dynamics study on spallation in single-crystal and nanocrystalline tin

YANG Xin<sup>1</sup>, ZHAO Han<sup>2</sup>, GAO Xuejun<sup>1</sup>, CHEN Zhenlin<sup>1</sup>, WANG Fang<sup>3</sup>, ZENG Xiangguo<sup>2</sup>

(1. College of Environment and Civil Engineering, Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, Sichuan, China;

2. Laboratory of Deep Underground Science and Engineering of Ministry of Education, College of Architecture and Environment, Sichuan University, Chengdu 610065, Sichuan, China;

3. School of Materials and Energy, Southwest University, Chongqing 400715, China)

**Abstract:** One of the fundamental scientific problems of dynamic fracture of ductile metals is spallation of low melting point metals. The classical spallation and micro-spallation of single-crystal (SC) and nanocrystal (NC) tin were carried out using the non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) at shock pressures of 13.5–61.0 GPa. In order to achieve the spallation in the SC and NC models, the piston-target method was utilized. Specifically, the rigid piston was assigned an initial velocity, then the piston impacted the target to generate stress wave, and the stress waveform was controlled by adjusting the loading time after the length of the model along the shock direction was determined. The simulation results show that: during the loading stage, the shock wave velocity has no influence on the waveform evolution of the SC Sn model, but it does have an effect on the waveform evolution of the NC Sn model, in which the front width of the stress wave in classical spallation of the NC Sn model is mainly affected by grain boundary sliding. The void nucleation sites in classical spallation and micro-spallation are found at high potential energies in the SC model. In the NC model, for the classic spallation, voids mostly nucleate at grain

\* 收稿日期: 2022-05-12; 修回日期: 2022-10-07

基金项目: 国家自然科学基金(11972095, 12202081); 四川省自然科学基金(2022NSFSC0443); 四川省科技厅项目(2021YJ0525); 工程材料与结构冲击振动四川省重点实验室资助项目(20kfgk02)

第一作者: 杨鑫(1988—), 男, 博士, 讲师, [scsnyangxin@sina.com](mailto:scsnyangxin@sina.com)

通信作者: 曾祥国(1960—), 男, 博士, 教授, [xiangguozeng@scu.edu.cn](mailto:xiangguozeng@scu.edu.cn)

boundaries (including the triple junctions of the grain boundaries) and grow along grain boundaries, resulting in intergranular fractures; for the micro-spallation, voids nucleate at the grain boundary and inside the grain, resulting in intergranular fracture, intragranular fracture, and transgranular fracture. The void volume fraction increases exponentially, and the variation law of void volume fraction of SC and NC Sn is the same under the same impact velocity. The two turning points of the void volume fraction curve in classical spallation represent the transition from nucleation to growth and the catastrophic transition from damage to fracture.

**Keywords:** NEMD; single-crystal and nanocrystal tin; Stress wave evolution; fracture mode; void volume fraction

激光、爆裂或强冲击作用下延性金属材料的动态损伤断裂是武器科学和材料动力学的前沿科学问题之一。层裂, 作为延性金属动态断裂的一种重要方式, 是由压缩应力波在材料自由面反射的稀疏波与卸载稀疏波相互作用产生的一种典型拉伸破坏现象<sup>[1]</sup>。根据材料是否熔化, 可将层裂分为经典层裂与微层裂。若材料在层裂过程中始终保持为固态, 则称为经典层裂; 当材料在层裂过程中发生固液相变, 则称为微层裂。

经典层裂最初发现可追溯至 1914 年, Hopkinson<sup>[2]</sup> 最先对金属材料的经典层裂进行了相关研究。在此基础上, 大量学者从实验<sup>[3-8]</sup>、理论<sup>[9-13]</sup> 和数值模拟<sup>[14-16]</sup> 等三方面开展了经典层裂的研究, 并取得了重要的进展<sup>[17-18]</sup>。例如, 在破坏准则方面, Rinehart<sup>[19]</sup> 提出了与时间无关的最大拉应力瞬时断裂准则。Tuler 等<sup>[20]</sup> 注意到断裂并非瞬时发生, 而是时间累积效应, 并提出了 Tuler-Butcher 累积损伤破坏准则。在层裂微观机制方面, Curran 等<sup>[21]</sup> 通过大量实验观察, 认为材料断裂是微孔洞成核、生长与贯穿造成的, 并提出了孔洞成核与长大 (nucleation and growth, NAG) 模型, 标志着动态断裂机制的研究正式进入了微观尺度。

为更好地观测到材料断裂过程内部微观损伤演化过程, 研究人员发展了一系列测量和回收技术, 如高速摄影技术<sup>[22]</sup>、X 射线照相<sup>[23-24]</sup>、质子照相<sup>[25]</sup>、同步辐射三维成像和试样回收分析<sup>[26]</sup> 等。尽管实验技术已取得重大进步, 但是实验设备仍难以捕捉整个微层裂过程的连续图像, 并且所测物理量也相对较少。此外, 由于微层裂现象本身非常复杂, 仅从测试分析的角度还无法全面揭示这一过程。

近年来, 随着计算机水平快速发展, 分子动力学方法逐渐成为实验研究的重要补充手段。分子动力学模拟不仅克服了实验技术的缺陷, 还可以从原子角度充分认识、理解微层裂现象, 有助于研究微结构动态演化<sup>[27-29]</sup>。Luo 等<sup>[30]</sup> 通过非平衡态分子动力学 (non-equilibrium molecular dynamics, NEMD) 研究了冲击波波对单晶 Cu 的动态破碎过程, 研究表明孔洞成核易发生在塑性和固态非晶区域, 且相比方波, 衰减冲击波导致的层裂损伤范围更小。Shao 等<sup>[31]</sup> 开展了单晶 Al 微层裂的分子动力学研究, 发现孔洞成核主要沿着晶体密排面 {111}, 且孔洞形貌随着冲击速度增加更趋近于球形。Hahn 等<sup>[32-33]</sup> 采用非平衡态分子动力学, 研究了晶向对单晶和多晶 Ta 层裂行为的影响, 认为含残余孪晶变形的晶向可以降低层裂强度, 并在多晶 Ta 中探讨了孔洞沿晶成核和长大行为。

相比中高熔点金属, 低熔点金属 (如 Pb、Sn 等) 在冲击载荷下更容易发生微层裂现象, 因此逐渐成为微层裂研究的热点<sup>[34-35]</sup>。Xiang 等<sup>[36-37]</sup> 利用分子动力学软件 LAMMPS 模拟了单晶和纳米多晶 Pb 的经典层裂和微层裂, 发现两者的微观机制一致, 均为孔洞成核、长大与贯穿, 主要不同在于孔洞成核位置的数量与空间分布; 同时, Xiang 等<sup>[36-37]</sup> 认为晶界对经典层裂和微层裂具有重要影响, 并探讨了熔化与孔洞成核和增长的关系。接着, Xiang 等<sup>[38]</sup> 讨论了斜波冲击过程中加载升时对单晶 Pb 层裂行为的影响, 研究发现长升时比短升时的孔洞分布范围更广, 且层裂厚度随升时增加而增加, 但层裂片中温度和密度则随升时增加而下降。Liao 等<sup>[39]</sup> 通过对比单晶 Sn 的经典层裂与微层裂现象, 发现经典层裂与微层裂的微观机制都为孔洞成核、增长和贯穿; 微层裂的孔洞成核数量相对较多, 且经典层裂中孔洞分布相对集中, 而微层裂的孔洞相对分散。该研究结果与 Xiang 等<sup>[36]</sup> 的结果高度一致。Shao 等<sup>[40]</sup> 通过分子动力学主要分析了衰减冲击波作用下单晶 Pb 微层裂中波形演化和损伤发展等。Wang 等<sup>[41]</sup> 也研究了衰减冲击加载过程中单晶 Pb 的微层裂, 分析了熔化程度对层裂强度的影响, 探讨了部分熔化与完全熔化情况下孔洞体积变化规律。Wang 等<sup>[42]</sup> 利用非平衡态分子动力学方法研究了单晶 Sn 的层裂强度和微结构演化, 认为层

裂强度与冲击压力、相态、温度和应变率有关,且随着冲击压力增加而降低;同时,孔洞最大数量随冲击压力增加而增加,并给出了孔洞平均半径和体积分数的历史演化过程。

上述研究从微观上分析了低熔点金属微层裂中的损伤演化行为,进一步加深了研究者对层裂机理的认识和理解。但绝大多数研究对象都为单晶材料,而实际中金属常以多晶形式存在,并且晶界会影响材料冲击特性,因此研究多晶材料的层裂行为更具有重要意义。本文采用非平衡态分子动力学方法,借助开源软件 LAMMPS,进一步开展单晶(single crystal, SC)和纳米多晶(nanocrystalline, NC)锡(Sn)的微层裂行为研究。

## 1 模拟方法

本文采用分子动力学开源软件 LAMMPS 模拟单晶和纳米多晶 Sn 的微层裂行为。Sn 原子间的相互作用由 Ravelo 等<sup>[43]</sup>发展的势函数描述,且 Liao 等<sup>[39]</sup>通过 Hugoniot 曲线验证了该势函数在动态冲击作用下的适用性。

采用活塞-靶方法模拟 Sn 微层裂行为。如图 1 所示,单晶和纳米多晶 Sn 的  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向尺寸分别为 29.52、29.52 和 147.60 nm,  $x$ 、 $y$  和  $z$  方向对应 [100]、[010] 和 [001] 晶向,总原子数约为  $4.32 \times 10^6$ 。根据 Voronoi 方法,采用 AtomsK 软件<sup>[44]</sup>建立纳米多晶 Sn 模型,晶粒平均尺寸为 14.76 nm。需要说明的是,模型左侧为加载端,右侧为自由面。在冲击之前,将周期性边界条件施加原子系统三个方向,运用共轭梯度法对模拟体系进行能量最小化。随后,采用等温等压(isobaric-isothermal)系综(NPT 系综),让原子系统在 300 K 温度下进行充分弛豫,时间为 10 ps,以达到可以忽略系统残余应力的状态。接着,将 NPT 系综变为微正则(microcanonical)系综(NVE 系综),并将系统  $z$  轴方向([001])的周期性边界条件变为自由边界条件,并施加刚性活塞一初速度  $u_p$ (分别为 0.5、1.0 和 1.5 km/s),撞击靶以实现冲击波的产生。活塞加载时间为 10 ps,然后移除活塞,即解除活塞与靶之间的相互作用以实现卸载,卸载过程计算时间为 90 ps,总模拟时间为 100 ps。在弛豫与冲击过程中,模拟时间步皆为 1.0 fs。为进一步分析层裂过程中的应力波演化,采用一维 binning 分析技术获取应力波轨迹。此外,所有分子动力学模拟结果均采用 ovito 软件<sup>[45]</sup>进行后处理。

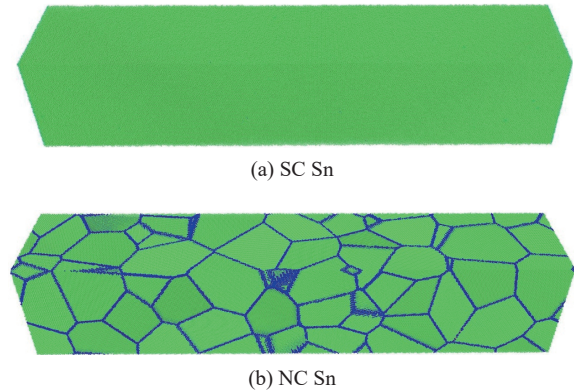


图 1 分子动力学模拟模型

Fig. 1 Simulation models of molecular dynamics

## 2 结果分析与讨论

### 2.1 势函数验证

为进一步验证本文采用的势函数在动态力学性能方面的适用性,通过非平衡态分子动力学模拟了单晶和纳米多晶 Sn 的层裂过程,获取了不同冲击速度下的 Hugoniot 压力  $p_H$  和温度  $T_H$ ,如表 1 所示。可以发现,相同冲击速度下单晶与纳米多晶 Sn 的 Hugoniot 压力值基本一致。Soulard 等<sup>[35]</sup>采用了与本文一样的势函数,通过 Hugoniotstat 方法<sup>[46-47]</sup>给出了  $u_p = 0.5$ 、1.0 和 1.5 km/s 时的 Hugoniot 压力  $p_H$ ,分别为 13.9、32.1 和 55.3 GPa; Wang 等<sup>[42]</sup>基于 Sapozhnikov 等<sup>[48]</sup>提出的势函数,运用非平衡态分子动力学方法获得了  $u_p = 0.5$ 、1.0、1.5 km/s 时的  $p_H$ ,分别为 15.58、36.94 和 60.1 GPa。对比发现,本文结果略大于 Soulard 等<sup>[35]</sup>的模拟结果,但与 Wang 等<sup>[42]</sup>的数值模拟结果比较接近。在模拟过程中,不同的势函数会造成结果有一定的偏差,因此为进一步验证模拟结果的合理性,将三者的数值模拟结果与 Marsh<sup>[49]</sup>的实验结果进行了对比,如图 2 所示,其中方块表示 Marsh<sup>[49]</sup>的实验结果,圆圈表示 Soulard 等<sup>[35]</sup>的分子动力

学结果, 三角形表示 Wang 等<sup>[42]</sup> 的分子动力学结果, 菱形与星形分别表示本文单晶和纳米多晶 Sn 的分子动力学结果。可以发现, Soulard 等<sup>[35]</sup> 的模拟结果最接近实验值, 而 Wang 等<sup>[42]</sup> 的结果偏差最大。当  $u_p = 0.5$  和  $1.0$  km/s 时, 本文单晶和纳米多晶 Sn 的  $p_H$  值比较接近实验值; 当  $u_p = 1.5$  km/s 时,  $p_H$  值稍大于实验值和 Soulard 等<sup>[35]</sup> 的模拟值。整体而言, 本文的计算结果较为合理, 即选择的势函数可以描述材料的动态力学行为。

表 1 材料物态变化与层裂类型

Table 1 Matter state variation and spallation classification

Sn材料	$u_p$ /(km·s <sup>-1</sup> )	$p_H$ /GPa			$T_H$ /K	物态	冲击熔化	分类
		本文	文献[35]	文献[42]				
单晶	0.5	14.0	13.9	15.58	485.0	固态	未熔化	经典层裂
	1.0	34.6	32.1	36.94	1086.0	固液混合态	卸载熔化	微层裂
	1.5	60.5	55.3	60.1	2311.0	液态	加载熔化	微层裂
纳米多晶	0.5	13.5	-	-	484.0	固态	未熔化	经典层裂
	1.0	33.5	-	-	1062.0	固液混合态	卸载熔化	微层裂
	1.5	61.0	-	-	2391.0	液态	加载熔化	微层裂

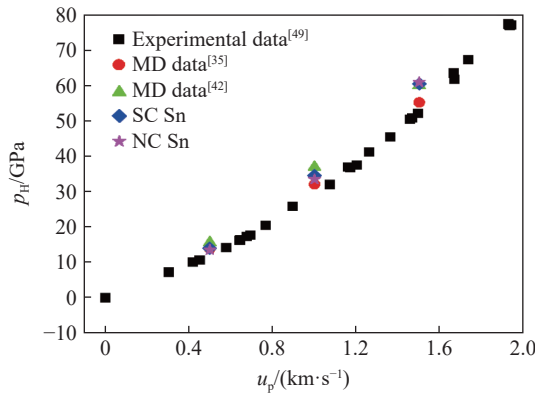


图 2 Hugoniot 压力  $p_H$  与冲击速度  $u_p$  的关系

Fig. 2 Relation of Hugoniot pressure  $p_H$  and shock velocity  $u_p$

另外, 通过计算得到了 Hugoniot 温度  $T_H$ , 如表 1 所示。同时, 通过对比 Sn 的压力-温度相图<sup>[48,50-53]</sup>, 判定了冲击过程中 Sn 的物态, 这与 Liao 等<sup>[39]</sup> 和 Wang 等<sup>[42]</sup> 给出的冲击过程中 Sn 的物态一致。

### 2.2 应力波传播

图 3 表示不同冲击速度下加载过程中压力波 ( $p_{zz}$ ) 形演化过程, 其中黑色曲线为活塞加载结束时的波形, 红色曲线表示应力波传播至自由面过程中的波形, 蓝色曲线表示应力波即将到达自由面时的波形。对于单晶 Sn 模型而言, 当  $u_p = 0.5$  km/s 时,  $t = 10$  ps 时的应力波波形为方波, 其特点为波形的前沿和尾巴陡峭, 波形中间为 Hugoniot 平台, 其压力表示 Hugoniot 压力;  $t = 20$  ps 时, 波形由方波开始变为梯形波, 主要原因是活塞移除后, 加载端产生的稀疏波逐渐赶上压缩波, 稀疏波与压缩波之间的相互作用导致压缩波尾巴拖长, 形成梯形波;  $t = 35$  ps 时, 稀疏波继续影响压缩波, Hugoniot 平台变窄, 压缩波尾巴进一步拖长, 呈现出更加明显的梯形波。当  $u_p = 1.0$  和  $1.5$  km/s 时, 单晶 Sn 的波形演化过程基本一致, 且应力波均以梯形波的形式抵达自由面。

对于纳米多晶 Sn 模型, 当  $u_p = 0.5$  km/s 时,  $t = 10$  ps 时的应力波前沿不如单晶 Sn 的波形陡峭, 波前沿呈现一定宽度, Hugoniot 平台宽度也相对较小, 这可能与晶界和原子结构等因素有关。冲击过程中, 冲



击波会在晶界处反射, 并且晶界会吸收一定的冲击波能量, 产生塑性变形, 这会导致冲击波前沿出现一定宽度。  $t = 20$  ps 时, 稀疏波进一步缩小 Hugoniot 平台, 波形尾巴开始拖长;  $t = 35$  ps 时, Hugoniot 平台消失, 波形的压力峰值低于  $p_H$ , 波形由梯形波变为三角形波, 且三角形波的压力峰值 (13.0 GPa) 略小于 Hugoniot 压力 (13.5 GPa), 即以衰减三角形波抵达自由面。当  $u_p = 1.0$  和  $1.5$  km/s, 在  $10 \sim 20$  ps 时, 波形由方波变为梯形波; 应力波分别以三角波、梯形波抵达自由面。值得注意的是, 波形演化过程中的压力峰值一直保持为 Hugoniot 压力。

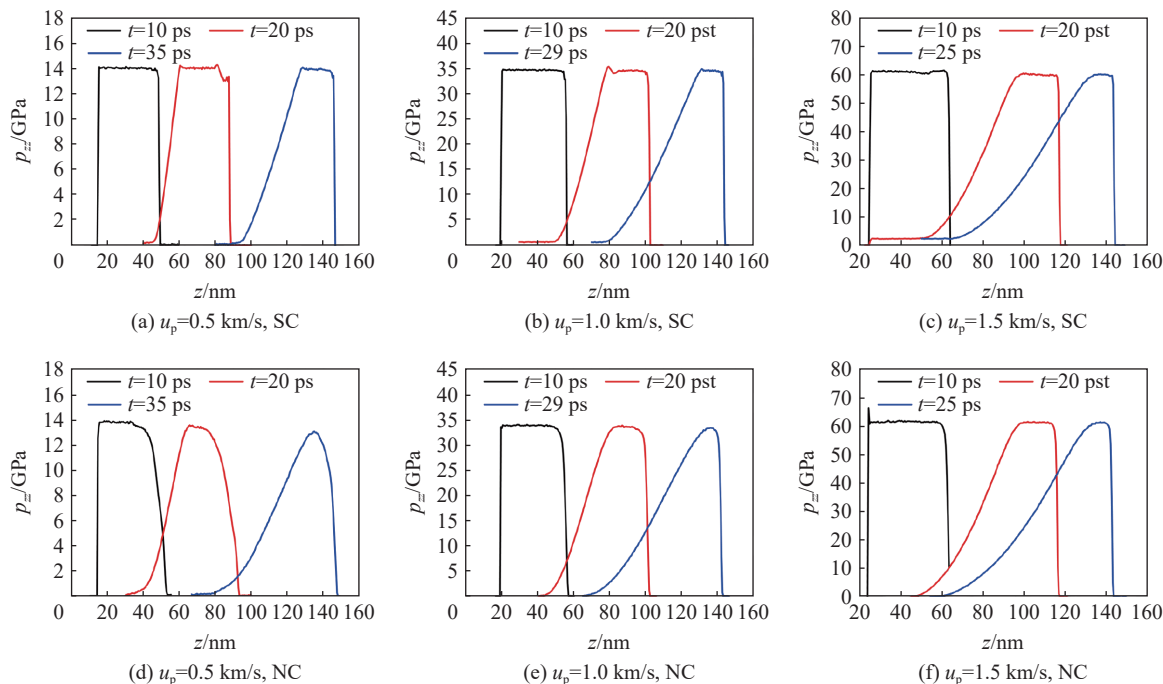


图 3 不同冲击速度下应力波 ( $p_{zz}$ ) 波形演化过程

Fig. 3 Evolutionary processes of stress wave ( $p_{zz}$ ) profiles at different shock velocities

综上所述, 在单晶 Sn 模型中, 波形演化规律与冲击速度无关, 其演化规律为方波  $\rightarrow$  梯形波。在纳米多晶 Sn 模型中, 波形演化规律与冲击速度有关, 具体为:  $u_p = 0.5$  和  $1.0$  km/s 时, 波形变化规律为方波  $\rightarrow$  梯形波  $\rightarrow$  三角波;  $u_p = 1.5$  km/s 时, 波形变化规律为方波  $\rightarrow$  梯形波。另外, 需要说明的是, 相对方波 (即稳态冲击波) 而言, 不管卸载稀疏波能否追赶上冲击波波头, 梯形波和三角波都应为衰减冲击波。

从材料结构而言, 单晶与纳米多晶材料的区别在于晶界。当  $u_p = 0.5$  和  $1.0$  km/s 时, 应力波波形受晶界影响, 而  $u_p = 1.5$  km/s 时, 应力波波形则不受晶界影响。从材料物态而言, 在加载阶段,  $u_p = 0.5$  和  $1.0$  km/s 对应材料的固态,  $u_p = 1.5$  km/s 时对应液态。根据波形变化规律, 可知固态对波形变化有重要影响, 而液态对波形基本上无影响。可见, 固态下晶界对波形变化有重要影响, 而液态下波形演化与晶界无关, 因为晶界和晶粒已经熔为一体。

### 2.3 应力波剖面与原子结构的关系

为进一步探讨冲击波波形与原子结构之间的关系, 分别选取了单晶和纳米多晶 Sn 在  $u_p = 0.5$  km/s 和  $t = 32$  ps 时的压力波形和原子结构进行对比, 如图 4 所示。

在图 4(a) 中, 可以观察到原子结构图中应力波波阵面后方出现了体心立方 (BCC) 结构, 该晶格变形区域对应着波形的 Hugoniot 平台和部分卸载波形。然而, 在单晶 Sn 模型中基本上未发现位错产生。在应力波剖面图中, 可以发现波形呈现梯形波, 波前沿 (波形蓝色部分) 比较陡峭, 没有出现明显的双波结构 (弹性前驱波和塑性波)。其原因可能是由于发生晶格变形的原子较少和无位错的形成, 导致无法观

测到波形分离。在已冲击区域, 原子结构恢复到了面心立方(FCC)结构, 这主要因为卸载波追赶上压缩波的原因。

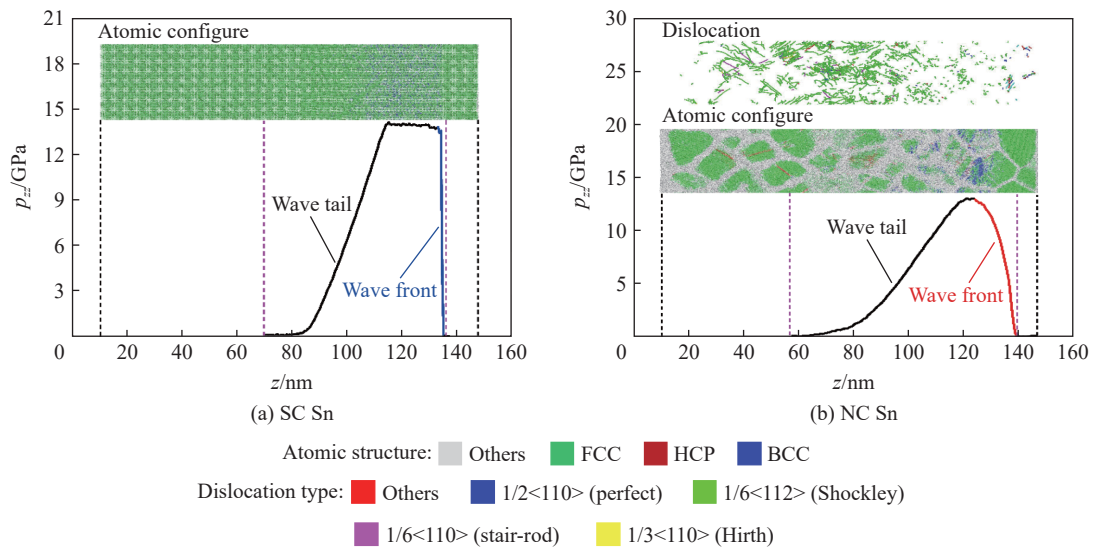


图 4 应力波剖面与原子构型的关系

Fig. 4 The relation of stress wave profile and atomic structure

在图 4(b) 中, 发现波阵面后少量的 BCC 和密排六方结构(HCP)原子, 其中 HCP 和 BCC 是由堆错和晶格变形引起的。位错主要以 Shockley 类型为主, 伴随着少量 Stair-rod 类型位错和其他位错。Shockley 位错主要分布在波形尾巴对应的区域, 且位错线相对较长, 而应力波前沿和波形峰值附近位错数量较少且较短。尽管原子结构出现了塑性变形, 但是在波形上未发现明显的双波结构(弹性前驱波和塑性波)。相比单晶 Sn 的波形, 纳米多晶 Sn 的波形前沿(曲线红色部分)宽度较大, 这可能是材料塑性变形引起的。

在加载压缩阶段, 材料首先发生弹性变形, 形成比较窄的弹性前驱波; 然后, 随着加载压力增大, 材料发生塑性变形, 主要体现在晶界滑移和位错发射的微观机制上<sup>[54]</sup>。在塑性变形过程中, 压力促使晶界滑移, 产生一定的塑性区域, 从而形成初始塑性波; 当压力变大, 晶界开始发射位错, 并伴随着晶界变形, 进一步形成塑性应力波。如果冲击压力达到相变压力, 材料发生相变, 产生相变波。

图 4(b) 中, 在波前沿对应的原子区域内(约为  $z=120\sim 140$  nm), 位错密度较低, 表明: 一是纳米多晶 Sn 的塑性变形主要以晶界滑移为主, 二是晶界位错发射较少, 没有进一步产生塑性应力波, 因此在波形上无法表现出明显的塑性波。当压力从峰值开始降低时, 材料发生弹塑性卸载(波形曲线黑色部分), 其卸载过程的波形与加载端产生的稀疏波和压缩波相互作用有关。在纳米多晶 Sn 中, 弹塑性卸载形成了更多的位错, 但不会立刻引起堆错消失, 这可从原子模型的波后区域(即黑色与紫色虚线之间的区域)证实。

## 2.4 层裂过程

### 2.4.1 层裂初期过程

孔洞成核、长大和贯穿是层裂形成的主要机制。为进一步研究冲击速度和晶界对孔洞成核、长大和贯穿的影响, 本文对比了  $u_p=0.5$  和  $1.5$  km/s 时单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞行为, 如图 5~图 12 所示, 其中原子采用势能(potential energy, PE)着色, 孔洞采用橙色表示。为更好地观察层裂面内部孔洞的演化行为, 采用切片方法获得了原子切片图, 如图 7、图 8 和图 11、图 12 所示。

当  $u_p=0.5$  km/s 时, 对于单晶 Sn 而言, 在  $t=46$  ps 时, 在层裂面上出现了孔洞, 孔洞主要处于成核阶段, 特点是孔洞数量少, 分布随机, 个别孔洞已成形;  $t=48$  ps 时, 在拉应力的作用下, 层裂面上孔洞大量增加, 并出现明显的长大现象, 但主要体现在各孔洞独自长大;  $t=50$  ps 时, 层裂面附近的孔洞进一步长

大, 孔洞之间开始出现接触和贯穿;  $t = 55$  和  $60$  ps 时, 在冲击方向上基本上无新增孔洞, 原有孔洞主要以贯穿为主。

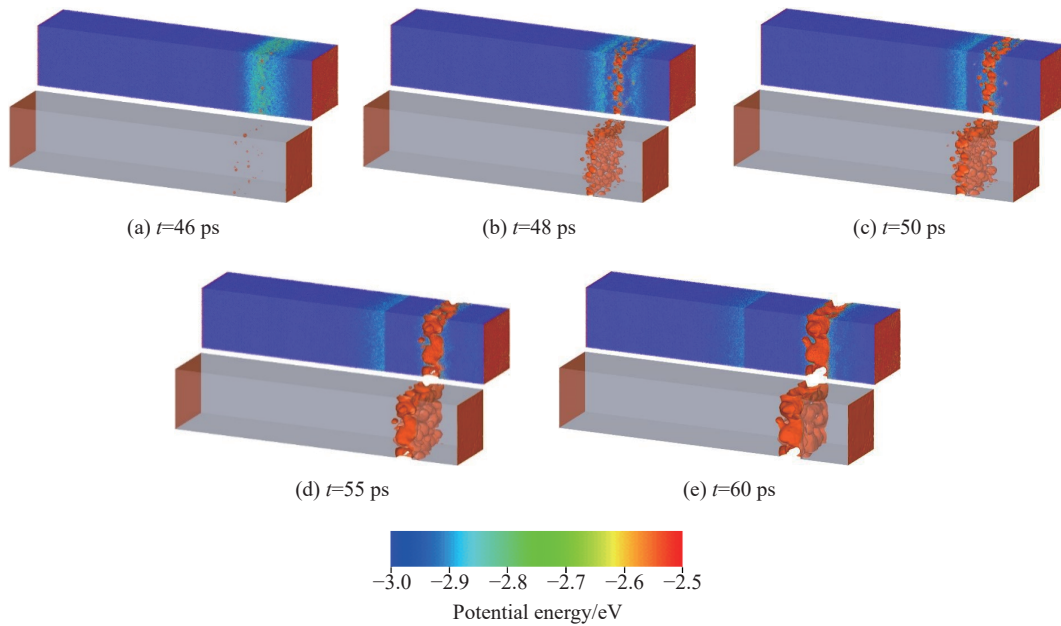


图 5  $u_p = 0.5$  km/s 时单晶 Sn 的孔洞成核、长大与贯穿过程

Fig. 5 Process of void nucleation, growth and coalescence in SC Sn at  $u_p = 0.5$  km/s

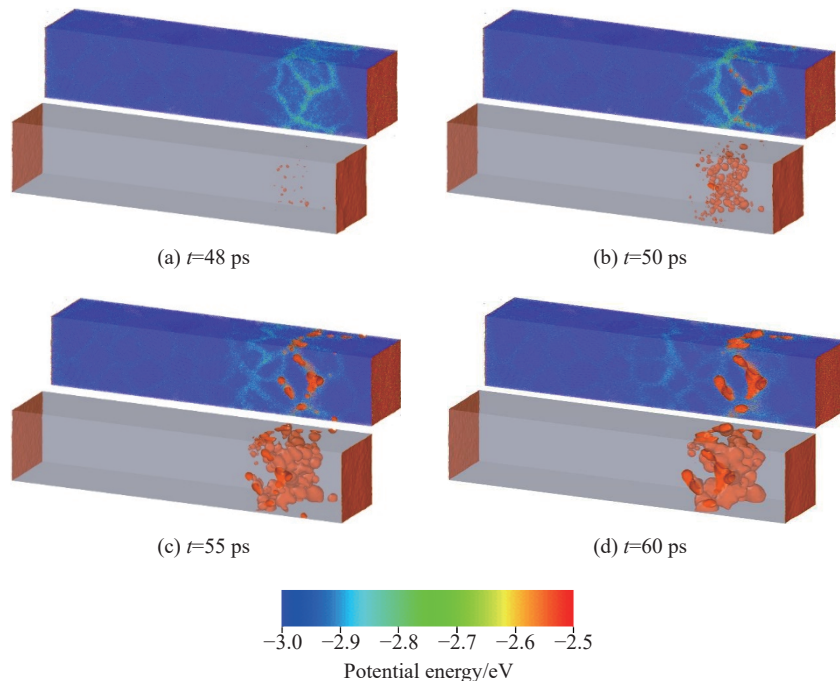


图 6  $u_p = 0.5$  km/s 时纳米多晶 Sn 的孔洞成核、长大与贯穿过程

Fig. 6 Process of void nucleation, growth and coalescence in NC Sn at  $u_p = 0.5$  km/s

当  $u_p = 0.5$  km/s 时, 在纳米多晶 Sn 模型中,  $t = 48$  ps 时, 发现孔洞出现在晶界处(图 6 每个上方的模型中的青绿色原子代表晶界), 表示孔洞已经开始成核, 其成核时间相比单晶 Sn 晚了近 2 ps;  $t = 50$  ps 时, 可以明显发现孔洞在晶界处开始成核和长大, 孔洞特点表现为数量较多且大小相对均匀;  $t = 55$  ps 时, 孔



洞进一步长大, 并且相互接触, 主要以沿晶长大为主;  $t = 60$  ps 时, 孔洞之间沿晶贯穿, 预示着层裂主要以沿晶断裂为主。

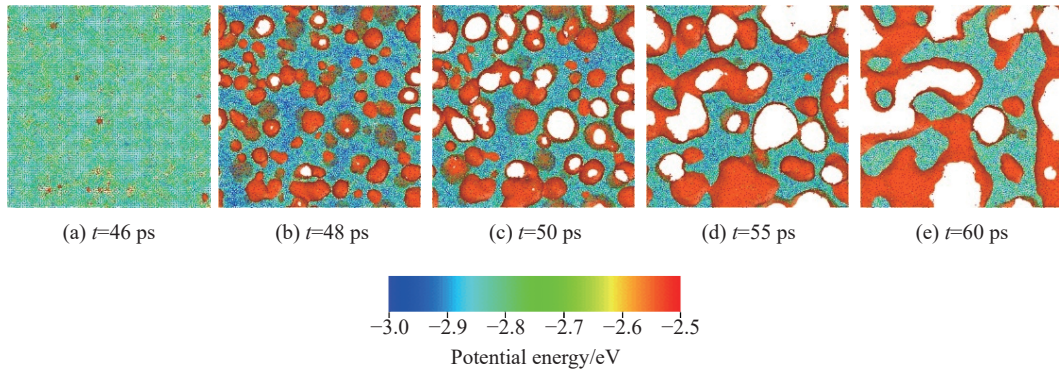


图 7  $u_p = 0.5$  km/s 时单晶 Sn 层裂区域孔洞演化过程的截面

Fig. 7 Section of spallation zone in SC Sn at  $u_p = 0.5$  km/s

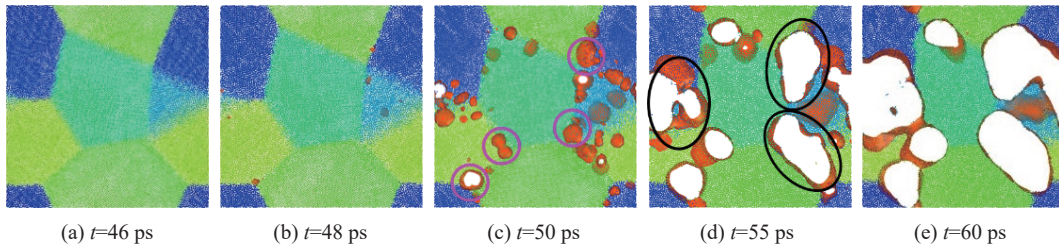


图 8  $u_p = 0.5$  km/s 时纳米多晶 Sn 层裂区域孔洞演化过程的截面

Fig. 8 Section of spallation zone in NC Sn at  $u_p = 0.5$  km/s

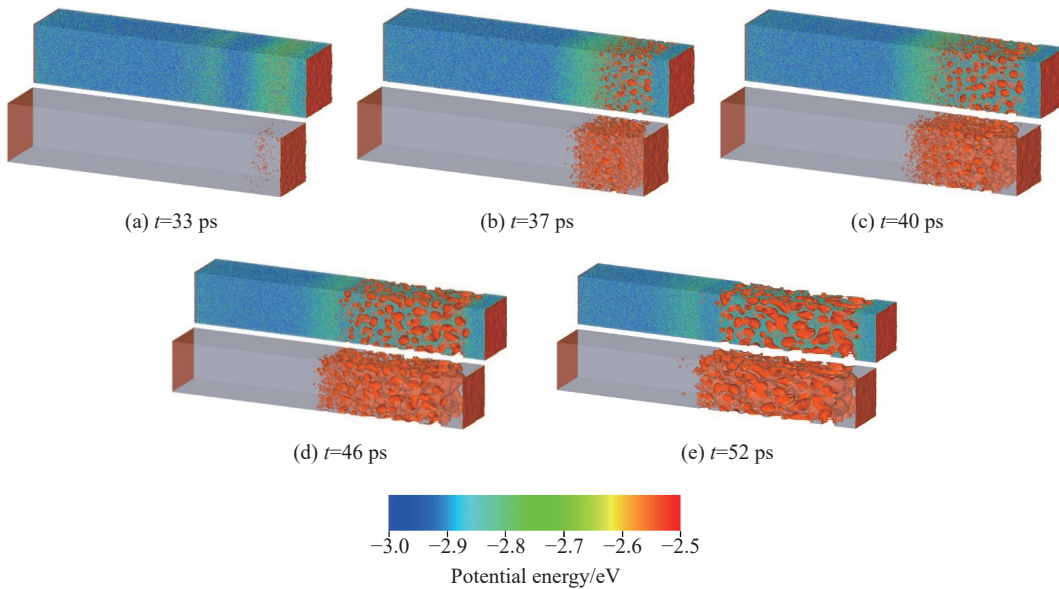


图 9  $u_p = 1.5$  km/s 时单晶 Sn 的孔洞成核、长大与贯穿过程

Fig. 9 Process of void nucleation, growth and coalescence in SC Sn at  $u_p = 1.5$  km/s

在图 7 和图 8 中, 单晶 Sn 模型采用 PE 着色, 纳米多晶 Sn 模型采用晶粒编号着色。在单晶 Sn 模型中,  $t = 46$  ps 时孔洞成核位置主要位于原子势能较大处, 表明该处原子之间距离较大。当拉应力超过孔洞长大阈值, 成核处原子之间距离进一步变大, 孔洞由成核变为长大。 $t = 48 \sim 60$  ps 时, 层裂面中孔洞分



布较均匀, 体现出了长大和贯穿过程。在纳米多晶 Sn 模型中,  $t = 46$  ps 时, 在层裂面上未发现孔洞;  $t = 48$  ps 时, 孔洞在晶界处成核;  $t = 50$  ps 时, 孔洞易在三晶粒交界处成核和长大, 如紫色圈所示;  $t = 55$  和  $60$  ps 时, 孔洞发生沿晶扩展, 如黑色圈所示。对比发现, 经典层裂中单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞演化行为差异主要体现在成核位置、孔洞分布、孔洞扩展方向三方面。

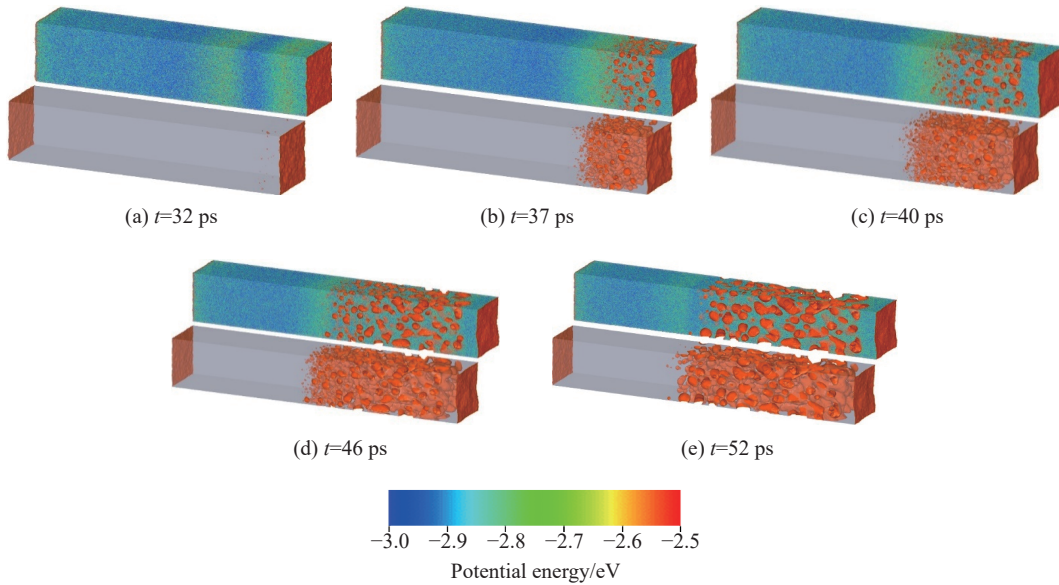


图 10  $u_p = 1.5$  km/s 时纳米多晶 Sn 的孔洞成核、长大与贯穿过程

Fig. 10 Process of void nucleation, growth and coalescence in NC Sn at  $u_p = 1.5$  km/s

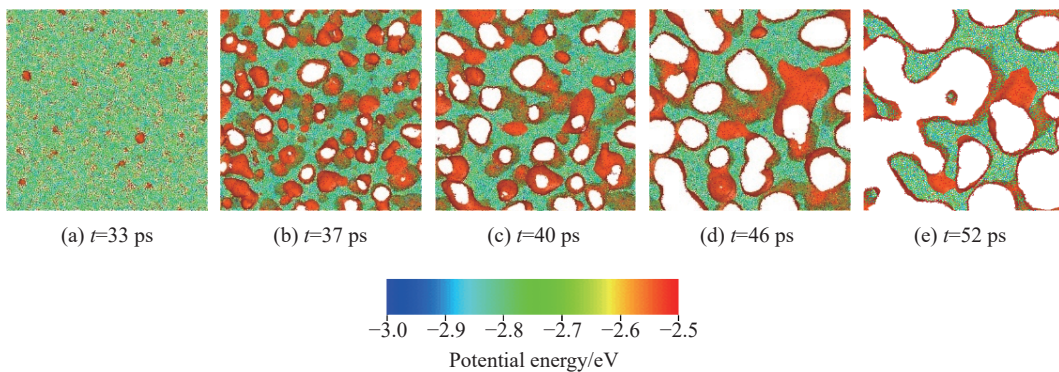


图 11  $u_p = 1.5$  km/s 时单晶 Sn 层裂区域孔洞演化过程的截面

Fig. 11 Section of spallation zone in SC Sn at  $u_p = 1.5$  km/s

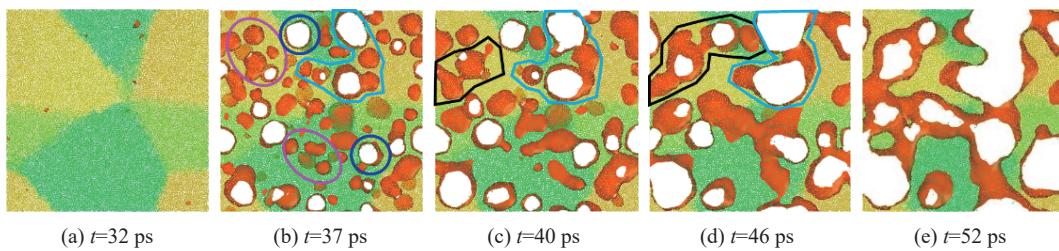


图 12  $u_p = 1.5$  km/s 时纳米多晶 Sn 层裂区域孔洞演化过程的截

Fig. 12 Section of spallation zone in NC Sn at  $u_p = 1.5$  km/s

在图 9 中,  $t = 33$  ps 时孔洞已经开始成核;  $t = 37$  ps 时, 已有孔洞开始长大, 同时新生孔洞沿加载端方向进一步成核并长大;  $t = 40$  ps 时, 靠近自由面侧的孔洞已经开始贯穿, 沿加载端一侧仍有孔洞成核, 孔洞区域不断向加载端一侧发展;  $t = 46$  ps 时, 靠近加载端一侧的孔洞仍有新生孔洞成核, 孔洞中间区域的孔洞开始贯穿;  $t = 52$  ps 时, 孔洞基本上停止成核, 孔洞贯穿现象更加明显。在纳米多晶 Sn 模型中, 孔洞的演化行为基本上与单晶 Sn 一致。

对比图 7 和图 11, 发现不同冲击速度下单晶 Sn 孔洞演化行为基本一致, 即与加载速度无关。但是在图 12 的纳米多晶 Sn 模型中,  $t = 37$  ps 时, 孔洞在晶界上和晶粒内部都存在成核和长大行为, 分别以紫色圈和蓝色圈表示。  $t = 40$  ps 时, 在截面图左上角黄色晶粒内, 两个较大的孔洞已经贯穿, 见黑色多边形包围的区域; 而浅蓝色多边形包围的区域表示晶界上孔洞贯穿瞬间。  $t = 46$  ps 时, 黄色晶粒内由于孔洞贯穿, 贯穿的孔洞延伸至晶界处, 并与晶界处孔洞再次贯穿, 如黑色多边形包围的区域所示, 这一过程展示了晶内断裂和穿晶断裂行为; 浅蓝色多边形包围的区域内孔洞沿着晶界贯穿, 实现了沿晶断裂。此外,  $t = 52$  ps 时的截面图进一步展示了孔洞贯穿的情况。

通过单晶和纳米多晶 Sn 在不同冲击速度下孔洞演化行为的分析, 发现: 第一, 随着冲击速度增加, 单晶和纳米多晶 Sn 模型中孔洞的发展不止局限于层裂附近, 其发展方向是从层裂面逐渐向加载端, 即损伤区域朝加载端增加; 第二, 加载速度影响微层裂的断裂方式。经典层裂中纳米多晶 Sn 以沿晶断裂为主, 微层裂中纳米多晶 Sn 存在沿晶断裂、晶内断裂和穿晶断裂方式。

#### 2.4.2 层裂后期过程

图 13、图 14 和图 15 给出了冲击速度在  $u_p = 0.5, 1.0$  和  $1.5$  km/s 下的单晶和纳米多晶 Sn 的经典层裂与微层裂过程, 其中左列为单晶 Sn 模型, 右列为纳米多晶 Sn 模型。如图 13 所示, 在单晶 Sn 模型中, 发现  $t = 100$  ps 时层裂片基本上与靶材母体分离, 断裂面比较平整; 而同样在  $t = 100$  ps 时, 纳米多晶 Sn 模型层裂片却与母材直接相连, 未完全断裂, 这与材料断裂方式有重要关系。在  $u_p = 0.5$  km/s 时, 单晶 Sn 模型的孔洞在层裂面附近贯穿, 最终沿层裂面拉伸断裂, 因此层裂片与母材基本上完全分开。然而, 从图 8 中纳米多晶 Sn 层裂面截面图可以发现孔洞沿晶界长大和贯穿, 形成沿晶断裂; 在图 13 的纳米多

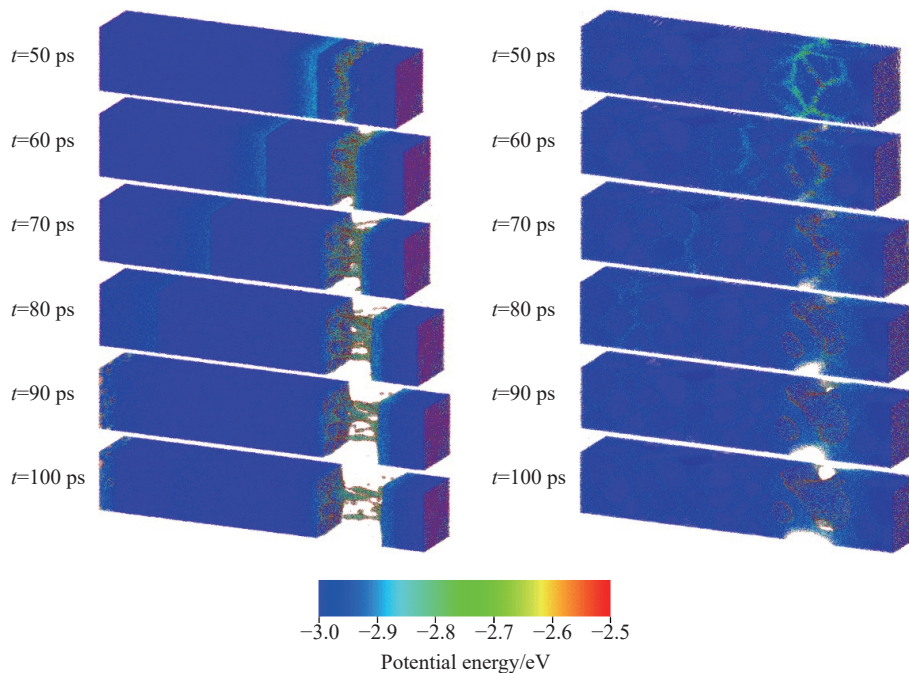


图 13 微层裂后期过程( $u_p = 0.5$  km/s)

Fig. 13 Later process of micro-spallation for  $u_p = 0.5$  km/s



晶 Sn 模型中, 发现在层裂区域内同一晶粒被拉长且未断裂, 一些不同晶粒之间也未产生沿晶断裂, 因此母材与层裂片保持相连。另外, 需要说明的是, 当模拟时间足够长, 纳米多晶 Sn 模型也会完全断裂。在图 14 和图 15 中, 相同加载速度下单晶和纳米多晶 Sn 模型具有大致相同的微层裂演化行为, 具体表现在层裂片与母材相连, 损伤区域朝加载端发展等。相比  $u_p = 1.0 \text{ km/s}$  的情况, 由于完全熔化的模型更容易破坏, 因此  $u_p = 1.5 \text{ km/s}$  的单晶和纳米多晶 Sn 模型的损伤区更大。

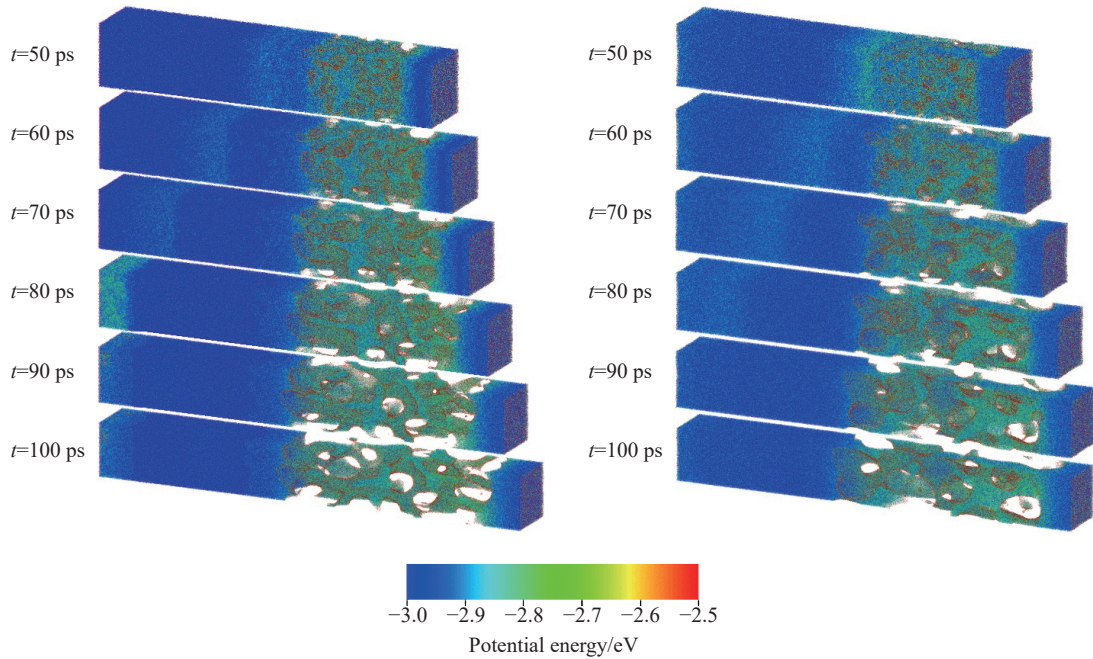


图 14 微层裂后期过程( $u_p = 1.0 \text{ km/s}$ )

Fig. 14 Later process of micro-spallation for  $u_p = 1.0 \text{ km/s}$

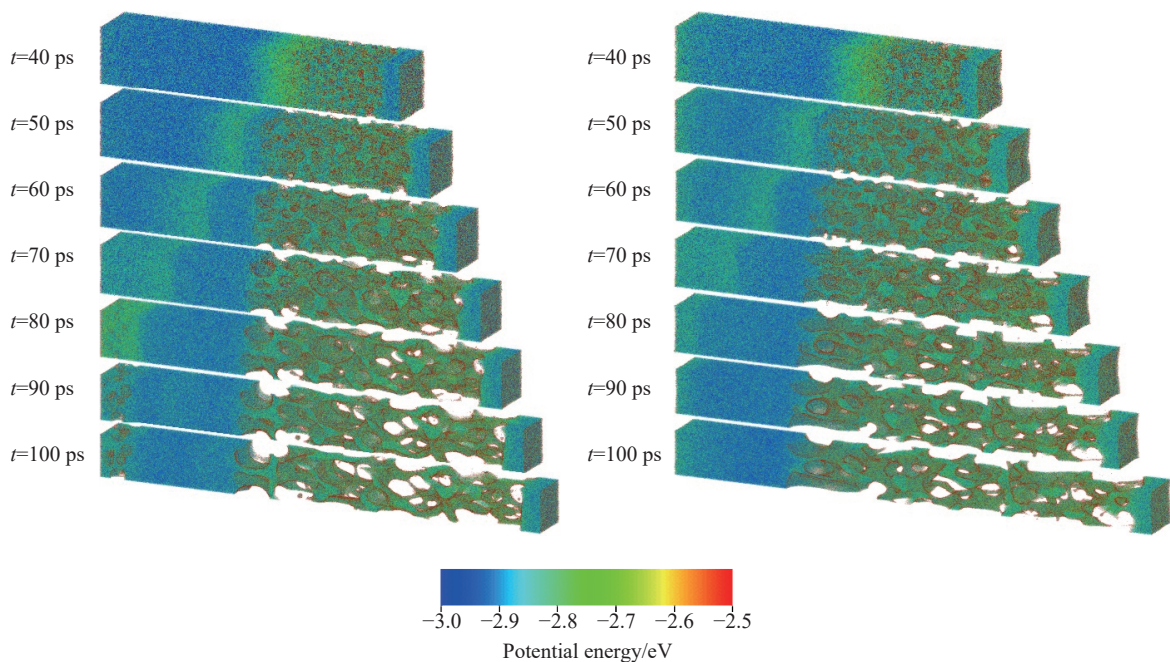


图 15 微层裂后期过程( $u_p = 1.5 \text{ km/s}$ )

Fig. 15 Later process of micro-spallation for  $u_p = 1.5 \text{ km/s}$

为更好地反映整个微层裂演化行为, 本文以  $u_p = 0.5 \sim 1.5$  km/s 时纳米多晶 Sn 模型为例, 采用温度和压力表征了微层裂过程, 分别如图 16 和图 17 所示。

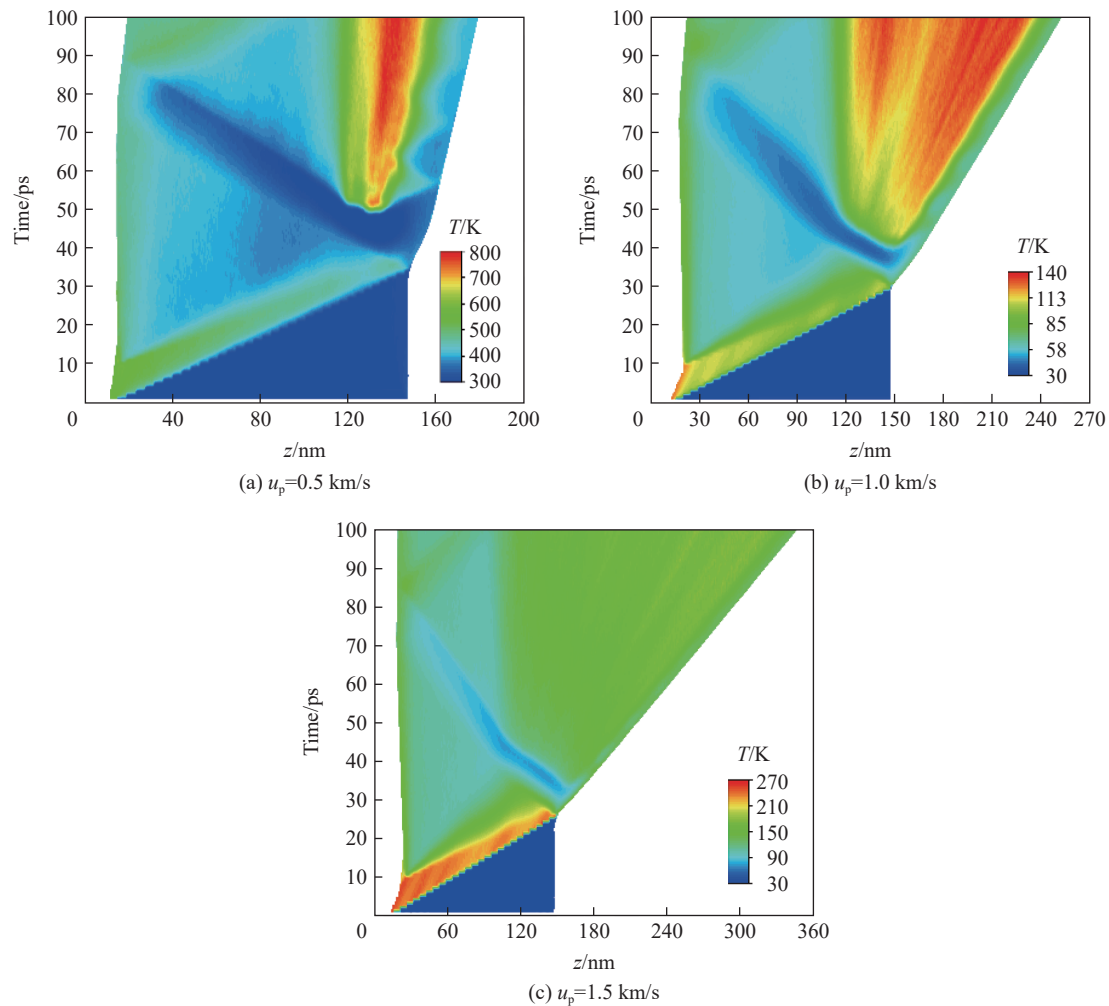


图 16 温度表征的纳米多晶 Sn 微层裂演化

Fig. 16 Micro-spallation evolution characterized by temperature in the NC Sn

在图 16(a) 和 17(a) 中, 当活塞与靶材撞击时, 压缩应力波进入靶材, 并朝着自由面传播; 冲击后的材料内部温度和压力急剧上升, 而未冲击的材料内部物理量则保持波前状态, 冲击与未冲击区域的分界线可由波阵面表示。图 16(a) 和 17(a) 的底部深蓝色和浅蓝色三角形的斜边表示波阵面, 其斜边下方深蓝色或浅蓝色区域表示未冲击区域, 而其上方绿色或红色区域表示冲击区域。当加载结束 ( $t = 10$  ps 时), 移去活塞, 加载面形成稀疏波, 开始追赶压缩应力波; 在波形上, 波前沿基本上不受稀疏波影响, 而波尾巴因被稀疏波追上而变得拖长, Hugoniot 平台宽度也逐渐变小, 见图 3(d)。在图 16(a) 中, 随着波阵面快速靠近自由面, 红色区域逐渐变窄, 对应着 Hugoniot 平台变小现象, 紧邻红色区域上方的黄-绿-青区域变大则对应着波尾巴拖长现象。当应力波达到自由面后并发生发射, 反射波又向加载端传播, 模型的应力由压应力变为拉应力, 该过程对应应在图 16(a) 和图 17(a) 的中部蓝色区域。当拉应力达到材料动态层裂强度, 孔洞开始成核、长大和贯穿, 在拉应力作用下形成断裂区域。图 16 中红黄色部分的云图表示层断裂区域, 该区域温度在整个冲击过程中最高, 这一现象在金属 Ta<sup>[32]</sup> 和 Cu<sup>[55]</sup> 的微层裂过程中也被发现。

$u_p = 1.0$  和  $1.5$  km/s 时的温度与压力云图所展示的层裂过程基本上与  $u_p = 0.5$  km/s 的情况一致。不同之处在于,  $u_p = 0.5$  和  $1.0$  km/s 时最高温度存在于拉伸阶段的层断裂区域, 而  $u_p = 1.5$  km/s 的最高温度发生在压缩阶段的应力波波阵面后方。



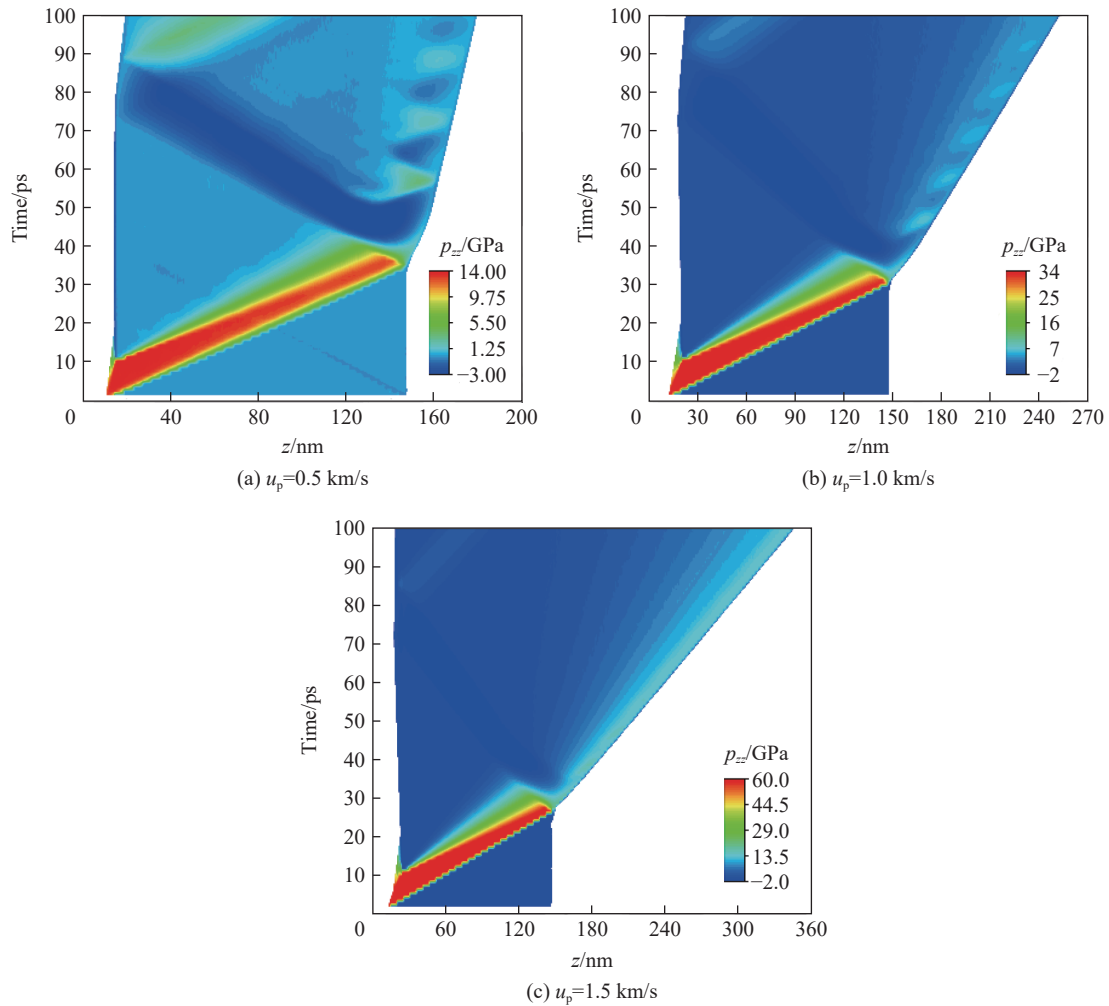


图 17 压力表征的纳米多晶 Sn 微层裂演化

Fig. 17 Micro-spallation evolution characterized by pressure in the NC Sn

### 2.4.3 孔洞体积分数

图 18 表示在孔洞成核至贯穿过程中 ( $t \leq 70$  ps) 孔洞体积分数  $V_f$  和体积分数差值  $\Delta V_f$  的历史曲线。孔洞体积分数根据计算式  $V_f = V_v / (V_s + V_v)$  得到, 其中  $V_v$  和  $V_s$  分别表示孔洞体积和模型初始体积; 相同冲击速度和相同时间下单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞体积分数差值  $\Delta V_f = V_{f-SC} - V_{f-NC}$ ,  $V_{f-SC}$  和  $V_{f-NC}$  分别表示单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞体积分数。

如图 18(a) 所示, 当  $u_p = 0.5$  km/s 时, 单晶 Sn 模型中孔洞率先成核; 当  $t = 47$  ps 时,  $V_f$  约为 0.013, 孔洞体积分数第一次开始指数增长, 该转折点表示孔洞成核与长大阶段的分界点<sup>[56]</sup>; 当  $t = 56$  ps 时,  $V_f$  约为 0.05, 孔洞体积分数增长速度下降; 而当  $t = 62$  ps 时,  $V_f$  约为 0.06, 孔洞体积分数第二次指数增长。第二个转折点可理解为材料发生灾难性失效, 即材料从微损伤到失效的临界点。在图 13 中, 当  $t = 60$  ps 时, 发现层裂片只有部分与母体相连接, 这表明层裂开始形成; 当  $t = 70$  ps 时, 模型其他部位未产生孔洞, 只是在拉应力作用下层裂片与母体进一步分离, 两者之间以更少原子相连, 这进一步说明孔洞体积分数增大的原因是层裂片与母体之间距离增大。另外, Qi 等<sup>[57]</sup> 和 Wang 等<sup>[58]</sup> 分别在金属 Al 和 Fe 的层裂试验中发现了损伤与断裂的临界行为。Strachan 等<sup>[59]</sup> 通过分子动力学模拟发现金属 Ta 和 Ni 的层裂行为中也存在导致材料灾难性失效的临界行为。对于纳米多晶 Sn 模型而言, 其孔洞体积分数小于单晶 Sn 的孔洞体积分数, 且两者变化趋势一致。在图 18(d) 中, 可以发现  $u_p = 0.5$  km/s 时,  $\Delta V_f$  随时间先增大, 后减少, 再增大的趋势, 两个临界点对应的  $\Delta V_f$  值分别为 0.012 和 0.022。

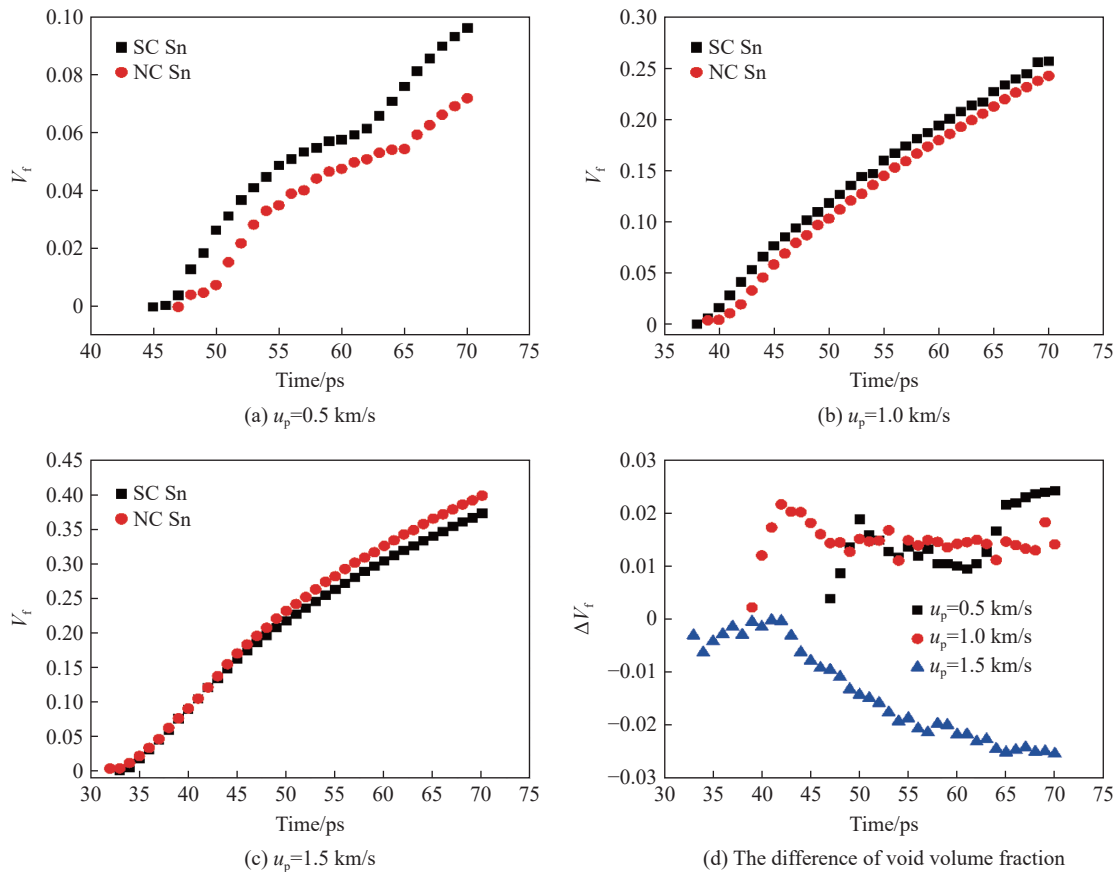


图 18 孔洞体积分数  $V_f$  与体积分数差值  $\Delta V_f$  演化过程

Fig. 18 Evolutionary processes of void volume fraction  $V_f$  and its difference  $\Delta V_f$

在图 18(b) 中, 当  $u_p = 1.0$  km/s 时, 单晶 Sn 模型中孔洞仍然首先成核, 单晶和纳米多晶 Sn 模型的孔洞体积分数变化趋势一致, 皆为指数增长。相比  $u_p = 0.5$  km/s 的孔洞体积分数变化趋势,  $u_p = 1.0$  km/s 的  $V_f$  曲线没有出现第二转折点。在图 18(b) 中, 可以发现  $t = 50 \sim 70$  ps 时, 单晶和纳米多晶 Sn 模型中孔洞主要处于长大与贯穿阶段, 内部层裂区域材料紧密地连接层裂片与母体, 导致层裂片不能快速地分离或脱离母体, 这或许是不产生明显灾变转折点的原因。在图 18(d) 中,  $u_p = 1.0$  km/s 的  $\Delta V_f$  呈现出先增加, 后缓降, 最后基本上保持不变的趋势, 表明单晶和纳米多晶 Sn 孔洞体积分数差值主要体现在成核和初期长大阶段, 本质上反映了孔洞成核与长大方式的区别。

在图 18(c) 中, 当  $u_p = 1.5$  km/s 时, 纳米多晶 Sn 模型中孔洞首先成核, 单晶和纳米多晶 Sn 模型的  $V_f$  曲线变化趋势一致, 同样皆为指数增长。在图 18(c) 中, 可以发现  $t = 40 \sim 70$  ps 时, 单晶和纳米多晶 Sn 模型中孔洞主要处于成核、长大与贯穿阶段, 且在贯穿阶段内部层裂区域材料紧密地连接层裂片与母体, 难以导致层裂片快速地分离或脱离母体。在图 18(d) 中, 可以明确发现,  $\Delta V_f$  为负数, 即说明纳米多晶 Sn 的孔洞体积分数一直大于单晶 Sn;  $\Delta V_f$  表现出先增后降趋势, 表明单晶和纳米多晶 Sn 孔洞体积分数的差值主要体现在长大和贯穿阶段。

当  $u_p = 0.5$  km/s 时, 单晶和纳米多晶 Sn 的  $V_f$  变化趋势一致, 呈现双指数增长; 当  $u_p = 1.0$  和 1.5 km/s 时, 单晶和纳米多晶 Sn 的  $V_f$  变化趋势一致, 表现为指数增长, 这与不同冲击速度下单晶 Al 的  $V_f$  变化趋势一致<sup>[60]</sup>。上述分析认为, 在经典层裂中,  $V_f$  的第二次指数增长转折点是材料发生灾变性断裂的临界点, 表面上预示着层裂片与母体分离, 实质上却反映了材料从损伤到断裂的过渡。贺红亮<sup>[61]</sup> 深入分析了材料损伤到断裂过程的物理机制, 提出聚集临界损伤度和断裂临界损伤度, 用以描述延性断裂过程由缓慢演化过渡到特征临界状态、再到灾变断裂的演化规律。可以看出, 经典层裂中第一个转折点为孔洞成

核与长大阶段的临界点,定性上对应着聚集临界损伤度,第二个转折点为材料从损伤到断裂的过渡,对应着断裂临界损伤度。损伤到断裂的过渡物理图像可以参见图 13 中单晶 Sn 的微层裂  $t = 60 \sim 70$  ps 时演化过程。这进一步说明经典层裂中确实存在两个损伤临界点,在孔洞体积分数历史中表现为两个指数增长的转折点。在微层裂中,  $V_f$  曲线并没有展现出明显的第二转折点,即没有材料损伤到断裂转折点,原因在于:一方面,从物理图像而言,如图 14 和图 15 所示,  $u_p = 1.0$  和  $1.5$  km/s 时,内部层裂区紧密连接层裂片与母体,未展示出断裂迹象(即层裂片脱离母体);另一方面,  $V_f$  后期的增加主要来自于内部微层裂区的增长,且不属于灾变式的增长方式。

上述分析表明:第一,冲击速度影响孔洞体积分数大小、变化趋势与孔洞体积分数差值;第二,相同冲击速度不影响单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞体积分数变化趋势。

### 3 结 论

基于非平衡态分子动力学方法,采用 LAMMPS 软件模拟了冲击速度为 0.5, 1.0, 1.5 km/s 下单晶和纳米多晶 Sn 的经典层裂与微层裂行为,重点分析了加载过程中应力波传播规律,应力波剖面与原子结构的关系以及微层裂过程。主要结论如下:

(1) 加载速度对单晶 Sn 模型中波形演化没有影响,但对纳米多晶 Sn 模型中的波形演化却有影响;此外,纳米多晶 Sn 的经典层裂中波形前沿宽度主要受晶界滑移影响;

(2) 在经典层裂中,单晶和纳米多晶 Sn 孔洞演化行为的差异主要体现在成核位置、空间分布、长大区域以及层裂片与靶体之间的联系等方面;在微层裂过程中,单晶和纳米多晶 Sn 的孔洞形貌演化基本一致;

(3) 纳米多晶 Sn 模型的经典层裂与微层裂的主要区别之一是断裂方式;经典层裂以沿晶断裂为主,微层裂中则存在沿晶断裂、晶内断裂和穿晶断裂方式;

(4) 孔洞体积分数表现为非线性指数增长,相同冲击速度下单晶和纳米多晶 Sn 孔洞体积分数变化规律一致;经典层裂中孔洞体积分数曲线的两个转折点分别表示孔洞成核与长大的过渡和材料从损伤到断裂的灾变性转变。

### 参考文献:

- [1] ANTOUN T, CURRAN D R, RAZORENOV S V, et al. Spall fracture [M]. New York: Springer, 2003. DOI: 10.1007/b97226.
- [2] HOPKINSON B. X. A method of measuring the pressure produced in the detonation of high explosives or by the impact of bullets [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1914, 213(497): 437–456. DOI: 10.1098/rsta.1914.0010.
- [3] KANEL G I, RAZORENOV S V, BOGATCH A, et al. Spall fracture properties of aluminum and magnesium at high temperatures [J]. *Journal of Applied Physics*, 1996, 79(11): 8310–8317. DOI: 10.1063/1.362542.
- [4] JOHNSON J N, GRAY III G T, BOURNE N K. Effect of pulse duration and strain rate on incipient spall fracture in copper [J]. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(9): 4892–4901. DOI: 10.1063/1.371527.
- [5] DALTON D A, BREWER J L, BERNSTEIN A C, et al. Laser-induced spallation of aluminum and Al alloys at strain rates above  $2 \times 10^6$  s<sup>-1</sup> [J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(1): 013526. DOI: 10.1063/1.2949276.
- [6] SOULARD L, BONTAZ-CARION J, CUQ-LELANDAIS J P. Experimental and numerical study of the tantalum single crystal spallation [J]. *The European Physical Journal B*, 2012, 85(10): 332. DOI: 10.1140/epjb/e2012-30269-9.
- [7] BRAGOV A M, BALANDIN V V, KONSTANTINOV A Y, et al. High-rate deformation and spall fracture of some metals [J]. *Procedia Engineering*, 2017, 197: 260–269. DOI: 10.1016/j.proeng.2017.08.103.
- [8] TURLEY W D, FENSIN S J, HIXSON R S, et al. Spall response of single-crystal copper [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 123(5): 055102. DOI: 10.1063/1.5012267.
- [9] JOHNSON J N. Dynamic fracture and spallation in ductile solids [J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(4): 2812–2825.

- DOI: 10.1063/1.329011.
- [10] TONKS D L, ZUREK A K, THISSELL W R. Void coalescence model for ductile damage [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2002, 620(1): 611–614. DOI: 10.1063/1.1483613.
- [11] CHEN D N, YU Y Y, YIN Z H, et al. On the validity of the traditional measurement of spall strength [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2005, 31(7): 811–824. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2004.04.006.
- [12] KANEL G I. Spall fracture: methodological aspects, mechanisms and governing factors [J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 163(1): 173–191. DOI: 10.1007/s10704-009-9438-0.
- [13] ZHANG H, PENG H, PEI X Y, et al. Critical damage degree model of spall fracture in ductile metals [J]. *Journal of Applied Physics*, 2021, 130(12): 125105. DOI: 10.1063/5.0060603.
- [14] IKKURTHI V R, CHATURVEDI S. Use of different damage models for simulating impact-driven spallation in metal plates [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2004, 30(3): 275–301. DOI: 10.1016/S0734-743X(03)00070-8.
- [15] TANG M X, E J C, WANG L, et al. Loading-path dependent deformation of nanocrystalline Ta under single- and double-shock, and quasi-isentropic compression [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(11): 115901. DOI: 10.1063/1.4978359.
- [16] JIANG Z X, ZHONG Z, XIE P C, et al. Characteristics of the damage evolution and the free surface velocity profile with dynamic tensile spallation [J]. *Journal of Applied Physics*, 2022, 131(12): 125104. DOI: 10.1063/5.0082361.
- [17] DAVISON L, GRAHAM R A. Shock compression of solids [J]. *Physics Reports*, 1979, 55(4): 255–379. DOI: 10.1016/0370-1573(79)90026-7.
- [18] PINEAU A, BENZERGA A A, PARDOEN T. Failure of metals I: brittle and ductile fracture [J]. *Acta Materialia*, 2016, 107: 424–483. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.12.034.
- [19] RINEHART J S. Some quantitative data bearing on the scabbing of metals under explosive attack [J]. *Journal of Applied Physics*, 1951, 22(5): 555–560. DOI: 10.1063/1.1700005.
- [20] TULER F R, BUTCHER B M. A criterion for the time dependence of dynamic fracture [J]. *International Journal of Fracture Mechanics*, 1968, 4(4): 431–437. DOI: 10.1007/BF00186808.
- [21] CURRAN D R, SEAMAN L, SHOCKEY D A. Dynamic failure in solids [J]. *Physics Today*, 1977, 30(1): 46–55. DOI: 10.1063/1.3037367.
- [22] 叶雁, 汪伟, 李作友, 等. 用高速摄影和脉冲同轴全息照相联合诊断微射流 [J]. *高压物理学报*, 2009, 23(6): 471–475. DOI: 10.11858/gywlb.2009.06.012.
- YE Y, WANG W, LI Z Y, et al. High-speed photography and pulsed in-line holography diagnostics of microjet [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2009, 23(6): 471–475. DOI: 10.11858/gywlb.2009.06.012.
- [23] BONTAZ-CARION J, PELLEGRINI Y P. X-ray microtomography analysis of dynamic damage in tantalum [J]. *Advanced Engineering Materials*, 2006, 8(6): 480–486. DOI: 10.1002/adem.200600058.
- [24] CHU G B, XI T, YU M H, et al. High-energy X-ray radiography of laser shock loaded metal dynamic fragmentation using high-intensity short-pulse laser [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2018, 89(11): 115106. DOI: 10.1063/1.5034401.
- [25] JONES D R, FENSIN S J, MORROW B M, et al. Shock recompaction of spall damage [J]. *Journal of Applied Physics*, 2020, 127: 245901. DOI: 10.1063/5.0011337.
- [26] SIGNOR L, DE RESSÉGUIER T, DRAGON A, et al. Investigation of fragments size resulting from dynamic fragmentation in melted state of laser shock-loaded tin [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2010, 37(8): 887–900. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2010.03.001.
- [27] 邵建立, 王裴, 秦承森, 等. 铁冲击相变的分子动力学研究 [J]. *物理学报*, 2007, 56(9): 5389–5393. DOI: 10.7498/aps.56.5389.
- SHAO J L, WANG P, QIN C S, et al. Shock-induced phase transformations of iron studied with molecular dynamics [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(9): 5389–5393. DOI: 10.7498/aps.56.5389.
- [28] 邓小良, 李博, 汤观晴, 等. 分子动力学方法在金属材料动态响应研究中的应用 [J]. *高压物理学报*, 2019, 33(3): 030103. DOI: 10.11858/gywlb.20190750.
- DENG X L, LI B, TANG G Q, et al. Application of molecular dynamics simulation to dynamic response of metals [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2019, 33(3): 030103. DOI: 10.11858/gywlb.20190750.



- [29] 王嘉楠, 伍鲍, 何安民, 等. 强冲击下金属材料动态损伤与破坏的分子动力学模拟研究进展 [J]. *高压物理学报*, 2021, 35(4): 040101. DOI: 10.11858/gywlb.20210747.  
WANG J N, WU B, HE A M, et al. Research progress on dynamic damage and failure of metal materials under shock loading with molecular dynamics simulation [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2021, 35(4): 040101. DOI: 10.11858/gywlb.20210747.
- [30] LUO S N, GERMANN T C, TONKS D L. Spall damage of copper under supported and decaying shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, 106(12): 123518. DOI: 10.1063/1.3271414.
- [31] SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Spall strength of aluminium single crystals under high strain rates: molecular dynamics study [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(17): 173501. DOI: 10.1063/1.4828709.
- [32] HAHN E N, GERMANN T C, RAVELO R, et al. On the ultimate tensile strength of tantalum [J]. *Acta Materialia*, 2017, 126: 313–328. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.12.033.
- [33] HAHN E N, FENSIN S J, GERMANN T C, et al. Orientation dependent spall strength of tantalum single crystals [J]. *Acta Materialia*, 2018, 159: 241–248. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.07.073.
- [34] DE RESSÉGUIER T, SIGNOR L, DRAGON A, et al. Spallation in laser shock-loaded tin below and just above melting on release [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 102(7): 073535. DOI: 10.1063/1.2795436.
- [35] SOULARD L, DURAND O. Observation of phase transitions in shocked tin by molecular dynamics [J]. *Journal of Applied Physics*, 2020, 127(16): 165901. DOI: 10.1063/5.0003089.
- [36] XIANG M Z, HU H B, CHEN J, et al. Molecular dynamics simulations of micro-spallation of single crystal lead [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21(5): 055005. DOI: 10.1088/0965-0393/21/5/055005.
- [37] XIANG M Z, HU H B, CHEN J. Spalling and melting in nanocrystalline Pb under shock loading: molecular dynamics studies [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(14): 144312. DOI: 10.1063/1.4799388.
- [38] XIANG M Z, CHEN J, SU R. Spalling behaviors of Pb induced by ramp-wave-loading: effects of the loading rise time studied by molecular dynamics simulations [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 117: 370–379. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.004.
- [39] LIAO Y, XIANG M Z, ZENG X G, et al. Molecular dynamics study of the micro-spallation of single crystal tin [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 89–98. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.07.014.
- [40] SHAO J L, WANG C, WANG P, et al. Atomistic simulations and modeling analysis on the spall damage in lead induced by decaying shock [J]. *Mechanics of Materials*, 2019, 131: 78–83. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.01.012.
- [41] WANG K, ZHANG F G, HE A M, et al. An atomic view on spall responses of release melted lead induced by decaying shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125(15): 155107. DOI: 10.1063/1.5081920.
- [42] WANG X X, HE A M, ZHOU T T, et al. Spall damage in single crystal tin under shock wave loading: a molecular dynamics simulation [J]. *Mechanics of Materials*, 2021, 160: 103991. DOI: 10.1016/j.mechmat.2021.103991.
- [43] RAVELO R, BASKES M. Equilibrium and thermodynamic properties of grey, white, and liquid tin [J]. *Physical Review Letters*, 1997, 79(13): 2482–2485. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.2482.
- [44] HIREL P. Atomsk: a tool for manipulating and converting atomic data files [J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 197: 212–219. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.07.012.
- [45] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the open visualization tool [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(1): 015012. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
- [46] MAILLET J B, MARESCHAL M, SOULARD L, et al. Uniaxial Hugoniotstat: a method for atomistic simulations of shocked materials [J]. *Physical Review E*, 2000, 63(1): 016121. DOI: 10.1103/PhysRevE.63.016121.
- [47] REED E J, FRIED L E, JOANNOPOULOS J D. A method for tractable dynamical studies of single and double shock compression [J]. *Physical Review Letters*, 2003, 90(23): 235503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.235503.
- [48] SAPOZHNIKOV F A, IONOV G V, DREMOV V V, et al. The embedded atom model and large-scale MD simulation of tin under shock loading [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, 500(3): 032017. DOI: 10.1088/1742-6596/500/3/032017.
- [49] MARSH S P. LASL shock huginiot data [M]. Berkeley: University of California Press, 1980: 141–142.

- [50] MABIRE C, HÉREIL P L. Shock induced polymorphic transition and melting of tin [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2000, 505(1): 93–96. DOI: 10.1063/1.1303429.
- [51] WEIR S T, LIPP M J, FALABELLA S, et al. High pressure melting curve of tin measured using an internal resistive heating technique to 45 GPa [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(12): 123529. DOI: 10.1063/1.4730968.
- [52] LAZICKI A, RYGG J R, COPPARI F, et al. X-Ray diffraction of solid tin to 1.2 TPa [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(7): 075502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.075502.
- [53] BRIGGS R, DAISENBERGER D, LORD O T, et al. High-pressure melting behavior of tin up to 105 GPa [J]. *Physical Review B*, 2017, 95(5): 054102. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.054102.
- [54] MA W, ZHU W J, HOU Y. A comparative study on shock compression of nanocrystalline Al and Cu: shock profiles and microscopic views of plasticity [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(16): 163504. DOI: 10.1063/1.4826624.
- [55] TIAN X, CUI J Z, MA K P, et al. Shock-induced plasticity and damage in single-crystalline Cu at elevated temperatures by molecular dynamics simulations [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 158: 120013. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120013.
- [56] YANG X, ZENG X G, WANG J, et al. Atomic-scale modeling of the void nucleation, growth, and coalescence in Al at high strain rates [J]. *Mechanics of Materials*, 2019, 135: 98–113. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.05.005.
- [57] QI M L, LUO C, HE H L, et al. Damage property of incompletely spalled aluminum under shock wave loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(4): 043506. DOI: 10.1063/1.3681301.
- [58] WANG Y G, HE H L, WANG L L. Critical damage evolution model for spall failure of ductile metals [J]. *Mechanics of Materials*, 2013, 56: 131–141. DOI: 10.1016/j.mechmat.2012.10.004.
- [59] STRACHAN A, ÇAĞIN T, GODDARD III W A. Critical behavior in spallation failure of metals [J]. *Physical Review B*, 2001, 63(6): 060103. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.060103.
- [60] YANG X, ZENG X G, WANG F, et al. Spallation fracture dependence on shock intensity and loading duration in single-crystal aluminum [J]. *Computational Materials Science*, 2022, 210: 111060. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.111060.
- [61] 贺红亮. 动态拉伸断裂的物理判据研究 [J]. *高压物理学报*, 2013, 27(2): 153–161. DOI: 10.11858/gywllxb.2013.02.001.  
HE H L. Physical criterion of dynamic tensile fracture [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2013, 27(2): 153–161. DOI: 10.11858/gywllxb.2013.02.001.

(责任编辑 王小飞)