

文章编号 1004-924X(2016)增-0245-07

液氮温度下激光冲击波对 Al-Cu 合金的强化机理

孟宪凯^{1*}, 周建忠¹, 谭文胜², 苏纯¹, 黄舒¹

(1. 江苏大学机械工程学院, 江苏镇江 212013;

2. 常州信息职业技术学院机电工程学院, 江苏常州 213164)

摘要:采用数值模拟与实验研究相结合的方法探索深冷激光冲击波在 Al-Cu 合金中的传播特性及其诱导的塑性行为。使用分子动力学软件 Lammmps 建立了 Al-Cu 合金的分子动力学模型, 分别在常温(293 K)以及液氮温度(77 K)下获得了激光冲击波速度与冲击波压力随粒子速度的变化规律。然后, 分析了激光冲击波诱导的位错演变过程。最后对模拟结果进行了实验验证。结果表明, 激光冲击波在液氮温度下的冲击波速度高达 7.31 km/s, 冲击波压力高达 25.93 GPa, 略高于常温激光冲击波; 另一方面, 深冷激光冲击波诱导的位错结构更加稳定有序, 最高位错原子数可达 104 381, 比常温激光冲击波增加了近 30.5%。这是因为超低温环境中, Al-Cu 合金具有更加稳定的 FCC 晶格结构, 原子间距较短且原子排列均匀一致, 这不仅有利于冲击波能量在晶格间的传递, 使深冷激光冲击波速度与冲击波压力高于常温激光冲击波, 还有利于位错的形核与扩展, 进而获得较常温激光冲击更优良的表面强化效果。

关键词:深冷激光冲击强化; 液氮温度; 分子动力学; 位错; Al-Cu 合金

中图分类号: TG17 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20162413.0245

Reening mechanism of laser shock wave in Al-Cu alloy at liquid nitrogen temperature

MENG Xian-kai^{1*}, ZHOU Jian-zhong¹, TAN Wen-sheng², SU Chun¹, HUANG Shu¹

(1. School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China;

2. School of Mechanical and Electrical Engineering, Changzhou

College of Information Technology, Changzhou 213164, China)

* Corresponding author, E-mail: mengdetiankong10@162.com

Abstract: The propagation and strengthening mechanism of cryogenic laser shock in Al-Cu alloy were studied through numerical simulations and experiments. Firstly, the molecular dynamic model of Al-Cu alloy was established by Lammmps software. Based on the modal, the variations of shock velocity and shock pressure respectively with particle velocity were obtained at room-temperature (293 K) and Liquid Nitrogen Temperature (LNT) (77 K). Then the evolution of dislocations induced by laser shock wave was analyzed. Finally, the simulation was proved by experiments. The results indicate

收稿日期: 2016-05-31; **修订日期:** 2016-06-12.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 51575247, No. 51405204); 中国博士后科学基金资助项目 (No. 2014T70477, No. 2013M540417); 江苏大学高级人才启动基金资助项目 (No. 13JDG109); 江苏省自然科学基金资助项目 (No. BK20141166); 江苏省研究生创新计划资助项目 (No. KYLX15_1056); 常州市高技术研究重点实验室资助项目 (No. CM20153001)

that the shock velocity and pressure induced by laser shock wave at LNT are 7.31 km/s and 25.93 GPa respectively, which are greater than those at room-temperature. Moreover, the dislocations generated by cryogenic laser peening are more stable and uniform. The maximum atom number of dislocations is 104 381, which is approximately 30.5% more than that at room-temperature. The reason is that at NLT, Al-Cu alloy has better FCC lattices with short atomic spacing and uniform atoms arrangement, which not only accelerates the energy transfer between two adjacent lattices leading to the increases of the shock velocity and pressure induced by cryogenic laser peening, but also promotes the nucleation and growth of dislocations resulting in a better strengthening performance compared with cryogenic laser shock peening at room temperature.

Key words: cryogenic laser peening; liquid nitrogen temperature; molecular dynamics; dislocations; Al-Cu alloy

1 引言

深冷激光冲击强化(Cryogenic Laser Peening, CLP),通过高能激光诱导的超高冲击波压力与超低温的耦合作用改善材料表面的微观组织,形成高密度位错以及孪晶组织,进而大幅提高金属材料的力学性能^[1-2]。Ye等^[3]从深冷激光冲击强化诱导的微观组织角度揭示了CLP的强化机理,结果表明CLP可以有效提高AISI304不锈钢中的马氏体含量,并大幅增加材料表面的堆垛层错以及纳米孪晶数量,进而显著提高材料的强度、硬度以及疲劳寿命。上述结果表明,CLP强化效果与其诱导的微观组织有着极其重要的联系,但深冷激光冲击强化Al-Cu合金中的位错成核与扩展规律尚不清楚。

激光冲击过程历时非常短,一般在纳秒级别,其应变速率高达 $10^5 \sim 10^7 \text{ s}^{-1}$,这使得使用实验手段研究激光冲击波在材料中的传播过程十分困难。随着计算机硬件与软件的快速发展,分子动力学成为探索高速冲击波的一种有效手段^[4-6]。Bringa^[7]等人使用分子动力学方法研究了冲击波过程中的雨贡纽关系,验证了使用分子动力学方法研究冲击波结构以及冲击波传播特性的可行性。同时还对比了EAM(Embedded Atom Potential, EAM)等不同势函数下的冲击波传播过程,结果表明由于考虑了不为零的堆垛层错能, EAM势更加适合研究金属材料的弹塑性过程。Nozaki等^[8]利用EAM势通过分子动力学软件模拟了单晶铜的塑性变形过程,通过对单晶铜在拉

伸、弯曲、压缩下的塑性变形过程进行模拟,研究了不同加载方式对单晶铜位错形态的影响。

本文采用分子动力学方法,以Al-Cu合金为对象,研究了液氮温度下激光冲击波在Al-Cu合金中的传播规律及其诱导的塑性行为。通过与常温激光冲击波进行对比,获得了深冷激光冲击强化的位错演变过程及其强化原理,并通过实验验证了分子动力学模拟的有效性以及正确性。

2 试验方法

2.1 深冷激光冲击强化技术

CLP是一种利用超低温-超高应变率耦合特性诱导材料表面产生强化的新型表面强化技术,可以通过高密度位错以及孪晶组织显著提高材料表面的硬度、强度等力学特性,进而大幅改善材料的抗磨耐蚀性能以及疲劳性能,其技术原理如图1所示。

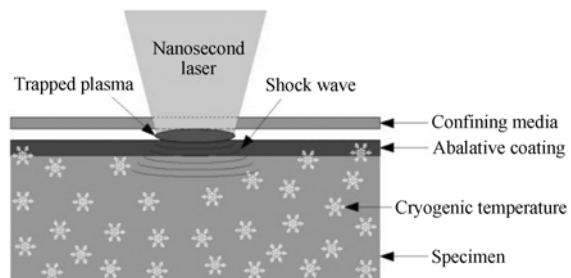


图1 深冷激光冲击强化的技术原理

Fig. 1 Principle schematic of Cryogenic Laser Peening (CLP)

2.2 分子动力学模拟

本文使用分子动力学软件 Lammmps 建立了 Al-Cu 合金的分子动力学模型,如图 2 所示。Al-Cu 的纳米模型尺寸为 16.2 nm×16.2 nm×40.5 nm,总原子数为 640 000,其中 Cu 原子比例为 0.026。原子间的相互作用势采用 Daw^[9] 提出的 EAM 嵌入原子势 EAM 势将原子总势能 E 分为原子核间的对势能 $\Phi_{ij}(\gamma_{ij})$ 以及原子核镶嵌在电子云中的嵌入能 $F_i(\rho_i)$ 两部分,即有:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\gamma_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

其中: ρ_i 为其它原子的核外电子在第 i 个原子处产生的电子云密度之和。

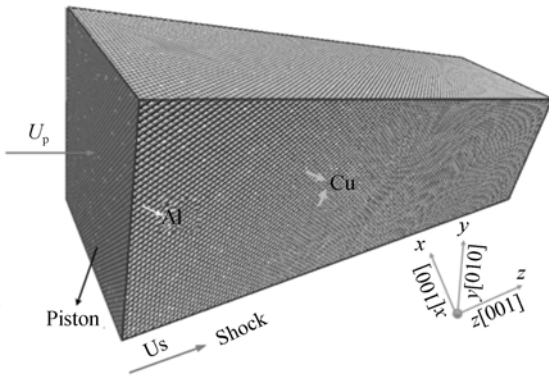


图 2 Al-Cu 合金分子动力学模型

Fig. 2 Molecular dynamic model of Al-Cu alloy

采用活塞法在 Al-Cu 合金内部诱导产生冲击波^[10],根据激光冲击强化的应变速率($10^5 \sim 10^7 \text{ s}^{-1}$),激光冲击波的粒子速度区间为 1~2 km/s。具体模拟过程如下:首先,使用共轭梯度法将系统能量降至最小状态;然后恒温弛豫 10 ps,

使材料的晶格结构更加稳定;最后,在模型一端沿 [001]晶向加载粒子速度 U_p ,进而在材料内部得到相应速度和压力的冲击波,加载时间为 15 ps。

本文使用中心对称系数(Centro-symmetry parameter, C_s)表征 Al-Cu 合金的位错演变。 C_s 是通过近邻原子与中心原子的相对位置判断晶格畸变的参数^[11],即:

$$C_s = \sum_{i=1}^{N/2} |\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_{i+N/2}|^2, \quad (2)$$

其中: N 为最近邻原子数, $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_{i+N/2}$ 为中心原子指向近邻原子的矢量。可以通过 C_s 来识别材料的位错结构与扩展情况。

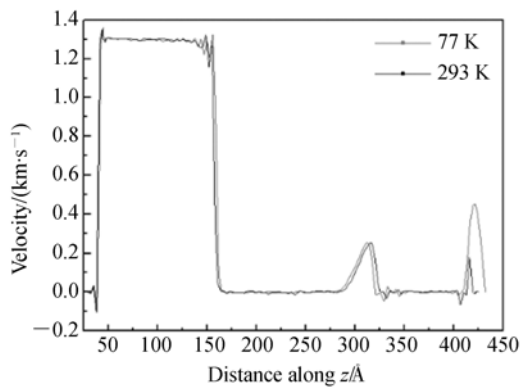
2.3 实验方法

为了验证分子动力学模拟结果,本文采用 XRD 衍射方法测试了常温激光冲击与深冷激光冲击强化后 2024-T351 航空铝合金表面的半高全宽(Full Width Half Maximum, FWHM),以表征材料表面的位错密度大小。激光冲击实验中,激光参数如下:激光能量密度为 5 GW/cm²,光斑直径为 3 mm,激光波长为 1 064 nm,脉宽为 10 ns,光斑搭接率为 50%。

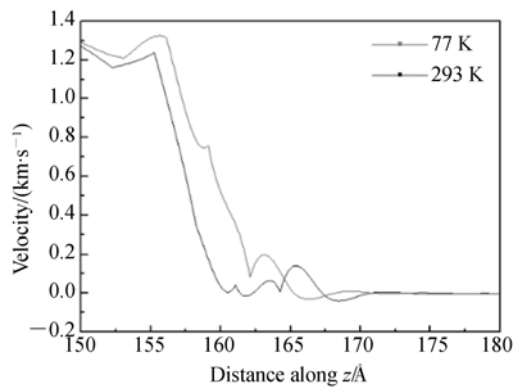
3 结果与讨论

3.1 冲击波结构

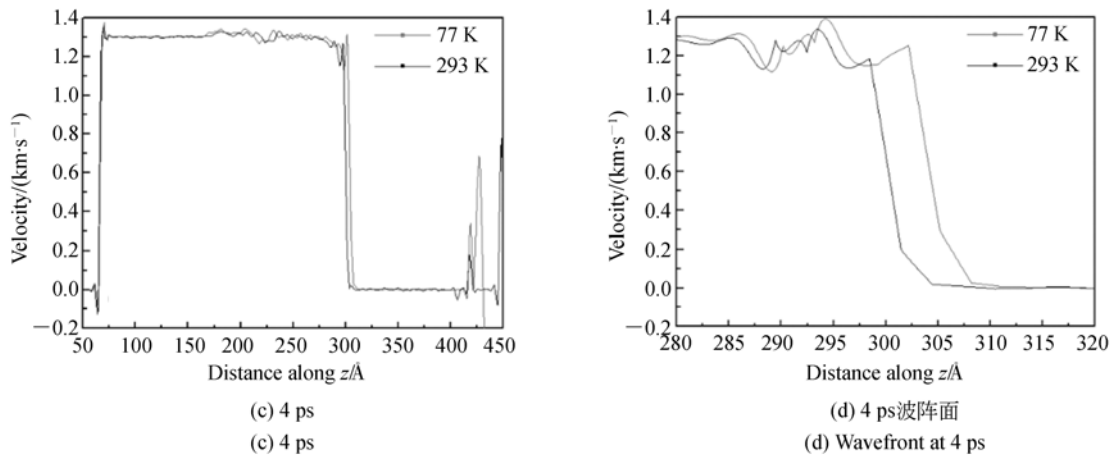
图 3 所示为粒子速度为 1.3 km/s 时不同温度下原子速度沿 z 方向的分布曲线。对比图 3 (c)与图 3(b)可以看出,随着加载时间的增加,激光冲击波的波阵面位置沿 z 方向移动,说明激光冲击波不断沿加载方向传播。同时可以看出激光冲击波未出现明显的弹塑性波分离现象,说明激



(a) 2 ps
(a) 2 ps



(b) 2 ps波阵面
(b) Wavefront at 2 ps

图 3 不同加载时间和温度时 z 方向的原子速度Fig. 3 Atomic velocities along z direction for different loading time and different temperatures

光冲击波沿 $[001]$ 晶向的弹性波速度与塑性波速度基本相同,故弹塑性波在波阵面处重合。另一方面,对比图 3(b)与图 3(d)可以发现,2 ps 与 4 ps 时深冷激光冲击波的波阵面位置明显超过常温激光冲击波,说明深冷激光冲击波的速度显著高于常温激光冲击。

3.2 冲击波速度与冲击波压力

不同温度下激光冲击波速度随粒子速度的变化规律如图 4 所示。可以看出,在常温以及液氮温度下,激光冲击波在 Al-Cu 合金中的传播特性均满足雨贡钮物理关系: $U_s = U_0 + s_1 U_p$, 其中 U_s 为冲击波速度, U_0 为与声波速度有关的材料参数, s_1 为材料参数, U_p 为粒子速度。冲击波速度随粒子速度的增加而增大,说明激光冲击波速度随应变率的增加而增加。

另一方面,常温以及液氮温度下激光冲击波雨贡钮方程分别为 $U_s = 5.44 + 1.31U_p$ 与 $U_s = 5.41 + 1.38U_p$, 说明液氮温度下的激光冲击波速度略高于常温激光冲击波速度。例如当粒子速度为 1.3 km/s 时,常温激光冲击波速度约为 7.17 km/s,而液氮温度下激光冲击波速度高达 7.31 km/s。

图 5 为不同温度下激光冲击波压力随粒子速度的变化曲线。从图 5(a)中可以看出,激光冲击波压力随粒子速度的增加而逐渐增大。由于具有极高的应变率,激光冲击波可以在材料内部产生极高的冲击波压力。另一方面,激光诱导的冲击波压力随着温度的降低而增加,如图 5(b)所示。当粒子速度为 1.3 km/s 时,常温激光冲击波压力

约为 25.45 GPa,而液氮温度下激光冲击波压力高达 25.93 GPa,比常温激光冲击增加了约 2%。

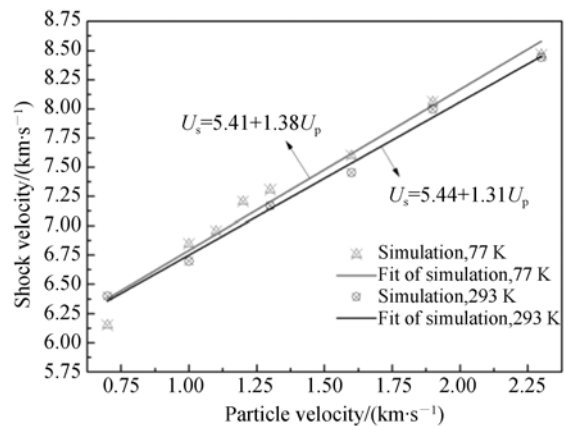


图 4 不同温度下激光冲击波速度随粒子速度的变化规律

Fig. 4 Relationship between laser shock velocity and particle velocity at different temperatures

3.3 位错形态分析

不同加载时间不同温度时激光冲击波诱导的位错形态如图 6 所示。可以看出,常温以及液氮温度下激光冲击波诱导的位错形态均依次按照“不全位错—堆垛层错—层错四面体”顺序逐渐扩展。2 ps 时,激光冲击波在 Al-Cu 合金中诱导的位错形态主要以不全位错以及部分位错环为主,如图 6(a)所示;随着塑性变形的增加,第一阶段产生的不全位错会继续在(111)晶面扩展形成全位错甚至堆垛层错,如图 6(b)所示;随着位错密

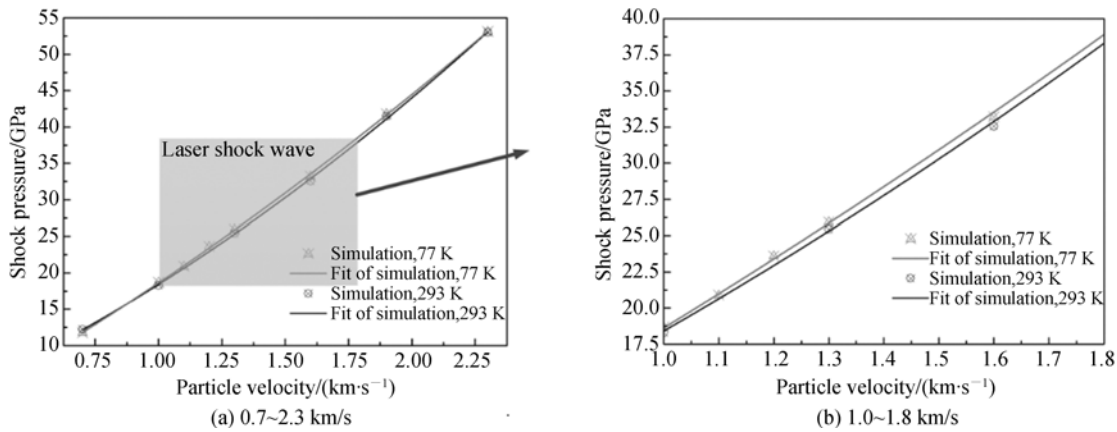


图 5 不同温度下激光冲击波压力随粒子速度的变化规律

Fig. 5 Relationship between laser shock pressure and particle velocity at different temperatures

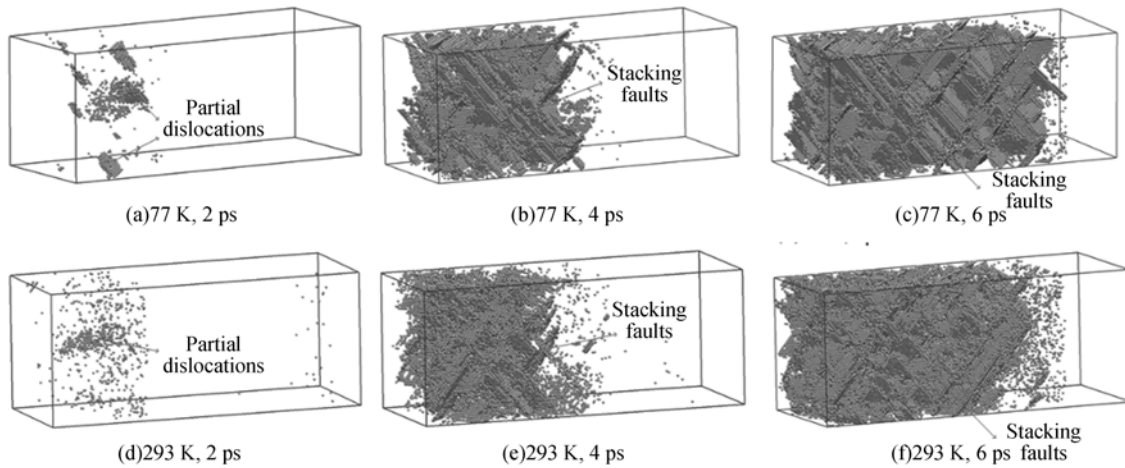


图 6 不同加载时间和温度时激光冲击波诱导的位错形态 ($U_p = 1.3 \text{ km/s}$)

Fig. 6 Dislocations induced by laser shock wave under different time and different temperatures ($U_p = 1.3 \text{ km/s}$)

度的增加,各(111)晶面均产生堆垛层错,进而形成层错四面体。层错四面体是面心立方晶格金属中十分稳定的位错结构,可以有效阻碍塑性变形进而产生加工硬化。另一方面,将深冷激光冲击波与常温激光冲击波诱导的位错组织相比,可以看出深冷激光冲击波诱导的堆垛层错程度更高,位错结构更加稳定有序。

如图 7 所示,常温激光冲击波诱导的最高位错原子数目为 79 942,而深冷激光冲击波诱导的最大位错原子数为 104 381,比常温激光冲击提高了近 30.5%,说明深冷激光冲击强化技术可以在材料内部获得更高的位错密度。

综上所述,CLP 比常温激光冲击强化具有更高的冲击波速度以及更高的冲击波压力,深冷冲击波诱导的位错结构更加稳定,位错密度也显著

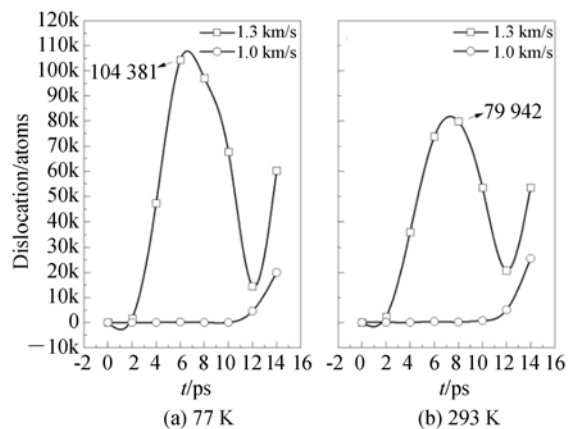


图 7 不同加载时间和温度时激光冲击波诱导的位错原子数目 ($U_p = 1.3 \text{ km/s}$)

Fig. 7 Dislocation atoms induced by laser shock wave under different time and different temperatures ($U_p = 1.3 \text{ km/s}$)

高于常温激光冲击。分析认为,液氮环境下 Al-Cu 合金的原子动能较低,原子间距较短,面心立方晶格也较为稳定,如图 8(a)所示。这有利于激光冲击波能量在晶格之间的传递,因此冲击波阵面周围的冲击波压力及冲击波速度较高,同时这有利于波阵面周围位错的形核与扩展。与深冷激光冲击相比,常温环境下 Al-Cu 合金的原子动能较高,原子易于脱离晶格束缚而破坏正常的晶格结构,如图 8(b)所示。这阻碍了冲击波在晶格之间的能量传递,进而不利于冲击波的传播以及位错的形核与扩展。因此,GLP 诱导的位错密度显著高于常温激光冲击强化技术。

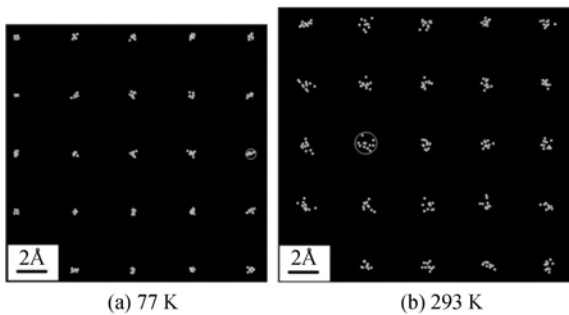


图 8 Al-Cu 合金的晶格结构
Fig. 8 Lattices of Al-Cu alloy

3.4 实验验证

常温(20 °C)以及深冷激光冲击(-196 °C)后,2024-T351 铝合金表面的 FWHM 如图 9 所示。可以看出,常温以及深冷激光冲击后,2024-T351 铝合金表面的 FWHM 分别为 1.87°与 2.24°,说明深冷激光冲击诱导的位错密度显著高于常温激光冲击,这与分子动力学的模拟结果相一致。

参考文献:

- [1] YE C, SUSLOV S, LIN D, *et al.*. Cryogenic ultrahigh strain rate deformation induced hybrid nanotwinned microstructure for high strength and high ductility[J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(21): 213519.
- [2] YE C, SUSLOV S, LIN D, *et al.*. Microstructure and mechanical properties of copper subjected to cryogenic laser shock peening[J]. *Journal of Ap-*

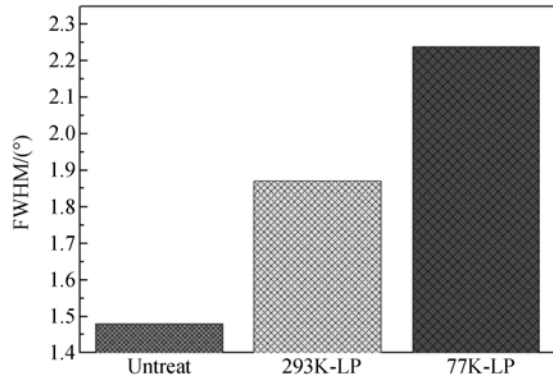


图 9 常温以及深冷激光冲击后 2024-T351 铝合金表面的半高宽值

Fig. 9 FWHM on surface of 2024-T351 alloy treated by laser shock at liquid nitrogen temperature and room-temperature

4 结 论

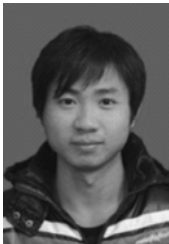
本文使用分子动力学方法获得了液氮温度下深冷激光冲击波在 Al-Cu 合金中的传播规律,并从位错演变角度分析了深冷激光冲击强化的机理。试验结果表明:深冷激光冲击波的速度与压力分别为 7.31 km/s 与 25.93 GPa,略高于常温激光冲击波(7.17 km/s 与 25.45 GPa)。深冷激光冲击波诱导的位错结构更加稳定有序,位错原子数目(104381)比常温激光冲击(79942)增加了约 30.5%。深冷冲击过程中,冲击波速度与冲击波压力的增加以及位错结构的变化,主要因为深冷环境中 Al-Cu 合金的晶格结构更加稳定,原子间距较短,这有利于冲击波能量在晶格间的传递以及位错的形核与扩展。

plied Physics, 2011, 110(8): 083504.

- [3] YE C, SUSLOV S, LIN D, *et al.*. Deformation-induced martensite and nanotwins by cryogenic laser shock peening of AISI 304 stainless steel and the effects on mechanical properties[J]. *Philosophical Magazine*, 2012, 92(11): 1369-1389.
- [4] NEDIALKOV N N, IMAMOVA S E, ATANASOV P A. Mechanism of ultrashort laser ablation of metals: molecular dynamics simulation[J]. *Applied Surface Science*, 2005, 247(1): 243-248.

- [5] LIU X, WANG Y. Femtosecond laser ablation of metals: a molecular dynamics simulation study[J]. *Chinese Optics Letters*, 2005, 3(1): 57-59.
- [6] 何安民, 邵建立, 秦承森, 等. 单晶 Cu 冲击加载及卸载下塑性行为的微观模拟[J]. *物理学报*, 2009, 58(8): 5667-5672.
HE A M, SHAO J L, QIN CH S. Molecular dynamics simulation of the anisotropy of surface melting of metal Al[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(8): 5667-5672. (in Chinese)
- [7] BRINGA E M, CAZAMIAS J U, ERHART P. Atomistic shock Hogoniot simulation of single-crystal copper[J]. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96(7): 3793-3799.
- [8] NOZAKI T, DOYAMA M, KOGURE Y. Simulation of high speed deformation of copper single crystals[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2003, 350: 233-237.
- [9] DAW M S, BASKES M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals [J]. *Physical Review Letters*, 1983, 50(17): 1285-1288.
- [10] 陈开果, 祝文军, 马文. 冲击波在纳米金属铜中传播的分子动力学模拟[J]. *物理学报*, 2010, 59(2): 1225-1231.
CHEN K G, ZHU W J, MA W. Propagation of shockwave in nanocrystalline copper molecular dynamics simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(2): 1225-1231. (in Chinese)
- [11] LAMMPS *Documentation manual* [M/OL]. <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>. 2013.

作者简介:



孟宪凯(1986—),男,山东德州人,博士研究生,2014年于江苏大学获得硕士学位,主要从事激光冲击强化面的研究。E-mail: mengdetiankong10@126.com