

动态压缩下微介观物理新认识

李江涛 王倩男 胡建波[†]

(中国工程物理研究院流体物理研究所 冲击波物理与爆轰物理实验室 绵阳 621900)

2022-03-28收到

[†] email: jianbo.hu@caep.cn

DOI: 10.7693/wl20220403

New insights into micro- and meso-scale physics under dynamic compression

LI Jiang-Tao WANG Qian-Nan HU Jian-Bo[†]

(Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

摘要 动态压缩下材料的响应特性由于在国防科技、航空航天、能源环境等领域的应用需求而受到广泛关注。文章从传统的动态压缩实验研究方法出发,介绍了材料在平面冲击波作用下的宏观响应行为和规律性认识,并指出了传统研究方法对描述真实材料行为存在的不足以及开展微介观尺度实验物理研究的迫切需求。在该需求牵引下,简要介绍了动态X射线成像、衍射、散射等原位诊断技术,并总结了动态压缩下在塑性变形、冲击相变、层裂破坏等关键动力学过程中取得的微介观物理新认识。

关键词 动态压缩, 原位诊断技术, 微介观物理, 材料动力学

Abstract Dynamic behavior of materials under dynamic compression is of great interest in the fields of defense-related science and technology, space flight and aviation, energy and environment, and so on. This paper proceeds from traditional methods for dynamic compression experiments, introduces macroscopic responses and systematic understanding of materials under planar impact, then points out the deficiencies of traditional research approaches for describing dynamic behavior of realistic materials and the active demand for studying micro- and meso-scale physics. To fulfil this demand, we present the latest progress in dynamic compression science, in which advanced *in situ* diagnosis techniques and their working principle are briefly introduced, and new micro- and meso-scale insights into plastic deformation, shock-driven phase transition, and spall and failure have been reviewed.

Keywords dynamic compression, *in situ* diagnosis, micro- and meso-scale physics, material dynamics

1 引言

动态压缩下材料的响应特性是冲击波物理、爆炸力学等学科领域关注的重要科学问题,也是支撑国防科技和工程技术发展的关键基础,在航空航天、能源环境、交通安全等国民经济领域具

有重要的应用价值。日常生活中耳熟能详的陨石撞击、碰撞防护、页岩气开采、爆炸焊接等高速碰撞过程(图1)都与动态加载下材料的响应特性息息相关。

虽然陨石撞击等超高速碰撞作为自然现象长期存在,但系统研究动态压缩下材料的响应特性则要追溯到20世纪50年代后期。在武器物理等军

事需求驱动下，各大国家竞相开展材料在动态压缩下的响应特性研究，动态压缩科学(包含冲击波物理与爆炸力学)逐渐发展成为一门具有强烈工程应用背景的专门学科。其中，以轻气炮为代表的平面冲击加载技术和以粒子速度剖面测量为代表的多普勒激光干涉测速技术成为研究材料动态响应特性的基本研究手段。

如图2(a)所示，轻气炮利用高压气体驱动平面飞片高速撞击样品，在样品内部产生往前传播的压缩波。压缩波的传播、波与界面的相互作用以及波与波之间的相互作用引起样品材料产生一系列物理和力学变化，如弹塑性转变、相变、层断裂、表面微喷射等。利用光的多普勒效应，激

光干涉测速技术实时测量样品自由面或者样品/窗口界面的粒子速度，从而获得动态加载下材料响应特性的规律性认识。

在拉格朗日坐标(简称拉氏坐标)下图2(b)给出了典型含相变材料中应力波传播的示意图。在较低加载压力下，一般来说，材料中弹性波、相变波和塑性波的波速成递减关系，因此应力波在压缩样品过程中产生三波分离现象，在粒子速度剖面上表现为波的上升前沿出现台阶式的跳跃，如图2(c)所示。其中弹性波的应力幅值即为材料的雨贡纽(Hugoniot)弹性极限(HEL)。当应力超过HEL时，材料发生塑性变形，甚至经历冲击相变，最终达到压缩终态，即雨贡纽状态。因此，在压缩阶段，基于粒子速度剖面测量可以得到HEL、相变压力和雨贡纽状态的冲击压力等决定样品材料压缩特性的重要物理参数。压缩波进一步传播，分别到达样品和飞片的自由面后将产生两组相向而行的稀疏波，其传播速度为压缩状态下的高压声速。如两组稀疏波在样品内部交汇，则可能引起样品的拉伸层裂，导致后续稀疏波在层裂处反射形成压缩波，在粒子速度剖面上表现为速度的回弹。速度回弹前卸载程度和层裂位置反映了层裂前材料内部的最大拉伸应力状态。因此，在卸载阶段，基于粒子速度的剖面测量可以获得高压卸载声速、层裂强度等决定样品材料损伤失效行为的关键力学信息。

由此可见，利用以激光干涉测速技术为代表的传统测量技术可以获得动态压缩下材料响应特性的重要信息以及规律性认识，从而为构建动态加载下材料动力学模型(如本构模型、状态方程模型、层裂模型、相变动力学模型等)提供关键的实验依据。另一方面，由于传统诊断技术获得的是宏观测量结果，由此构建的物理模型基本都是基于连续介质理论框架，并未考虑材料内部真实微结构及其演化对材料动态响应特性的影响，因此无法区分晶粒大小与取向、位错与孪晶分布、杂质与空穴等因素对材料在动态加载下宏观响应造成的差异，也无法有效描述以微结构演化为主要特征的材料动力学(kinetics)行为，因此难以建立真实材料的构(微结构)—载(载荷)—效(性能)关

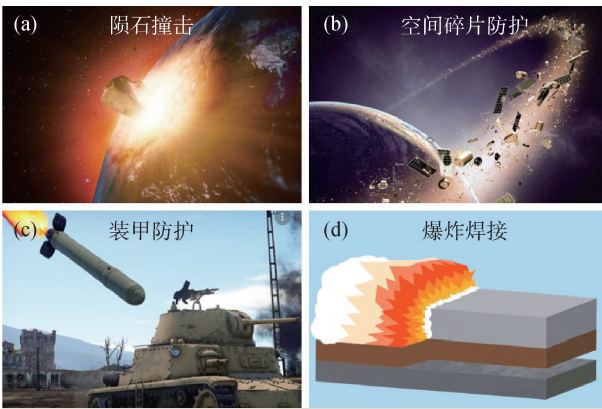


图1 普遍存在的超高速撞击现象(图片来源于网络)

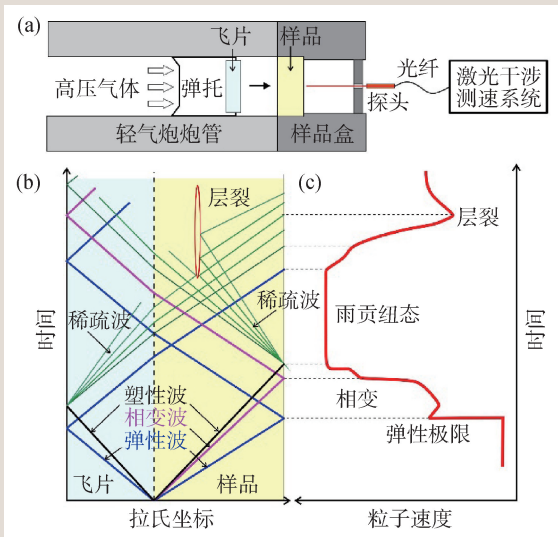


图2 (a)轻气炮驱动平面碰撞加载以及粒子速度剖面诊断示意图；(b)拉氏坐标下典型含相变材料中应力波传播的示意图；(c)粒子速度剖面示意图及其与(b)的对应关系

系。这种对于真实材料动态响应特性认识的不足,驱动着动态压缩科学与更先进的诊断技术相结合。

2 动态加载下材料微介观诊断技术

虽然自20世纪60年代末Johnson等人^[1]就开始了对动态加载下材料微介观响应特性的探索研究,但直到21世纪初随着大型科学装置能力的不断提升,动态微介观诊断技术才取得长足的进步,可用于瞬态捕捉动态加载下材料内部的微介观结构信息,极大地促进了动态压缩科学的发展。

下面介绍几种较为广泛应用的微介观诊断技术及其诊断原理。

2.1 动态X射线衍射技术

由于X射线的波长与材料原子排列的空间周期相接近,且X射线在材料中具有一定的穿透深度,因此通过动态X射线衍射技术可以反映材料在冲击等动态压缩过程中瞬态的原子排列等微观结构信息。X射线脉冲分别在压缩前和压缩后的晶体中发生衍射,导致衍射角的偏转,由此确定压缩前后原子排列的变化信息。通过调控压缩波与X射线脉冲之间的时序关系,可以获得一组随时间演化的X射线衍射谱。动态X射线衍射技术通过测量材料内部晶面间距、晶面取向和晶面族特征的变化,反映晶格在动态压缩下发生的塑性变形、结构相变、冲击熔化等,为呈现材料在动态过程中的微介观结构演化提供了一种重要的技术手段。

2.2 动态X射线成像技术

X射线在穿透材料之后其亮度(振幅的模平方)和相位均会发生一定的变化,这种变化与材料的原子组成、密度、厚度等因素密切相关,因此可以利用针对X射线亮度或相位的探测技术对材料进行成像。而在压缩波扫过的瞬间,利用脉冲X

射线可以对材料进行瞬态的X射线成像,典型的技术有基于亮度探测的动态X射线吸收成像技术和基于相位探测的动态X射线相衬成像技术。相对来说,相衬成像可以实现更高的空间和密度分辨能力,但对光源的相干性也有更为严苛的要求。由于X射线自由电子激光(XFEL)能产生几乎全相干的X射线脉冲,因此基于XFEL的相衬成像技术空间分辨率可达亚微米量级。在压缩波传播过程中,由于波前和波后的密度差异引起的折射率变化,导致透过压缩前和压缩后物质的X射线之间存在相位差,两者之间发生干涉形成干涉条纹,并被X射线探测器记录。由于成像的衬度(相位差)取决于压缩波前、后的面密度差,因此相衬成像可以具有更高的体密度分辨能力。利用动态X射线相衬成像技术,可以研究动态加载下材料内部的密度分布、损伤断裂、表面的破碎喷射以及界面不稳定性演化等动力学过程。

2.3 动态X射线小角散射技术

动态X射线小角散射技术主要是基于介观尺度的电荷密度波动对X射线脉冲的散射原理。介观尺度的电荷密度波动主要来自孔洞、第二相颗粒等介观尺度缺陷,其尺寸 L 远大于晶格常数 d ,根据布拉格定律,介观尺度缺陷的散射造成的波矢(角度)变化 $2\pi/L$ 远小于探测晶体结构的衍射角,因此需要在小角度散射方向进行高角度分辨的探测,而散射强度主要取决于缺陷结构的密度、形状和空间分布。动态X射线小角散射技术可用于研究动态压缩和拉伸过程中孔洞的坍塌、形核与增殖等动力学过程。但由于从动态X射线小角散射信号反推介观尺度缺陷的形状、密度分布较为困难,目前的数据解读仍然非常依赖于建模和理论模拟结果。

除以上技术外,还有其他一些正在发展的原位诊断技术,包括动态X射线吸收谱技术、瞬态相干衍射成像技术、瞬态带电粒子(质子或高能电子)照相技术等,也都有望在动态压缩下材料响应行为的微介观研究中得到重要的应用。

3 动态压缩下微介观物理研究

随着动态微介观诊断技术的发展，科研人员通过成像技术可以在实空间观测材料内部介观结构的演化图像，并通过衍射技术在倒空间观测微观的动力学过程，从而对材料在动态压缩过程中的微介观响应行为有了新的科学认识。

3.1 冲击压缩过程的介观尺度成像

激光干涉测速技术由于采用可见波段或红外波段激光，所以对非透明介质不具有穿透性，只能直接测量样品表面的动力学过程，而样品内部的演化过程只能通过物理推演间接得到。而X射线具有较强的穿透能力，因此动态X射线成像技术可以直接测量动态加载下样品内部的结构演化，提供传统光学测量方法不能直接测获的介观物理信息。

如在连续介质的假设下，冲击波阵面通常被视为无限小厚度的理想密度/速度/压力间断面。而在真实的材料中，由于黏性等能量耗散机制，冲击波在材料传播中形成的阵面往往具有一定的宽度。由于宏观测量技术的诊断能力限制，传统测量方法很难直接确定冲击波阵面的宽度。而动态X射线相衬成像技术由于具有高时空分辨能力以及对材料密度变化的敏感性，可以对冲击波阵

面进行直接的测量。2015年Schropp等人^[2]以及2019年Brown等人^[3]分别利用动态X射线相衬成像技术对金刚石和硅中的动态压缩过程进行了介观尺度成像研究，并由此直接给出了波阵面的宽度。另外，通过相位重构的方法，首次实现了动态加载下不同应力波后材料密度的直接测量，如图3所示。

这些诊断结果揭示了动态加载过程中应力波对应的介观物理图像，为我们更深入理解动态微介观物理中出现的动力学机制提供了实验基础。但也需要指出，受限于空间分辨能力，动态X射线相衬成像技术目前尚无法在晶格尺度上对微观结构进行成像。关于材料在塑性响应、相变等方面的进一步认识需要借助动态X射线衍射等微观诊断技术。

3.2 冲击压缩下材料的塑性响应

位错滑移和孪生变形被认为是材料塑性响应的两类主要机制。根据材料晶体结构的不同，主导的塑性变形机制也会存在差异。一般而言，以贵金属(金、银、铜)为代表的体心立方结构的主要塑性机制为位错滑移，表现出较好的延展性，而强度往往较低。而以钽、钼、钨为代表的体心立方结构金属和以镁、铍为代表的密排六方金属在高应变率加载或卸载过程中容易表现出较为复杂的塑性响应行为。传统波剖面诊断技术由于

是宏观测量方法，所以不能对位错、孪晶等微结构的演化进行直接测量。动态X射线衍射技术在塑性变形研究中的应用，首次直观给出了动态压缩下材料塑性变形的微观机理。

以体心立方金属钽为例，相对于面心立方金属而言位错滑移过程较为困难，一方面，体心立方晶格的密排{110}面的密排度较低，不利于位错的形核与运动；另一方面，体心立方晶格包含同一个最短晶格矢量 $1/2 \langle 111 \rangle$ 的滑移面

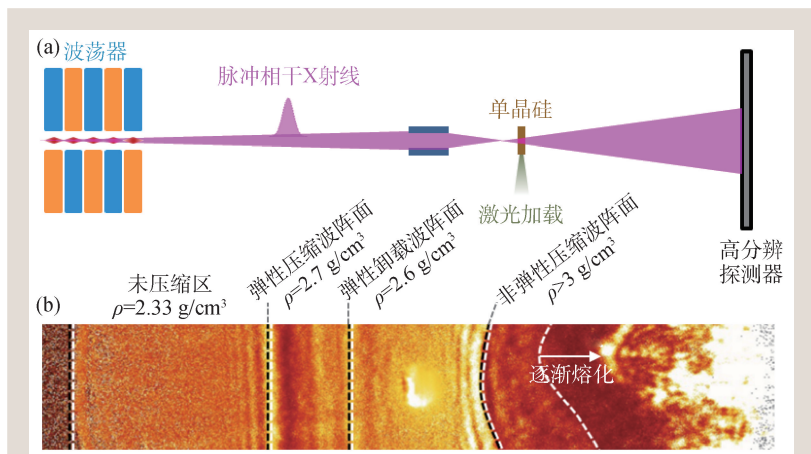


图3 硅在动态压缩下的X射线相衬成像 (a)动态X射线相衬成像实验布局示意图；(b)硅的压缩波阵面及密度测量结果^[3]

可以有三个： $\{110\}$ 、 $\{112\}$ 、 $\{123\}$ ，容易形成交滑移。在交滑移主导的情况下位错滑移路径经常是各个方向摇摆的，容易受材料内部缺陷、晶粒取向、温度等因素的影响，导致位错滑移并不“顺畅”。在这种情况下孪生变形往往成为塑性变形的另一种重要机制。如图4所示，2017年Wehrenberg等人^[4]通过动态X射线衍射发现钽在冲击压力不超过80 GPa时孪生变形成为主导塑性变形机制；而随着冲击压力的提升，在晶格需要承受更高剪应力的情况下位错的形核与运动不再成为主要障碍，位错滑移逐渐取代孪生变形成为主导的塑性变形机制。

而以镁为例的密排六方金属晶格对称性较低，并且原子间形成的最稳定键角随着晶格结构 c/a 而存在差异，导致位错形核过程容易受到层错能的影响，因而变形过程中可供启动的滑移系数数量严重不足，容易出现承受更高剪应力的情况，促使孪生变形成为一种重要的塑性变形补充机制。在不同加载方向上，由于响应的塑性机制不同而表现出较强的各向异性。在沿着 c 轴方向冲击压缩时镁的塑性变形机制以位错滑移为主^[5]，而在垂直于 c 轴方向冲击加载时则容易形成拉伸孪晶^[6]，表现出显著的各向异性，如图5所示。另外，镁在卸载过程和加载过程中的塑性变形机制并不具有对称性，镁在沿着 c 轴方向卸载时容易产生拉伸孪晶^[5]，而其垂直于 c 轴方向卸载时则会发生退孪生过程^[7]。这些研究结果表明以镁为代表的密排六方金属在高应变率塑性变形过程中存在非常强的各向异性，而且表明其主导塑性机制会随着应力状态的变化而发生改变。

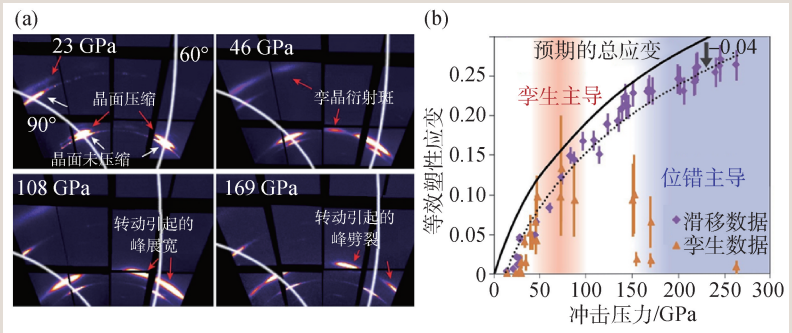


图4 在激光冲击压缩下钽塑性变形机理的动态X射线衍射诊断^[4] (a)不同冲击压力下的X射线衍射谱；(b)孪生变形和晶面滑移占比随冲击压力的变化

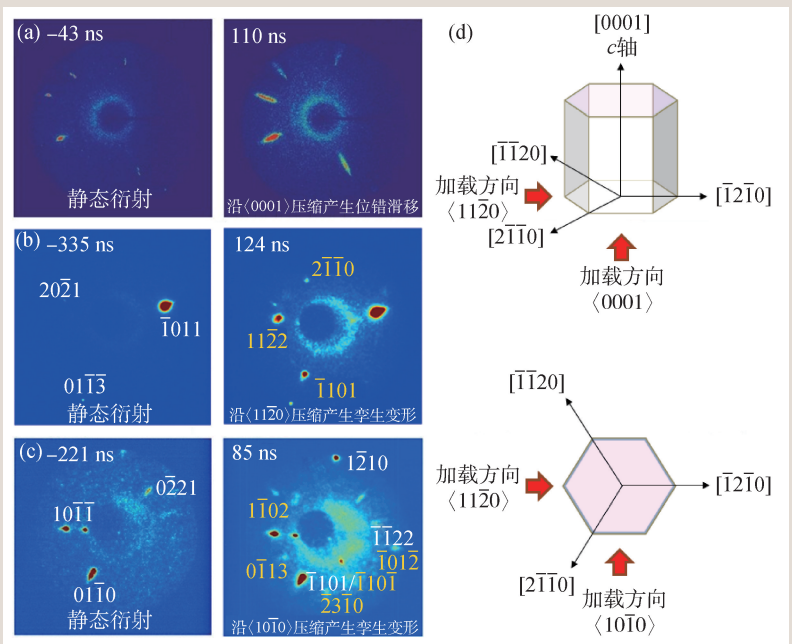


图5 单晶镁在不同方向进行冲击压缩前后的X射线衍射图案 (a)沿着 c 轴方向^[5]；(b)，(c)垂直 c 轴方向^[6]；(d)单晶镁的加载方向示意图

3.3 冲击压缩下材料的相变

在动态压缩下，部分材料可以通过相变产生的晶格体积变化吸收变形能，使得相变成为类似于塑性变形的一种应力松弛机制。在这一意义上，伴随相变波出现的应力松弛过程以及不同加载应变率下相变波对应的应力剖面幅值变化与弹塑性转变过程极其类似。因而，传统上普遍的做法是通过波剖面的拐折或晶格模量(声速)随压力变化的不连续性判断材料是否发生了相变。但事实上，以上方法都没有给出压缩导致相变的直接证据，更不能确定相变后材料的相结构。随着动态

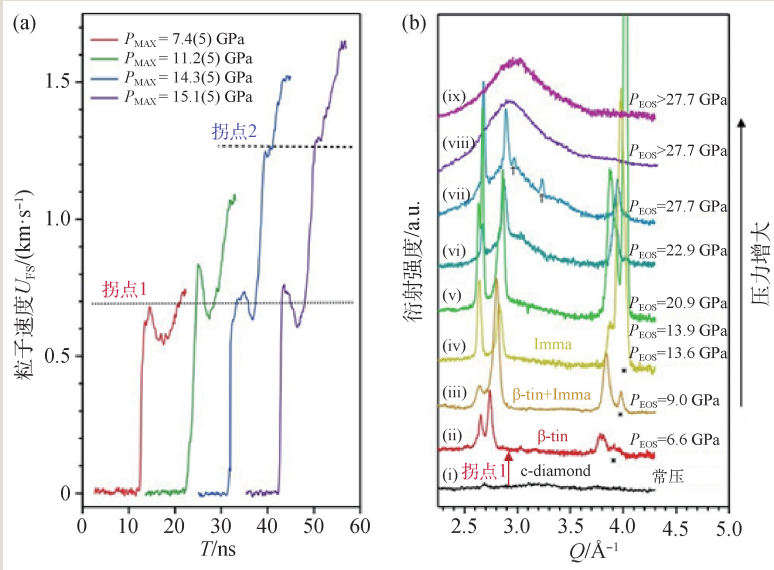


图6 (a)单晶硅在不同压力冲击加载后的波剖面^[8]; (b)单晶硅在不同压力冲击加载后的X射线衍射谱^[8]

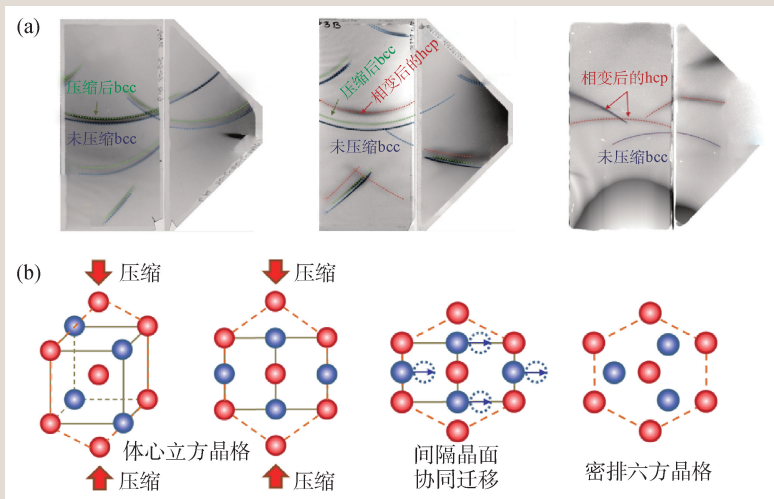


图7 动态压缩下铁的体心立方(bcc)—密排六方(hcp)相变的相变机制 (a)不同冲击压力下的X射线衍射谱^[12]; (b)从衍射谱结果分析中得出的原子尺度相变机制

微介观诊断技术的发展，能够对动态加载过程中材料内部的晶格结构变化进行直接观测，从而对动态加载下材料的相变取得了颠覆传统认知的进展。

以硅为例，作为一种自然界丰度较高的元素，在地壳、地幔和地核中有着广泛的分布，因而硅在高压下的相结构具有重要的研究意义。传统的冲击波剖面诊断发现单晶硅中沿[111]方向传播的冲击波具有三波结构，波剖面“拐折”对应的压力分别为5.4 GPa和10.1 GPa，被认为分别对应于弹塑性转变和固固结构相变。2018年

McBride等人^[8]通过激光加载的动态X射线衍射诊断发现单晶硅在5 GPa左右发生向 β -tin相的转变，并且随着压力的增加存在 β -tin与Imma的混合相区，直至压力达到9.5 GPa左右时高压相全部转化为Imma相，如图6所示。

另一个例子是钼。作为过渡金属的典型代表，钼的高压相结构稳定性被认为与4d电子轨道平均被占据数密切相关。传统上普遍认为，高压可以通过改变4d电子数使其发生从体心立方到密排六方的结构相变。1989年Hixson等人^[9]通过冲击后的高压声速测量实验也指出，钼在210 GPa(约4100 K)发生从体心立方到密排六方结构的固固相变。2015年Wang等人^[10]在OMEGA装置上通过动态X射线衍射技术探测了钼在冲击压缩路径上的相结构变化，发现钼在熔化前(390 GPa, 约10000 K)始终保持体心立方结构。

以上研究结果表明，通过原位微介观结构诊断技术可以直接判断材料在动态加载过程中的相组成和组分演化，纠正通过波剖面或声速测量等传统方法引入的错误认识，充分体现了动态微介观诊断技术在研究材料冲击相变

方面的优越性。另一方面，动态微介观诊断技术不仅可以诊断材料在动态加载过程中的相结构，而且能够通过相变前后的晶面对应关系以及相变过程中的微介观结构特征获得相变机理的微观认识。

如1956年Bancroft等人^[11]首次发现了铁在13 GPa冲击加载下的体心立方—密排六方相变，随后有大量工作研究了该相变，但其微观机理直到半个世纪以后随着动态微介观诊断技术的发展才得以澄清。2005年Kalantar等人^[12]在大型激光装置上通过铁单晶的动态X射线衍射诊断结合分

子动力学模拟给出了铁单晶沿着<001>方向冲击时从体心立方密排六方结构转变的微观路径,即原体心立方晶格首先在[001]方向发生单轴压缩,然后间隔的(110)面原子沿着[-110]方向发生协同迁移(shuffling),完成向密排六方晶格的转变,如图7所示。

而金和银作为面心立方贵金属材料,一直被认为在高压下具有很好的相稳定性,然而2019年Sharma等人^[13]利用动态X射线衍射技术发现金在冲击压缩至176 GPa时出现了固固相变,形成了面心立方与体心立方的混合相,而银在冲击压缩至170 GPa时也发生了从面心立方到体心立方的固固相变^[14],如图8所示。同时,Sharma等人给出了金和银在动态压缩过程中产生大量层错结构的依据,认为金和银主要受到高密度层错的影响而发生了结构相变^[14]。这一相变机理强调了加载应变率和材料的微介观结构对相稳定性和相变路径的影响,一定程度上突破了传统上关于平衡态相变机理的认识。

虽然目前被普遍使用的损伤层裂模型是基于孔洞的形核、长大、贯穿过程的动力学模型,但其实验依据主要来自于动态层裂回收后的微观表

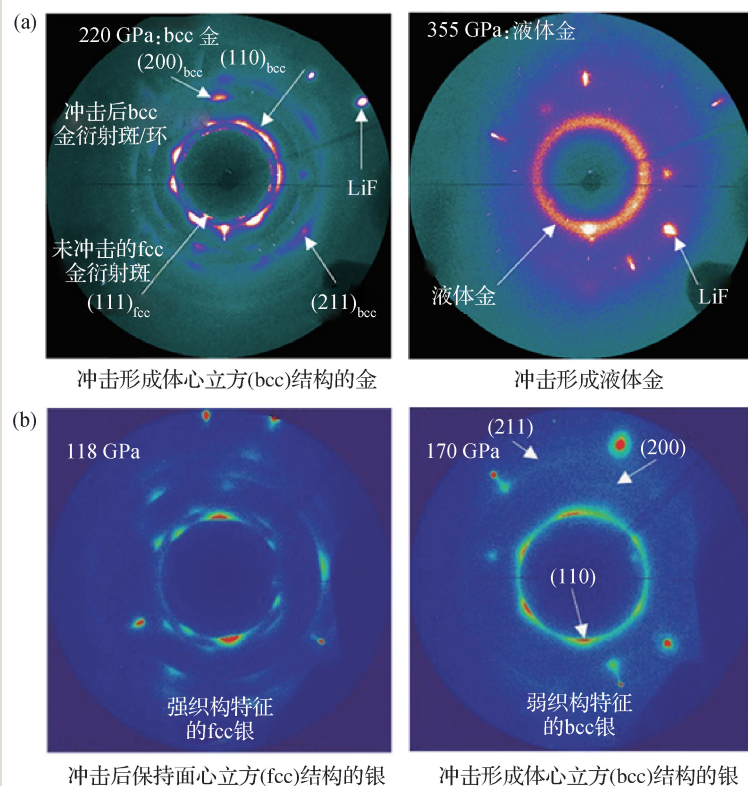


图8 (a)金在冲击压缩后转变为体心立方结构(左图)和发生熔化的X射线衍射图(右图)^[13]; (b)银在冲击压缩后由强织构特征的面心立方结构(左图)向弱织构特征的体心立方结构转变的X射线衍射图(右图)^[14]

3.4 冲击卸载过程中材料的层裂

如图2所示,传统的层裂研究主要通过波剖面测量的结果确定材料的层裂强度,并认为层裂强度是材料的本征属性,对应于临界拉伸应力。但研究表明,材料的层裂强度与加卸载过程中的压力、脉宽、应变率等都有着密切的关联,是一个依赖于材料内部损伤演化过程的动力学量。基于临界拉伸应力的层裂判据无法解释材料层裂前的微介观损伤演化过程及其对材料层裂强度的影响。

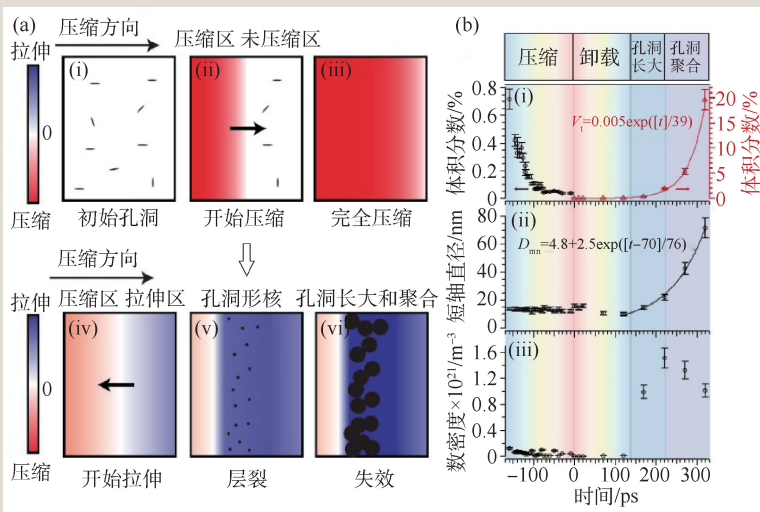


图9 铝动态拉伸断裂过程的X射线小角散射研究^[15] (a)动态拉伸断裂演化过程的示意图; (b)X射线散射谱定量分析给出孔洞体积占比、孔洞大小、孔洞数密度等随时间的演化



中国光博会

光学全产业链生态链 展示及交流平台



精密光学展&
摄像头技术及应用展
PRECISION OPTICS EXPO & CAMERA EXPO

2022年9月7-9日

深圳国际会展中心(宝安新馆)



扫码登记免费参观

第24届中国国际光电博览会

240,000M²展示面积 | 10,000+专业观众 | 3,000+参展企业

同期展会

- 信息通信展
INFORMATION COMMUNICATIONS EXPO
- 激光技术
及智能制造展
LASER TECHNOLOGY
& INTELLIGENT MANUFACTURING EXPO
- 红外技术及应用展
INFRARED APPLICATIONS EXPO
- 智能传感展
INTELLIGENT SENSING EXPO
- 光电子创新
& 新型显示创新技术展
PHOTONICS INNOVATION & DISPLAY EXPO

征分析,一直缺乏材料从动态拉伸至层裂过程的实时原位微介观表征结果。2020年Coaley等人^[15]在XFEL装置上利用动态X射线小角散射实时原位表征了多晶铜从冲击压缩到动态拉伸乃至层裂的介观演化过程,在实验上首次证实了在动态拉伸阶段孔洞形核、长大乃至贯穿形成裂纹的动力学过程,如图9所示,为发展基于孔洞形核长大的层裂模型提供了坚实的物理基础。

4 总结与展望

长期以来,在高速碰撞涉及的材料动力学过程研究和应用中,我们均在连续介质的假设下近似认为材料时刻处于理想的热力学基态,忽略了大量微介观结构的产生与演化过程以及由此带来的动力学效应。我们介绍了21世纪以来材料在动态压缩下微介观结构响应方面取得的重要进展,试图从微介观的视角对材料的塑性变形、冲击相变和层裂等关键过程建立新的物理认识。可以预见,随着一系列大型科研装置在中国的兴建以及微介观诊断技术的进一步发展,我国科学家将有更多机会揭示在超高速碰撞过程中材料内部的微介观动力学过程。

参考文献

- [1] Johnson Q, Keeler R N, Lyle J W. *Nature*, 1967, 213: 1114
- [2] Schropp A *et al.* *Sci. Rep.*, 2015, 5: 1
- [3] Brown S B *et al.* *Sci. Adv.*, 2019, 5: eaau8044
- [4] Wehrenberg C E *et al.* *Nature*, 2017, 550: 496
- [5] Turneaure S J, Renganathan P, Winey J M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 120: 265503
- [6] Chen S *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 123: 255501
- [7] Williams C L *et al.* *Phys. Rev. Mater.*, 2020, 4: 083603
- [8] McBride E E *et al.* *Nat. Phys.*, 2019, 15: 89
- [9] Hixson R S, Boness D A, Shaner J W *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62: 637
- [10] Wang J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2015, 92: 174114
- [11] Bancroft D, Peterson E L, Minshall S. *J. Appl. Phys.*, 1956, 27: 291
- [12] Kalantar D H *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95: 075502
- [13] Sharma S M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 123: 045702
- [14] Sharma S M, Turneaure S J, Winey J M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 235701
- [15] Coakley J *et al.* *Sci. Adv.*, 2020, 6: eabb4434