

<100> LiF 高速冲击变形过程的 晶体塑性有限元模拟

刘静楠¹, 叶常青¹, 陈开果², 俞宇颖², 沈耀¹

(1. 上海交通大学金属基复合材料国家重点实验室, 材料科学与工程学院, 上海 200240;
2. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆炸物理重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: 结合状态方程建立晶体塑性有限元模型, 模拟高速冲击加载条件下<100> LiF 的动态弹塑性大变形行为, 得到应力波剖面特征、动态力学演化规律及其连续介质力学根源。结果表明: 毫米级样品经约 15 GPa 以内的低压冲击, 波剖面具有弹塑性双波响应、弹性前驱衰减和应力松弛现象, 其决定性因素包括样品厚度、外加压力和材料本构; 从连续介质力学角度分析得到, 应力松弛本质上是由于黏性塑性流动, 导致总应变增速小于塑性应变增速, 从而使弹性应变减小、压力降低; 提出用压力关于时间的三阶导数大于零作为判断条件, 对应力波剖面上双波和单波响应的临界压力进行估测, 发现随着样品掺杂浓度的增加, 临界压力增大; 高速冲击变形的温升效应不可忽略, 且温升绝大部分来自弹性体积变形的贡献。

关键词: LiF; 晶体塑性; 状态方程; 应力松弛; 双波响应

中图分类号: O521.2; O347.3

文献标识码: A

晶体塑性有限元方法 (Crystal Plasticity Finite Element Method, CPFEM) 被广泛应用于准静态和动态加载条件下基于晶体微观结构的材料弹塑性变形行为研究。在高压、高应变率极端条件下, 固体材料不再保持线弹性容变关系^[1], 基于晶体塑性理论对弹性变形和塑性变形解耦, 结合状态方程 (Equation of State, EOS), 可以对材料的非线性弹性响应进行修正^[2]。Becker^[3]最早将 Murnaghan 状态方程引入唯象 CPFEM 模型, 定性分析了多晶钽在高压、高应变率下的变形规律。在此基础上, De 等^[4]在唯象 CPFEM 模型中增加了热中间构型描述材料的热膨胀, 并考虑高应力条件下的声子拖曳与受热控制的热激活两者之间的竞争协调关系, 较准确地模拟了含能材料 α -RDX 高速变形的物质速度波剖面。本研究建模的主要思路是: 采用 Becker 对构型和状态量的简约表达, 融合 De 模型对声子拖曳的考虑, 结合 Murnaghan 状态方程对非线性容变关系的描述以及 Grüneisen 状态方程对热应力的描述, 采用唯象的黏塑性流动方程, 建立 CPFEM 模型, 对 LiF 单晶的冲击力学响应进行模拟研究。

<100> LiF 单晶是目前广泛使用的一种冲击实验窗口材料, 其动态响应特性对待测样品的冲击力学测量结果的影响不可忽略, 因而有必要对它的冲击动态响应进行全面认识。LiF 在常温下具有 NaCl 型晶体结构, 在变形过程中发生屈服后有 6 个 {110}<110> 主滑移系开动, 高温变形时 (高于 700 K), 除主滑移系以外另有 9 个 {001}<110> 次滑移系开动^[5], 本工作的研究范围达不到次滑移系启动温度。Asay 等^[6]、Rosenberg 和 Duvall^[7]早在 LiF 单晶的冲击加载过程中就观察到应力松弛和弹性前驱衰减现象, 他们基于位错行为展开讨论, 认为这些现象是由位错形核/增殖机制引起, 材料在双波/单波响应下

* 收稿日期: 2018-05-03; 修回日期: 2018-05-28

基金项目: 科学挑战专题 (TZ2018001)

作者简介: 刘静楠 (1993—), 女, 硕士研究生, 主要从事动态晶体塑性有限元研究。

E-mail: jingnanliu@sjtu.edu.cn

通信作者: 沈耀 (1972—), 男, 博士, 教授, 主要从事晶体缺陷行为、力学性能及塑性变形的微观机制研究。

E-mail: yaoshen@sjtu.edu.cn

的屈服分别与位错的异质/均匀形核相关。现有的对 LiF 冲击变形过程的动态晶体塑性模拟以及对波剖面特征的解释均是基于位错模型展开讨论的,如 Winey 和 Gupta^[8]。本研究模拟的主要目标是:采用动态 CPFEM 模拟冲击实验得到的波剖面上的应力松弛和弹性前驱衰减特征,从连续介质力学角度进行分析,为进一步探究位错行为奠定基础。

为此,本研究的主要内容包括:(1)结合状态方程建立动态晶体塑性有限元模型,对3种掺杂浓度的<100> LiF 高速冲击动态变形过程进行模拟;(2)分析低压冲击(15 GPa 以内)波剖面上的弹塑性双波响应、弹性前驱幅值衰减和应力松弛现象的连续介质力学根源;(3)根据波剖面的低压双波响应和高压单波响应,估测二者之间的临界压力;(4)考察 0~40 GPa 压力范围内的温升效应。

1 理论和模型

1.1 固体状态方程

根据三项式状态方程的一般形式,固体材料中的压力 p 可分解为“冷”贡献压力、晶格热贡献压力以及自由电子热贡献压力,即

$$p = p_c + p_T = p_c + p_{TN} + p_{TE} \quad (1)$$

式中: p_c 、 p_T 分别为冷压和热压, p_{TN} 为晶格热贡献压力, p_{TE} 为电子热贡献压力。一般情况下,自由电子热贡献压力项可忽略,仅在极高压(100 TPa 以上)阶段才需考虑^[2],因此在本研究范围内忽略该部分热压。采用 Murnaghan 状态方程和 Grüneisen 状态方程分别对冷贡献体积应力和晶格热振动引起的热应力进行描述,其标量形式分别表示为

$$p_{Mur} = \frac{K_0}{K'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{K'} - 1 \right] = \frac{K_0}{K'} [\exp(-K' \epsilon_v^e) - 1] \quad (2)$$

$$p_{Gru} = \frac{\Gamma}{V} E_T = \rho_0 \Gamma E_T \quad (3)$$

式中: p_{Mur} 、 p_{Gru} 分别为 Murnaghan 冷压和 Grüneisen 热压, K_0 、 K' 分别为零压体积模量和体积模量关于压力的一阶导数, V_0 、 V 分别为零压比容和瞬态比容, ϵ_v^e 为弹性体积应变, Γ 为标量形式的 Grüneisen 系数, E_T 为晶格热贡献能量, ρ_0 为零压材料密度。

将状态方程与晶体塑性理论结合的思路是:对于应力中的体积贡献部分,采用 Murnaghan 状态方程进行替换;对于热应力部分,引入 Grüneisen 系数推导变形温度与应力之间的耦合关系。具体的建模过程如下。

1.2 变形运动学

在连续介质力学理论中,物质占据空间几何区域所构成的图形称为物质构型。在变形或刚体运动过程中,物质构型将发生改变。为了对晶体材料的变形过程进行描述,首先建立晶体运动学构型,如图1所示。

初始时刻未经变形的晶体材料占据的空间几何图形称为初始构型。对于初始构型中任意物质点,采用 Lagrange 坐标(\mathbf{X})描述其物质点位置。晶体材料在变形过程中的瞬时空间几何图形称为现时构型。对于初始构型中位于坐标 \mathbf{X} 的物质点,在现时构型中采用 Euler 坐标(\mathbf{x})描述其瞬时空间位置。显然,物质点在初始和现时构型之间具有 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ 的位置关系。描述材料变形程度的物理量称为变形梯度 $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$,其物理含义是基于初始构型求取现时构型的梯度张量。

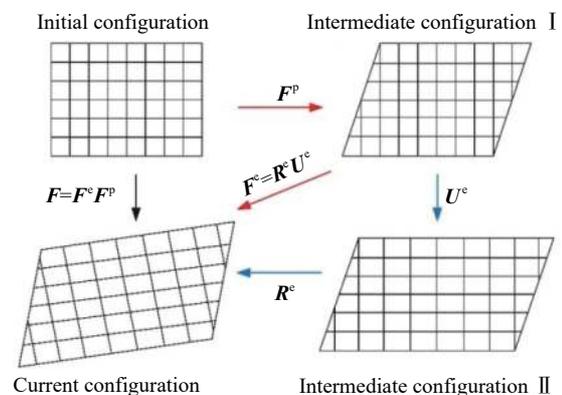


图1 晶体运动学构型

Fig. 1 Configurations of crystal kinematics

对于现时构型中的物质点运动速度 $\mathbf{v} = \partial \mathbf{x} / \partial t$, 通常定义速度梯度 $\mathbf{L} = \partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{x}$ 进行描述。晶体材料由初始构型经变形梯度 (\mathbf{F}) 变换至现时构型, 如图 1 中的黑色箭头所示。基于晶体材料的弹塑性变形行为, 建立中间构型 I 对弹性和塑性变形进行分解。采用 Asaro^[9] 对晶体运动学的研究方法, 将变形梯度解耦为

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (4)$$

式中: \mathbf{F}^e 、 \mathbf{F}^p 分别为弹性和塑性变形梯度。弹性变形包括刚体旋转和晶格畸变, 塑性变形由晶体学滑移引起。材料由初始构型经塑性变形 (\mathbf{F}^p) 变换至中间构型 I, 再经弹性变形 (\mathbf{F}^e) 变换至现时构型, 如图 1 中的红色箭头所示。类似地, 将现时构型中速度梯度张量进行弹、塑性分解

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e-1} + \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{L}_0^p \mathbf{F}^{e-1}, \quad \mathbf{L}_0^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \quad (5)$$

式中: $\dot{\mathbf{F}}^e$ 、 $\dot{\mathbf{F}}^p$ 分别为弹性和塑性变形梯度的变化率, \mathbf{L}^e 、 \mathbf{L}^p 分别为现时构型中的弹性和塑性速度梯度, \mathbf{L}_0^p 为中间构型 I 中由晶体学滑移引起的速度梯度, 上标“-1”表示矩阵的逆。对于弹性变形部分, 建立中间构型 II 进一步将其分解为旋转和拉伸变形, 采用线性代数中的极分解

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e \quad (6)$$

式中: \mathbf{R}^e 为旋转张量, \mathbf{U}^e 为右拉伸张量。材料由中间构型 I, 经晶格旋转 (\mathbf{R}^e) 变换至中间构型 II, 再经弹性拉伸 (\mathbf{U}^e) 变换至现时构型, 如图 1 中蓝色箭头所示。

1.3 超弹性本构

采用弹性对数应变作为超弹性本构方程中的应变度量

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \ln \mathbf{U}^e = \frac{1}{2} \ln (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e) \quad (7)$$

式中: 上标“T”表示矩阵的转置。

通常认为塑性不引起体积改变, 在动态冲击一维应变条件下, 体积应变等于一维弹性应变。因此本研究在弹性变形等价于体积变形的假设条件下, 采用 Hoger^[10] 针对各向同性材料提出的对数应变的功共轭应力, 即中间构型 II 中共旋应力与弹性变形梯度第三不变量的乘积 $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{II} \cdot \det(\mathbf{F}^e)$ 。

基于微分形式的热力学第一定律和 Clausius-Duhem 不等式对不可逆过程内禀耗散的要求^[11], 可以得到共轭的应力-应变之间满足关系

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \rho_0 \cdot (\partial U / \partial \boldsymbol{\varepsilon}^e) \quad (8)$$

式中: U 为比内能。采用 Lemaitre 等^[12] 对弹性的表达形式, 并且考虑到高压冲击过程中材料弹性模量不再保持常数, 将比内能表示为

$$U = \frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{1}{2} [\boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{C}(p, T) : \boldsymbol{\varepsilon}^e] \quad (9)$$

式中: p 、 T 分别为动态冲击过程中样品中的压力和变形温度, $\mathbf{C}(p, T)$ 为依赖于瞬态压力和温度的弹性模量四阶张量(以下简记为 \mathbf{C})。弹性模量对瞬态压力和温度的依赖近似取线性关系

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_0 + \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} \cdot (p - p_0) + \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial T} \cdot (T - T_0) \quad (10)$$

式中: \mathbf{C}_0 为材料的初始弹性常数, p_0 、 T_0 分别为冲击过程的初始压力和温度(通常为零压和常温初始条件), $\partial \mathbf{C} / \partial p$ 、 $\partial \mathbf{C} / \partial T$ 分别为弹性模量关于压力和温度的一阶导数张量。采用 (8) 式、(9) 式和 (10) 式, 结合 Becker^[3]、De 等^[4] 发展的超弹性本构, 在晶体运动学中间构型 II 中建立简单的本构方程

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e + \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \right) \frac{\partial p}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_v^e} \mathbf{I} + \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial T} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \right) \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \quad (11)$$

式中: $\boldsymbol{\varepsilon}_v^e = \boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{I}$ 为体积应变, \mathbf{I} 为二阶单位张量。由于压力只改变材料体积而不改变形状, 压力关于应变的一阶导数即为关于弹性体积应变的一阶导数。(11) 式中, 等号右侧的 3 项依次表示满足广义胡克定律的线弹性应力-应变关系、因压力对弹性模量的影响引起的应力修正项, 以及因变形温度对弹性模量的影响引起的应力修正项。

分别对(11)式中压力和温度关于弹性应变的一阶导数以及温度随时间的变化率进行推导。首先根据体积模量的定义,得到压力关于体积应变的导数

$$\frac{\partial p}{\partial \varepsilon_v^e} = -K(p) = K_0 + K'p \quad (12)$$

式中: $K(p)$ 为依赖于瞬态压力的体积模量,近似地与压力线性相关。根据 Maxwell 方程、耗散不等式和 Grüneisen 状态方程,可以分别得到温度分别关于弹性应变和时间的一阶导数,即

$$\frac{\partial T}{\partial \varepsilon^e} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon^e \partial \eta} = T \cdot \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial U} = -T\Gamma \quad (13)$$

$$\dot{T} = -T\Gamma : \dot{\varepsilon}^e + \frac{\dot{W}^p}{\rho c_V} \quad (14)$$

式中: $\Gamma = \Gamma_m \mathbf{I} + \Gamma'$ 为 Grüneisen 张量, $\Gamma_m \mathbf{I}$ 、 Γ' 分别为 Γ 的球量和偏量,根据立方晶体具有晶格振动产生的热量仅引起体积变化而不引起晶格畸变的特点,可知 $\Gamma' = 0$; \dot{W}^p 为单位体积塑性功率,本研究在没有热传导和热源的假设条件下,认为塑性功全部转化为热能; ρ 为材料瞬态密度, c_V 为定容比热容。

在上述超弹性本构方程中引入状态方程,对材料在高压高应变率条件下的非线性弹性容变关系进行描述。首先将应力进行球量和偏量分解,即 $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}_h \mathbf{I} + \tilde{\sigma}'$, 其中 $\tilde{\sigma}_h \mathbf{I}$ 为应力球张量, $\tilde{\sigma}'$ 为应力偏张量。进一步将(11)式中等号右侧进行分解和重组,整合第1项和第2项中的纯体积贡献冷应力部分,并采用 Murnaghan 状态方程进行替换,对于第3项中温度关于压力的导数引入 Grüneisen 系数并用(13)式进行替换。分别得到标量形式的球应力和偏应力张量如下

$$\tilde{\sigma}_h = -p_{Mur} + \frac{1}{3} \varepsilon^{e'} : \mathbf{C} : \mathbf{I} + \left[\frac{1}{2} \left(\varepsilon^{e'} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \varepsilon^{e'} \right) + \frac{1}{3} \left(\varepsilon^{e'} : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \mathbf{I} \right) \varepsilon_v^e \right] \frac{\partial p}{\partial \varepsilon_v^e} - \frac{1}{2} \left(\varepsilon^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial T} : \varepsilon^e \right) T \Gamma_m \quad (15)$$

$$\tilde{\sigma}' = \Phi' : \mathbf{C} : \varepsilon^{e'} + \frac{1}{3} (\Phi' : \mathbf{C} : \mathbf{I}) \varepsilon_v^e - \frac{1}{2} \left(\varepsilon^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial T} : \varepsilon^e \right) T \Gamma' \quad (16)$$

式中: $\Phi' = \Phi - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}$ 为四阶单位偏张量, Φ 为四阶单位张量。(15)式和(16)式能够对动态冲击加载条件下材料的非线性弹性关系,通过状态方程进行较为可靠的描述。下面将对基于晶体微观结构的黏塑性变形建立本构方程。

1.4 晶体塑性本构

根据晶体塑性理论,当外加应力超过弹性极限时,晶体主要以滑移方式进行塑性变形,滑移面和滑移方向合起来称为一个滑移系。(5)式中采用的由塑性滑移引起的速度梯度张量可表示为

$$\mathbf{L}_0^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\mathbf{s}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{m}_0^{\alpha}) \quad (17)$$

式中: $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 为 α 滑移系上的滑移速率, \mathbf{s}_0^{α} 、 \mathbf{m}_0^{α} 分别为初始滑移方向和初始滑移面法线上的单位向量。滑移由晶体中的切应力引起,而特定滑移系上的分切应力达到临界值时该滑移系开动,即滑移系上的临界分切应力。一般地,滑移系上的分切应力与晶体材料在加载方向上的应力具有一定的取向关系,可以简单地表示为 $\tau^{\alpha} = \sigma \cdot Q^{\alpha}$, 其中 Q^{α} 称为取向因子或 Schmid 因子^[13]。在本研究范围内, LiF 晶体材料有6个 {110} <110> 滑移系,晶体学中间构型 II 中滑移系 α 上的分切应力 (τ^{α}) 为

$$\tau^{\alpha} = \tilde{\sigma} : \mathbf{Q}_0^{\alpha} = \tilde{\sigma} : \frac{1}{2} \left(\mathbf{U}^e \cdot \mathbf{s}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{m}_0^{\alpha} \cdot \mathbf{U}^{e-1} + \mathbf{U}^{e-1} \cdot \mathbf{m}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{s}_0^{\alpha} \cdot \mathbf{U}^e \right) \quad (18)$$

式中: \mathbf{Q}_0^{α} 为中间构型 II 中未经旋转的 Schmid 因子。

宏观材料动力学中,考虑应变率和温度效应的一维黏塑性本构方程的一般形式为 $f(\sigma, \varepsilon, \dot{\varepsilon}, T) = 0$ ^[1]。将黏塑性本构方程应用于每个晶体滑移系上的塑性变形中,在滑移系 α 上建立黏塑性流动准则

$$f^{\alpha} [\tau^{\alpha}, \hat{\tau}^{\alpha}(\bar{\gamma}, \dot{\gamma}^{\alpha}, T)] = \begin{cases} \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} = 0 & \dot{\gamma}^{\alpha} \neq 0 \\ \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} < 0 & \dot{\gamma}^{\alpha} = 0 \\ \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} > 0 & \text{不存在} \end{cases} \quad (19)$$

式中: $\bar{\gamma} = \int_0^t \sum_{\alpha} |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt$ 为所有滑移系上的累积滑移量, $\hat{\tau}^{\alpha}$ 为滑移系 α 上的临界分切应力或称为滑移阻力。当滑移系 α 上的分切应力小于临界分切应力时, 该滑移系不发生塑性滑移。随着高压冲击过程样品中切应力的增加, 一旦滑移系上的分切应力达到临界分切应力, 则该滑移系开始发生塑性滑移。

在高压高应变率的冲击变形过程中, 晶体滑移系上的临界分切应力(即滑移阻力)包含晶体内缺陷对位错运动的阻力和声子拖曳造成的黏性阻力两部分^[14]。其中前者又包含位错增殖机制造成的硬化部分以及位错湮灭和热软化作用造成的软化部分。结合硬化项($\hat{\tau}_h^{\alpha}$)、软化项($\hat{\tau}_s^{\alpha}$)和声子拖曳项($\hat{\tau}_d^{\alpha}$), 建立唯象的塑性硬化关系 $\hat{\tau}^{\alpha} = \hat{\tau}_h^{\alpha} \cdot \hat{\tau}_s^{\alpha} + \hat{\tau}_d^{\alpha}$ 。采用高应变速率下的 Steinberg 硬化模型^[15]建立幂形式的硬化项; 基于 Arrhenius 方程建立指数形式的软化项; 采用 Kumar 等^[14]提出的恒温下线性声子拖曳关系 $\tau_d = \theta \dot{\gamma}$, 结合 Nemat-Nasser 等^[16]依据实验结果对线性黏性应力的热激活修正, 建立声子拖曳项。因此, 在滑移系 α 上建立唯象的黏塑性硬化方程

$$\hat{\tau}^{\alpha} = \frac{\mu}{\mu_0} \cdot \tau_0 \left\{ [1 + B(\bar{\gamma} + \gamma_0)^n] \cdot \left(\frac{|\dot{\gamma}^{\alpha}| + \dot{\gamma}_{\text{off}}}{\dot{\gamma}_0} \right)^m \exp(-\lambda \Delta E) + \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta}{\tau_T} \dot{\gamma}^{\alpha}\right) \right] \right\} \quad (20)$$

式中: μ_0 为初始零压条件下的剪切模量; μ 为材料在冲击变形过程中的瞬态剪切模量, 采用它与弹性模量的近似关系 $\mu = [(C_{11} - C_{12})/2 + C_{44}]/2$; B 为线性应变硬化参数; n 为应变硬化幂指数; γ_0 为初始塑性滑移量(通常为零); $\dot{\gamma}_{\text{off}}$ 为滑移系未开动时的率硬化修正参数, $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移速率; m 为率敏感性指数; λ 为热软化修正系数; ΔE 为比热能; τ_0 为常温零压条件下的参考屈服应力, τ_T 为考虑温度效应的材料瞬态参考屈服应力; θ 为线性声子拖曳系数。需要注意的是, 参数 τ_0 、 n 和 m 对于样品纯净度的依赖较强, 这在后面对不同掺杂浓度样品的冲击变形模拟中有所体现。

1.5 数值方案和有限元模型

采用上述结合状态方程的晶体塑性模型, 利用 Abaqus/Explicit 有限元软件对 <100> LiF 样品编写用户自定义材料程序 Vumat 并进行模拟。在有限元数值计算中, 采用的积分方案包括: (1) 在总变形时间范围内, 采用前向梯度 $\Delta \gamma^{\alpha} = \gamma_{t+\Delta t}^{\alpha} - \gamma_t^{\alpha}$ 对塑性变形进行积分计算; (2) 在每个时间增量步内, 采用完全拉格朗日格式即采用全量的形式更新弹性应变; (3) 对 (19) 式采用 Newton-Raphson 迭代计算滑移速率, 每个迭代循环中以滑移增量线性插值 $\Delta \gamma^{\alpha} = \Delta t (\dot{\gamma}_t^{\alpha} + \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{\alpha})/2$ 作为预估, 并以 $\Delta \bar{\gamma} < 10^{-4}$ 作为迭代收敛准则。

飞片-样品-窗口模型如图 2 所示。预先设定飞片以初始速度 v 撞击静止的样品和窗口, 飞片、样品和窗口的厚度相同, 具体的模型信息见表 1。飞片/样品、样品/窗口之间在变形过程中始终无摩擦接触, 为消除边侧稀疏影响, 图 2 所示模型中飞片、样品及窗口的上下表面均施加垂直于飞片撞击方向的约束。时间增量步小于 0.1 ns, 飞片、样品和窗口均采用平面应变减缩积分单元, 单元尺寸小于 15 μm , 经验证明若将单元尺寸缩小一倍, 则 $\bar{\gamma}$ 的最大变化量小于 2×10^{-4} (Newton-Raphson 迭代收敛量级), 因此具有网格收敛性。为节省计算资源, 对飞片和窗口部件没有采用 CPFEM 模型, 而采用 Mises 屈服准则以及各向同性的塑性硬化方程, 并结合 Grüneisen 状态方程对弹性关系的描述, 进行简单的连续介质力学计算。在后续研究中, 对于飞片和窗口部件的冲击变形计算, 将考虑更具有物理意义的方案进行改进。

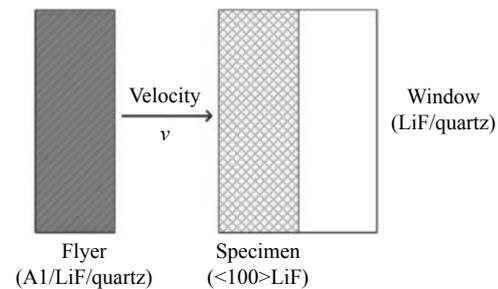


图 2 飞片撞击 LiF 样品模型示意图

Fig. 2 Illustration of the flyer impacting LiF specimen model

2 模拟结果和分析

2.1 材料参数

依据文献中的冲击实验模型^[6,17-18]对 <100> LiF 进行动态 CPFEM 模拟, 所采用的超弹性本构参数^[19-21]如表 2 所示。采用 Nelder 等^[22]对传统优化方法——单纯形法 (Simplex Algorithm, SA) 的改进, 对唯象黏

表1 模拟中采用的模型信息
Table 1 Model information in simulations

Sample No.	Flyer material	Window material	$v/(m \cdot s^{-1})$	Sample's thickness/mm	Ref.
LiF01	Al	Quartz	340.0	1.35	[6]
LiF02	Al	Quartz	340.0	1.98	[6]
LiF03	LiF	LiF	423.8	3.0	[17]
LiF04	LiF	LiF	1 321.6	3.0	[17]
LiF05	LiF	LiF	1 641.5	3.0	[17]
LiF06	Fused silica	Fused silica	340.9	1.143	[18]
LiF11, LiF12, LiF13	LiF	LiF	340.0	3.0	

Note: LiF01–LiF06 models were built based on the parameters of specimens and experiments in references, while LiF11–LiF13 models were designed for comparison of profile characteristic differences with successively increased specimen doping concentration.

表2 <100> LiF 的超弹性本构参数
Table 2 Hyperelastic constitutive parameters of <100> LiF

Subscript	C_{ij}/GPa	$\frac{dC_{ij}}{dp}$	$\frac{dC_{ij}}{dT}/(MPa \cdot K^{-1})$	K_0/GPa	K'_0	$\rho_0/(g \cdot cm^{-3})$	$c_p/(J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1})$	Γ_m
11	113.97	9.97	-75.56					
12	47.67	2.73	-28.39	69.97	4.43	2.64	1 612.02	1.68
44	63.64	1.38	-13.94					

塑性硬化方程进行多元函数非线性最优化计算, 即对(20)式中的材料参数进行计算, 结果如表3所示。由于不同实验者采用的 LiF 单晶的掺杂浓度不同, 因此材料的晶体塑性本构参数略有差异。在飞片和窗口的简单连续介质力学计算中, 涉及包括铝、石英晶体和熔石英等在内的材料参数, 采用文献[23-28]中在准静态变形条件下得到的初始(零压)材料参数, 以及在动态冲击条件下得到的材料常数对压力和温度的依赖关系。

表3 <100> LiF 的晶体塑性本构参数
Table 3 Crystal plasticity constitutive parameters of <100> LiF

Sample No.	τ_0/MPa	B	n	$\dot{\gamma}_{off}/\mu s^{-1}$	$\dot{\gamma}_0/\mu s^{-1}$	m	λ	$\frac{\tau_T}{\theta}/s^{-1}$
LiF01, LiF02, LiF11	121.0		0.08					
LiF03, LiF04, LiF05, LiF12	113.9	4.0	0.30	3.5×10^{-9}	0.12	0.09	4.7×10^{-2}	0.15
LiF06, LiF13	86.4		0.40					

2.2 波剖面特征

将采用 CPFEM 模拟得到的波剖面与文献中通过实验得到的结果进行比对, 包括 LiF01、LiF02 沿加载方向的应力波剖面以及 LiF03~LiF06 沿加载方向的物质速度波剖面, 如图3所示。对比发现, <100> LiF 的低压冲击响应具有如下特征: (1) 弹塑性双波响应, (2) 弹性前驱幅值衰减, (3) 应力松弛现象。从连续介质力学角度进行分析, 可以发现3个波剖面特征均由如下因素共同决定: 样品厚度、加载压力、材料本构。下面将从波剖面3个特征的连续介质力学根源以及3种因素对波剖面特征的影响进行具体分析。

材料在低压冲击加载条件下, 弹性波速大于塑性波速, 波剖面上弹性波和塑性波两者分离, 所以波剖面呈现弹塑性双波结构。由于在高压高应变速率变形过程中, 固体材料的塑性流动具有类似于流体

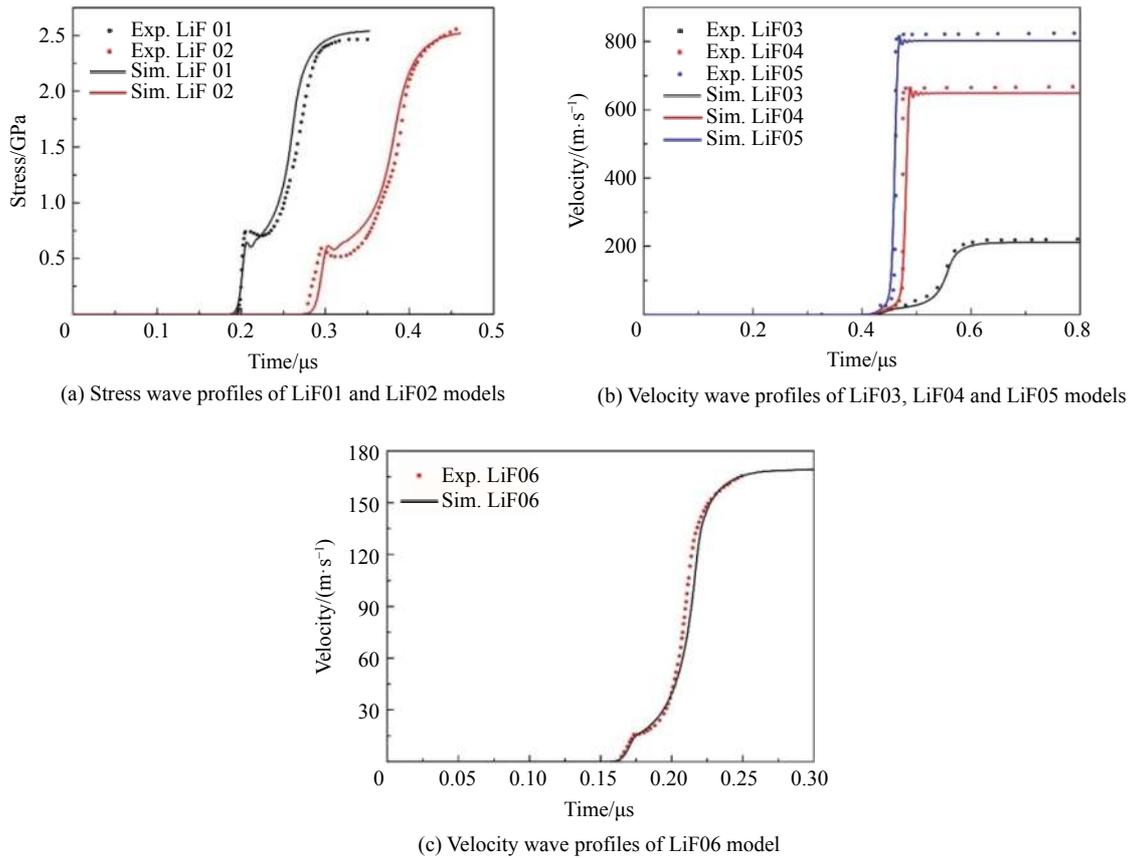


图 3 CPFEM 模拟的<100> LiF 波剖面与实验的比对结果

Fig. 3 Comparison of wave profiles of <100> LiF from CPFEM simulations and experiments

的黏性特征。增加样品厚度(即应力波在样品中的传播距离)时,由于黏性效应的累积,弹性波和塑性波速度的差异增大,使得波剖面上弹、塑性波之间分离距离增大,如图 3(a) 所示。增加冲击压力大小,样品冲击表面处的初始波形斜率增加,则对于具有相同厚度的样品,弹、塑性波之间的分离距离减小,如图 3(b) 所示。增加样品掺杂浓度,由表 3 可知,材料的晶体塑性本构(参数 τ_0 、 n 和 m)略有改变,由于杂质对黏塑性流动具有增强效果,弹、塑性波之间的分离距离亦增加,如图 4 所示。

随着应力波在样品中传播距离的增加,材料的弹性前驱幅值发生衰减,如图 3(a) 所示。根据弹性前驱理论^[29],靠近样品冲击表面处的材料初始响应应当为弹性,因此材料的初始弹性极限等于加载压力。在高压冲击加载条件下,加载压力远高于材料在准静态下的屈服强度,应力波在样品内传播时,由于塑性流动的黏性效应,弹性前驱幅值朝着准静态屈服强度的数值方向发生衰减。其衰减程度一方面受近表面处初始弹性极限(即加载压力)影响,另一方面受应力波传播过程中黏性效应的累积(即样品厚度)影响。在相同冲击压力和样品厚度条件下,增加样品掺杂浓度(LiF11、LiF12 和 LiF13 的掺杂浓度依次减小)进行冲击模拟,所得的弹性前驱幅值衰减程度依

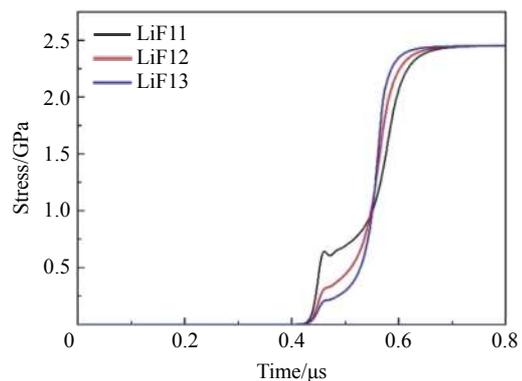


图 4 加载条件和样品厚度相同、样品掺杂浓度不同(LiF11~LiF13, 掺杂浓度依次减小)时模拟的应力波剖面

Fig. 4 Stress wave profiles from models with same loading condition, specimen thickness and different doping concentrations (LiF11~LiF13, with doping concentration decreasing in order)

次减小,如图4所示。在相同冲击加载压力下,材料表面处的初始弹性极限相同,当应力波传播至样品相同厚度处,由于不同的杂质原子浓度对材料强化的程度不同,随着样品掺杂浓度的增加,材料的瞬态弹性极限依次增加。因此,材料的初始弹性极限与瞬态弹性极限之差,即弹性前驱幅值衰减程度依次减小。考虑到杂质原子对材料塑性流动中黏性效应的增强,由波剖面模拟结果可知,杂质对材料强度的增加程度超过对黏塑性效应的增强。

波剖面上的稳态峰值应力主要由外加压力决定。当弹塑性波通过样品中的物质点之后,由外加载荷引起的弹塑性变形基本完成,应力和速度波剖面上相应地出现峰值平台。随着外加压力的增大,特定<100> LiF样品的稳态峰值应力增大,如图3(b)所示。而样品厚度和掺杂浓度(即材料本构)的差异,对于材料在相同外加载荷条件下冲击变形稳态峰值应力的影响可以忽略不计,分别如图3(a)和图4所示。这是因为样品厚度和掺杂浓度对波剖面的影响主要体现为黏塑性流动对波形弥散程度的影响,应力波通过样品之后的最终应力状态由外加载荷确定。

掺杂含量较高的<100> LiF(LiF01、LiF02)经低压冲击后,波剖面上具有明显的应力松弛现象,见图3(a)。下面将对应力松弛现象的连续介质根源及其影响因素进行具体分析。

2.3 应力松弛现象分析

应力松弛现象可表达为应力关于时间的一阶导数小于零 $\left(\frac{\partial\sigma}{\partial t} < 0\right)$,其中 $\frac{\partial\sigma}{\partial t}$ 可以通过1.3节中建立的超弹性本构方程推导其在一维应变过程中的标量形式,即

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} = \left[C + \left(K \frac{\partial C}{\partial p} + T \Gamma \frac{\partial C}{\partial T} \right) \varepsilon^e \right] \cdot \frac{\partial \varepsilon^e}{\partial t} + \left[\frac{\partial C}{\partial p} \varepsilon^e + \frac{1}{2} K' \frac{\partial C}{\partial p} (\varepsilon^e)^2 \right] \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} \Gamma \frac{\partial C}{\partial T} (\varepsilon^e)^2 \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (21)$$

式中: $\frac{\partial p}{\partial t}$ 和 $\frac{\partial T}{\partial t}$ 均主要由 $\frac{\partial \varepsilon^e}{\partial t}$ 确定,因此应力松弛条件可近似地转化为弹性应变速率 $\frac{\partial \varepsilon^e}{\partial t} < 0$,即总应变速率小于塑性应变速率

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} < \frac{\partial \varepsilon^p}{\partial t} \quad (22)$$

对模拟结果进行数值考察,LiF01和LiF02均满足(22)式。下面分析加载压力、样品厚度和材料本构对(22)式不等号左右两项的具体影响。

总应变速率主要由外加压力和样品厚度决定。一方面,由于样品近冲击表面处的初始响应由加载压力确定,对于具有确定晶体塑性本构的材料,其近表面处的总应变速率亦由加载压力确定。另一方面,增加样品厚度,由于塑性流动过程中累积黏性效应,使得总应变速率随应力波在样品中传播距离的增加而不断减小。

塑性应变速率则主要由晶体热黏塑性本构决定。当样品中应力超过雨贡纽弹性极限,在塑性变形的初期,塑性应变尚未来得及增大至显著应变硬化的阶段,材料的黏塑性使得塑性应变率可能超过总应变率,则弹塑性转变后迅速进入应力松弛阶段。此后随着塑性变形的继续进行,应变硬化对应力波剖面的影响逐渐占据统治地位,即应力松弛之后材料强度的大幅度提高阶段。增加样品掺杂浓度,晶体塑性本构的率敏感性(参数 m)相对于应变硬化(参数 n)对应力影响的权重增加,如表3所示。结合(20)式,变形初期材料塑性应变很小,塑性应变率随率敏感性因子的增加而显著增加。

采用CPFEM模拟动态冲击加载的一个重要优势在于,模拟得到的波剖面能够体现应力松弛特征,并能够从连续介质力学角度进行解释,这是简单连续介质力学模型无法实现的。以Johnson-Cook(J-C)模型为例,其率相关塑性硬化方程为

$$\sigma = (\sigma_0 + B\varepsilon^n) \left(1 + A \ln \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \cdot \sigma(T) \quad (23)$$

式中: σ_0 为参考屈服强度, B 、 n 为应变硬化参数, A 为应变率硬化参数, $\dot{\varepsilon}$ 、 $\dot{\varepsilon}_0$ 分别为应变率和参考应变率, $\sigma(T)$ 是仅与变形温度相关的热软化项。采用J-C模型对LiF01和LiF02进行模拟验证,得到的应力波剖面和应变率历史如图5所示。弹塑性转变后应变率由 $0.1 \mu\text{s}^{-1}$ 数量级迅速下降至 $10^{-4} \mu\text{s}^{-1}$ 数量级,

应力波剖面上保持一段平台,而不会出现应力下降现象。应力无法松弛包括两方面原因:一方面,在采用 J-C 模型的连续介质力学计算中,屈服条件为 Mises 准则,而不是黏塑性流动准则,例如本研究所建立的(19)式;另一方面,J-C 模型的率硬化本构方程形式过于简单,无法描述波剖面上应力下降的现象^[30]。J-C 模型无法模拟应力松弛现象进一步佐证了晶体塑性模型中的黏塑性流动是低压冲击条件下应力松弛的关键原因。

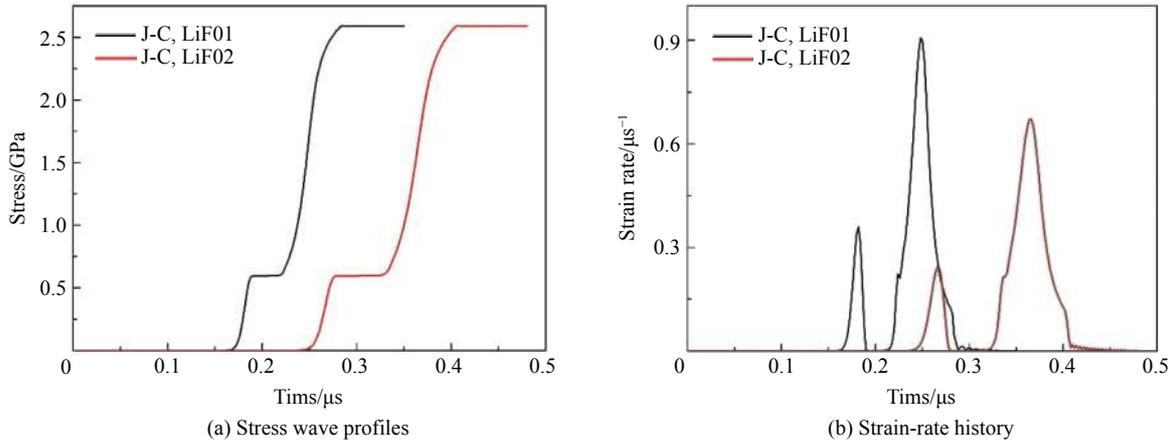


图 5 采用 Johnson-Cook 本构方程对 LiF01、LiF02 模型的模拟结果
Fig. 5 Simulation results of LiF01 and LiF02 models using Johnson-Cook constitutive equation

2.4 双波响应临界压力

材料在高压高应变率变形过程中,一方面相对于纯弹性变形阶段的波速(简称弹性波速)而言,材料经过弹塑性转变开始发生塑性变形,使得塑性阶段波速(简称塑性波速)减小;另一方面,由(10)式可知,随着样品内压力的增加,材料瞬态弹性模量增加,对塑性波速有增加的作用。基于以上两方面对塑性波速的竞争影响,当材料受到特定的冲击压力加载时,如果塑性波速小于弹性波速,则具有双波响应;如果塑性波速大于弹性波速,则具有单波响应。如上所述,对于具有确定厚度和材料本构的冲击样品,其弹性波速和塑性波速之间的大小关系由加载压力决定,因此材料的双波和单波响应之间具有临界压力。

采用 CPFEM 对不同飞片撞击速度下<100> LiF 的冲击变形行为进行模拟,估测双波响应和单波响应的临界压力。考虑到冲击波的单波响应要求塑性波加速追赶上弹性波,即要求波剖面上的斜率加速上升,可以采用压力关于时间的三阶导数大于零作为判断依据,模拟 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 模型在不同冲击压力下的应力波剖面,如图 6 所示。计算得到的双波和单波响应临界压力为 22.0~22.6 GPa,与李雪梅等^[17]根据实验外推的 22~23 GPa 临界压力区间一致,可见采用压力的三阶导数大于零作为判据时结果具有合理性。相反地,如果波剖面斜率的增速出现先增加后减小再增加的趋势,则认为具有双波响应特征。对 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 模型在 13.4 GPa 加载条件下进行模拟,如图 7 所示。图 7 中出现明显的斜率增速很小的阶段(AB 段),算得该阶段压力关于时间的二阶导数始终大于零,而三阶导数小于零,可见压力关于时间的二阶导数不足

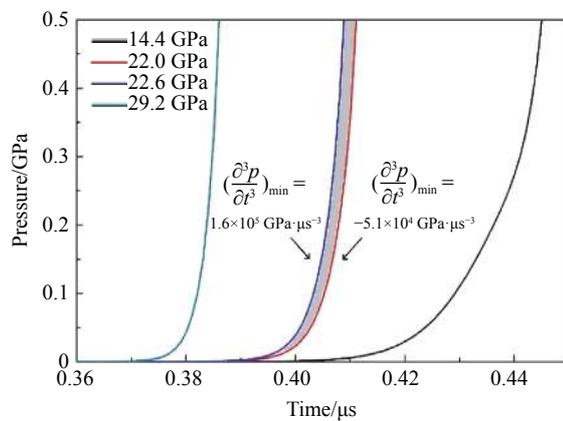


图 6 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 双波和单波响应的临界压力
Fig. 6 Critical pressure of two-wave and one-wave response of LiF03-LiF05 and LiF12 models

以描述双波响应特征。采用二阶导数大于零评判双波响应压力上限时所得结果与基于实验的外推结果相差较大,进一步表明采用压力关于时间的三阶导数估测双波和单波响应的临界压力是合理的。

以压力关于时间的三阶导数大于零作为评判依据,进一步算得 LiF11 的双波和单波响应的临界压力为 24.0~24.6 GPa, LiF13 的临界压力为 16.0~16.5 GPa。可见,随着对 LiF13、LiF12 和 LiF11 模型中样品掺杂浓度的依次升高,双波和单波响应的临界压力依次增大。这是由于杂质使塑性流动的黏性效应增强,因此相同厚度样品中的塑性波速超过弹性波速所需要的外加压力更高。

2.5 温升现象

晶体材料在高压高应变率下的冲击变形的另一个重要特征是力学变形和温度升高的热力学耦合作用。采用本研究建立的考虑热效应的动态 CPFEM 模型,对 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 在 0~40 GPa 压力范围内的冲击变形进行模拟,得到样品内温度随压力的变化,如图 8 所示。随着压力的增加, LiF 样品中的变形温度升高,当压力达到 40 GPa 时,温度升高 155.4 K,温升效应不可忽略。与准静态变形不同,高应变率下材料常数对温度的依赖进一步影响弹性变形,并引入 Grüneisen 状态方程用于描述热应力。根据 (14) 式对温升的计算,得到温升的贡献绝大部分(98% 以上)来源于弹性体积变形,而塑性功对温升的贡献较小。

3 结论

为研究<100> LiF 单晶在高速冲击条件下的动态响应,结合状态方程建立动态晶体塑性有限元模型,对它的应力波及其传播过程进行模拟和分析,得到如下结论:

- (1) 该模型能够较好地模拟实验测得的应力和物质速度波剖面,并能够反映波剖面上弹塑性双波响应、应力松弛以及弹性前驱幅值衰减特征;
- (2) 能够从连续介质力学角度对应力松弛现象进行解释,为进一步采用位错模型进行分析提供更多可能性;
- (3) 提出采用压力关于时间的三阶导数大于零的判断方法估测 LiF 单晶的弹塑性双波和单波响应的临界压力,为减小冲击实验中窗口材料对待测样品测量结果的影响提供参考;
- (4) 能够反映温度升高与力学变形之间的耦合响应。

参考文献:

- [1] 王礼立, 胡时胜, 杨黎明, 等. 材料动力学 [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2017: 7-9, 111-113.

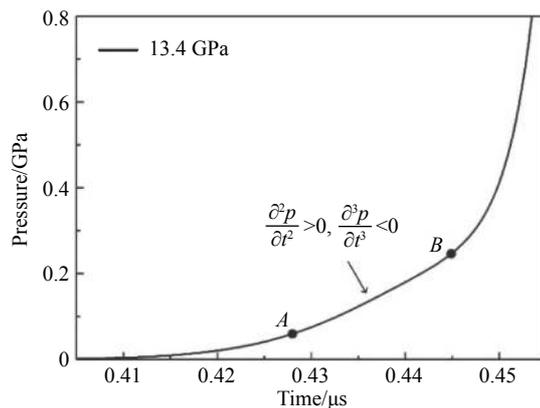


图7 模拟 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 在 13.4 GPa 压力下的双波响应

Fig. 7 Two-wave response of LiF03–LiF05 and LiF12 models under 13.4 GPa pressure by simulation

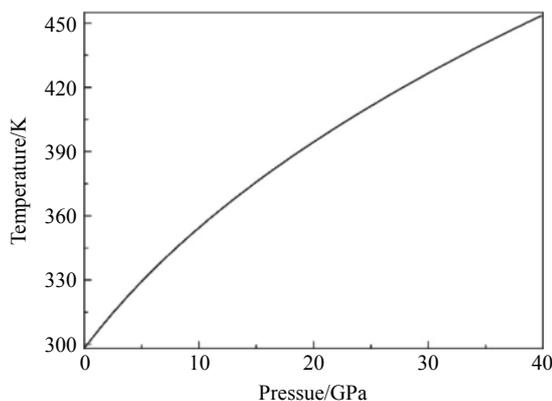


图8 模拟 LiF03、LiF04、LiF05、LiF12 在 0~40 GPa 冲击压力范围内温度随压力的响应

Fig. 8 Temperature responding to pressure ranging from 0 to 40 GPa of LiF03–LiF05 and LiF12 models by simulation

- [2] 经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 1999: 7-26.
- [3] BECKER R. Effects of crystal plasticity on materials loaded at high pressures and strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2004, 20(11): 1983–2006.
- [4] DE S, ZAMIRI A R. A fully anisotropic single crystal model for high strain rate loading conditions with an application to α -RDX [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 64: 287–301.
- [5] GILMAN J J. Plastic anisotropy of LiF and other rocksalt-type crystals [J]. *Acta Metallurgica*, 1959, 7(9): 608–613.
- [6] ASAY J R, FOWLES G R, DURALL G E, et al. Effects of point defects on elastic precursor decay in LiF [J]. *Journal of Applied Physics*, 1972, 43(5): 2132–2145.
- [7] ROSENBERG G, DUVAL G E. Precursor amplitudes in LiF from shocks propagating in <111> directions [J]. *Journal of Applied Physics*, 1980, 51(1): 319–330.
- [8] WINEY J M, GUPTA Y M. Nonlinear anisotropic description for the thermomechanical response of shocked single crystals: inelastic deformation [J]. *Journal of Applied Physics*, 2006, 99(2): 023510.
- [9] ASARO R J. Micromechanics of crystals and polycrystals [J]. *Advances in Applied Mechanics*, 1983, 23(8): 1–115.
- [10] HOGER A. The stress conjugate to logarithmic strain [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1987, 23(12): 1645–1656.
- [11] 黄克智. 固体本构关系 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1999: 205-208.
- [12] LEMAITRE J, CHABOCHE J L. Mechanics of solids materials [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1990: 311-313.
- [13] ASARO R J, RICE J R. Strain localization in ductile single crystals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1977, 25(5): 309–338.
- [14] KUMAR A, HAUSER F E, DORN J E. Viscous drag on dislocations in aluminum at high strain rates [J]. *Acta Metallurgica*, 1968, 16(9): 1189–1197.
- [15] STEINBERG D J, COCHRAN S G, GUINAN M W. A constitutive model for metals applicable at high-strain rate [J]. *Journal of Applied Physics*, 1980, 51(3): 1498–1504.
- [16] NEMAT-NASSER S, GUO W G, KIHIL D P. Thermomechanical response of AL-6XN stainless steel over a wide range of strain rates and temperatures [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(8): 1823–1846.
- [17] 李雪梅, 俞宇颖, 张林, 等. <100>LiF 的低压冲击响应和 1 550 nm 波长下的窗口速度修正 [J]. *物理学报*, 2012, 61(15): 156202.
- LI X M, YU Y Y, ZHANG L, et al. Elastic-plastic response of shocked (100) LiF and its window correction at 1 550 nm wavelength [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(15): 156202.
- [18] ASAY J R, HICKS D L, HOLDRIDGE D B. Comparison of experimental and calculated elastic-plastic wave profiles in LiF [J]. *Journal of Applied Physics*, 1975, 46(10): 4316–4322.
- [19] MILLER R A, SMITH C S. Pressure derivatives of the elastic constants of LiF and NaF [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1964, 25(12): 1279–1292.
- [20] 于锦泉, 肖亚斌, 周显明, 等. 冲击压缩下单晶 LiF 高压声速及卸载路径研究 [J]. *高压物理学报*, 2005, 19(3): 206–212.
- YU J Q, XIAO Y B, ZHOU X M, et al. Study on sound velocity and unloading path for single crystal LiF under shock compression [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2005, 19(3): 206–212.
- [21] ANDERSSON S, BACKSTROM G. Thermal conductivity and heat capacity of single-crystal LiF and CaF₂ under hydrostatic pressure [J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1987, 20(35): 5951.
- [22] NELDER J A, MEAD R. A simplex method for function minimization [J]. *The Computer Journal*, 1965, 7(4): 308–313.
- [23] YAO S L, PEI X Y, YU J D, et al. A dislocation-based explanation of quasi-elastic release in shock-loaded aluminum [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(3): 035101.
- [24] NEWTON M D, O'KEEFFE M, GIBBS G V. *Ab initio* calculation of interatomic force constants in H₆Si₂O₇ and the bulk modulus of α quartz and α cristobalite [J]. *Physics and Chemistry of Minerals*, 1980, 6(4): 305–312.
- [25] GRAHAM R A. Shock-wave compression of x-cut quartz as determined by electrical response measurements [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1974, 35(3): 355–372.
- [26] RAMMO N N, FARID S B. Thermal expansion coefficients and Grüneisen parameters of quartz at high temperature by X-ray method [J]. *Powder Diffraction*, 1994, 9(2): 148–150.
- [27] MEADE C, JEANLOZ R. Frequency-dependent equation of state of fused silica to 10 GPa [J]. *Physical Review B*, 1987, 35(1):

236.

- [28] BOGARDUS E H. Third-order elastic constants of Ge, MgO, and fused SiO₂ [J]. *Journal of Applied Physics*, 1965, 36(8): 2504–2513.
- [29] JOHNSON J N, JONES O E, MICHAELS T E. Dislocation dynamics and single-crystal constitutive relations: shock-wave propagation and precursor decay [J]. *Journal of Applied Physics*, 1970, 41(6): 2330–2339.
- [30] DING J L, ASAY J R, AO T. Modeling of the elastic precursor behavior and dynamic inelasticity of tantalum under ramp wave loading to 17 GPa [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 107(8): 083508.

Crystal Plasticity Finite Element Simulation of High-Rate Shock Deformation Process of <100> LiF

LIU Jingnan¹, YE Changqing¹, CHEN Kaiguo², YU Yuying², SHEN Yao¹

(1. *The State Key Lab of Metal Matrix Composites, School of Material Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China;*

2. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China*)

Abstract: A crystal plasticity finite element model combined with equation of state was built to simulate the dynamic elastic-plastic large deformation behavior of <100> LiF under high-rate shock loading. The characterization of the stress wave profile, the patterns of the dynamic mechanical evolution and their essential causes in view of the continuum mechanics were obtained through simulations, with the following results achieved: (1) the wave profiles of millimeter-sized specimens exhibit elastic-plastic two-wave response, elastic precursor decay and stress relaxation below 15 GPa; (2) in view of continuum mechanics, the stress relaxation is essentially due to the viscous plastic flow which accounts for the increase rate of the total strain being less than that of the plastic strain, and which further reduces the elastic strain and pressure; (3) the third derivative of pressure to time being greater than zero was proposed as a criterion for estimating the critical pressure of the two-wave and the one-wave response of the stress wave profile, and the estimation result indicated that the critical pressure increased with the increase of the doping concentration in specimen; (4) the effect of temperature rise during the high-rate shock deformation is non-negligible, and the elastic volumetric deformation contributes to most of the temperature rise.

Keywords: LiF; crystal plasticity; equation of state; stress relaxation; two-wave response