



انتشار موج شوک در جامد آرگون به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی: بررسی تأثیر کرنش اولیه

فرهاد ستوده¹، علی رجب پور²، منصور خانکی^{2*}

1- کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین

* قزوین، کدپستی 1681834149، khanaki@eng.ikiu.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 25 آذر 1394

پذیرش: 18 بهمن 1394

ارائه در سایت: 07 فروردین 1395

کلید واژگان:

شبیه سازی دینامیک مولکولی

موج شوک

کرنش اولیه

چکیده

در این مطالعه روش شبیه سازی دینامیک مولکولی برای بررسی انتشار موج شوک در یک جامد مورد استفاده قرار می گیرد. جعبه شبیه سازی شامل 51840 اتم در دمای 5 کلون است که اتمها با پتانسیل دوجسمی با یکدیگر برهمکنش می کنند. موج شوک توسط حرکت یک پیستون با سرعت های متفاوت در جامد ایجاد می شود که سرعت موج شوک ایجاد شده در تطابق خوبی با نتایج تجربی و منحنی هوگونیت می باشد. پیستون از یک طرف جعبه شبیه سازی با سرعت های از 1.2 تا 1.3 برابر سرعت صوت در جامد آرگون در یک چگالی مشخص به نمونه برخورد می کند. برخی خواص ترمودینامیک نظیر چگالی، دما و فشار در طول انتشار موج شوک اندازه گیری می شوند. نشان داده می شود که این کمیت های ترمودینامیکی (چگالی، دما و فشار) به صورت قابل ملاحظه ای هنگامیکه موج شوک از جامد عبور می کند افزایش می یابند. همچنین نشان داده می شود که ایجاد کرنش اولیه در جامد به اندازه 6.5% باعث بهبود افزایش فشار ایجاد شده در جسم به اندازه 9% می گردد. نتایج بدست آمده می توانند در بهبود قدرت موج شوک با ارائه توصیفی میکروسکوپی از فرآیند کاربرد داشته باشند.

Shock wave propagation in the solid argon by molecular dynamics simulation: Effect of initial strain

Farhad Sotoudeh, Ali Rajabpour, Mansour Khanaki*

Department of Mechanical Engineering, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran.

* P.O.B. 1681834149 Qazvin, Iran, khanaki@eng.ikiu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 16 December 2015

Accepted 07 February 2016

Available Online 26 March 2016

Keywords:

Molecular dynamics simulation

shock wave

initial strain

ABSTRACT

In this study, the method of molecular dynamics simulation is performed to investigate the shockwave propagation in a solid. The simulation cell contains 51840 atoms at 5 K interacting by means of a pairwise potential. The shockwave is generated using the motion of a piston with different velocities in the solid and the resulted shockwave velocity is in good agreement with the experimental data and the Hugoniot curve. The piston hit the sample from one side of the simulation box, at speeds ranging from 1.2 to 1.3 times the speed of sound in solid argon at the chosen density. Some thermodynamics properties such as density, temperature and pressure are measured during propagation of shockwave. It is found that those thermodynamics properties (density, temperature and pressure) remarkably and significantly increase when the shockwave passed through the solid. We also show that creating initial strain in the solid up to 6.5% can enhance the pressure increment in the solid up to 9%. The results can be useful in enhancing the shockwave power by giving a detailed microscopic description of the process.

1- مقدمه

دارای قابلیت هایی هستند که تقریب های عددی در مقیاس ماکروسکوپی قادر به انجام آن نیستند. در این روش ها برای تحلیل عبور موج شوک به معادلات حالت نیاز هست. این معادلات حالت معمولاً از انجام آزمایشات تجربی با هزینه های زیاد حاصل می شوند. برای نمونه نلیس و همکاران با استفاده از تفنگ گازی با ایجاد سرعت هایی در محدوده 4-8 km/s معادلات حالت هوگونیت را در جامداتی نظیر مس، آلومینیوم و تانتال محاسبه کردند [3]. شبیه سازی های مقیاس اتمی می توانند بدون صرف هزینه های زیاد، معادلات حالت را با تقریب خوبی پیش بینی کنند. به عنوان مثال، برینگا و

پدیده عبور موج شوک در جامدات و کاربردهای آن دارای تاریخچه ای طولانی است [1-3]. موج شوک برای درک رفتار مواد در حالتی که کاملاً از وضعیت تعادل خود دور شده اند اهمیت خاصی دارد، چرا که موج شوک دو وضعیت متفاوت در جامد که همان وضعیت قبل و پس از عبور شوک می باشد را به همدیگر متصل می کند. در دو دهه گذشته شبیه سازی های مقیاس اتمی برای فهمیدن فیزیک حاکم و کمک به تفسیر آزمایشات تجربی مشاهده شده در موج شوک به طور گسترده ای استفاده شده اند. شبیه سازی های مقیاس اتمی

Please cite this article using:

F. Sotoudeh, A. Rajabpour, M. Khanaki, Shock wave propagation in the solid argon by molecular dynamics simulation: Effect of initial strain, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 3, pp. 364-370, 2016 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

روی واکنش شیمیایی برای فرآیند انفجار یک کریستال مولکولی پرداختند و پارامترهای همچون سرعت انتشار، ساختار موج انفجار، تأخیر زمانی در وقوع واکنش شیمیایی و مشخصه‌های انرژی کریستال در ناحیه‌ی تخریب‌شده را مشاهده کردند و داده‌های به دست آمده از دینامیک مولکولی را با معادلات بقا مقایسه کردند [21].

یکی از پارامترهایی که می‌تواند بر عبور موج شوک در جامد تأثیر قابل توجهی بگذارد، میزان کرنش یا تنش اولیه است که قادر است فشار موج شوک را افزایش دهد و تاکنون مورد مطالعه قرار نگرفته است. در این پژوهش، عبور موج شوک از یک جامد دارای کرنش اولیه به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده‌است. برای سادگی شبیه‌سازی و دوری از محاسبات سنگین و زمان‌بر، از یک جامد تک بلوری استفاده شده‌است تا با یک ساده‌سازی، فیزیک مسئله بهتر درک گردد. یکی از جامدات تک بلوری ساده که معمولاً در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی استفاده می‌شود جامد آرگون است که به عنوان یک جامد عمومی شناخته می‌شود که بسیاری از ویژگی‌های آن هم از لحاظ تجربی و هم تئوری مورد مطالعه قرار گرفته است [23,22]. برای این منظور از یک کد دینامیک مولکولی استفاده می‌شود که در گام اول این نوشتار روش محاسباتی، روابط حاکم توصیف شده‌است. در گام دوم رابطه بین سرعت موج شوک و سرعت تحمیل شده به پیستون (که سرعت پیستون به عنوان نیروی محرکه این پدیده می‌باشد) محاسبه می‌گردد. به منظور تعیین اعتبار کد شبیه‌سازی، نتایج حاصل شده از کد دینامیک مولکولی، با نتایج تجربی مقایسه شده‌اند. نتایج در تطابق خوبی با نتایج تجربی می‌باشد. در نهایت تأثیر انتشار موج شوک روی ماده نشان داده‌شده و همچنین تأثیر کرنش اولیه بر روی ماده بررسی شده‌است.

2- جزئیات شبیه‌سازی

شبیه‌سازی در یک جعبه به ابعاد $L_x = L_y = 63.6\text{\AA}$ و $L_z = 477\text{\AA}$ با 51840 اتم با شبکه بلوری FCC با ثابت شبکه $a = 5.3\text{\AA}$ و جرم مخصوص $\rho_0 = 1.7823 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ و دمای 5K انجام شده‌است. انتخاب این ثابت شبکه به منظور صفر شدن فشار اولیه موجود در نمونه می‌باشد. لازم به ذکر است با انتخاب مقادیر متفاوت تعداد اتم‌ها و ابعاد جعبه، نتایج یکسانی از شبیه‌سازی به دست می‌آید. کلیه شبیه‌سازی‌ها در این تحقیق با بسته نرم‌افزاری لمپس² انجام شده‌است. لمپس یک بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی است که در آزمایشگاه ملی ساندا ایجاد و توسعه داده شده‌است. این بسته نرم‌افزاری آزاد و متن باز است و با مجوز GPL در دسترس عموم قرار دارد [24]. لازم به ذکر است که خروجی نرم افزار تنها داده‌های عددی هست و برای پس‌پردازش داده‌ها کدهای عددی جداگانه ای نوشته شده‌است.

2-1- معادلات حاکم

معادلات حاکم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، قوانین حرکت کلاسیک هستند. رابطه کلاسیک معادله حرکت با استفاده از الگوریتم‌های مختلفی در زمان انتگرال‌گیری می‌شود. یکی از پر کاربردترین این الگوریتم‌ها الگوریتم سرعت ولت است که در آن سرعت و موقعیت هر ذره به صورت روابط (1) تا (3) محاسبه می‌شود [25]:

$$r_i(t + dt) = r_i(t) + v_i(t)dt + \frac{1}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} dt^2 \quad (1)$$

$$v_i\left(t + \frac{dt}{2}\right) = v_i(t) + \frac{dt}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (2)$$

همکاران به کمک شبیه‌سازی مقیاس اتمی توانستند معادله حالت جامد مس را در تقریب خوبی با نتایج تجربی پیش‌بینی کنند [4]. در روش‌های ماکروسکوپی بررسی تأثیر حفره‌هایی با مقیاس نانو در افزایش قدرت موج شوک توسط روش‌های ماکروسکوپی امکان‌پذیر نیست [5,4]. همچنین در روش‌های ماکروسکوپی جزئیات فیزیک انتشار موج در جسم قابل‌مشاهده نیست. هرچند از معایب روش شبیه‌سازی در مقیاس اتمی محدودیت محاسباتی برای شبیه‌سازی فرآیندهایی با مدت زمان فراتر از مقیاس نانو ثانیه است.

یکی از ابزارهای قدرتمند و محبوب شبیه‌سازی در مقیاس اتمی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته‌شده فیزیک باهم برهمکنش کنند و بر اساس الگوریتم حل معادله نیوتن، چشم‌اندازی از حرکت اتم‌ها بدهند. روش دینامیک مولکولی یک روش واسط بین روش‌های تجربی-آزمایشگاهی و تحلیلی است و می‌توان آن را به عنوان یک آزمایشگاه مجازی در نظر گرفت. دینامیک مولکولی روابط بین ساختار مولکول‌ها، حرکت مولکول‌ها و توابع مولکولی را بررسی می‌کند. امروزه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان ابزاری کارآمد جهت آشنایی هر چه بیشتر با پدیده‌های فیزیکی در مقیاس مولکولی رو به رشد می‌باشد [6].

با توسعه‌ی نرم‌افزارها و امکانات کامپیوتری، در زمینه‌ی دینامیک مولکولی کارهای قابل‌توجهی در زمینه شبیه‌سازی شوک توسط محققان در دو دهه‌ی گذشته صورت گرفته‌است [7-9]. معمولاً برای مدل‌سازی انتشار موج شوک که پس از آن پدیده‌های همچون انتقال فاز [10-14]، شکست [15] و تشکیل ناهنجاری‌ها [16,17] رخ می‌دهد، روش دینامیک مولکولی به کار گرفته می‌شود. تلاش‌های اولیه، بر روی موادی با کاربردهای زیاد مثل آهن متمرکز شده بود. در سال 1979، هولیان و استراب [18] با استفاده از تابع پتانسیل لنارد جونز شبیه‌سازی سه بعدی دینامیک مولکولی را بر روی کریستال FCC بی‌نقص آهن انجام دادند. آن‌ها تلاش کردند که روند شکل‌گیری و انتقال موج شوک را نشان دهند. نتایج آن‌ها پایداری موج شوک را که تأییدکننده شرایط رنگین-هونگونی¹ بود نشان داد. در سال 1980 مقایسه‌ای بین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی با توصیف مکانیک محیط‌های پیوسته‌ی ناویر-استوکس از موج شوک توسط هولیان و همکاران انجام شد [19]. دو دهه پس از آغاز به‌کارگیری دینامیک مولکولی در شبیه‌سازی انتشار موج شوک، تلاش‌های برای مدل‌سازی تغییر شکل پلاستیک ناشی از موج شوک انجام شد. در سال 1998، هولیان و لامدال از دینامیک مولکولی مقیاس بزرگ برای نشان دادن اینکه فلزات FCC در طول صفحات در هر موقعیت پشت جبهه‌ی شوک می‌لغزند استفاده کردند [20].

هولیان و همکاران بررسی برخورد موج شوک با حفره‌های میکروسکوپی که به موجب آن حرارت قابل‌توجهی برای فراهم نمودن مقدار مناسب انرژی حرارتی برای آغازگری واکنش‌های شیمیایی در مواد منفجره‌ی جامد یا فاز انتقال (گذار) در فلزات می‌گردد را پیشنهاد کردند. آن‌ها وابستگی دو پارامتر قدرت شوک و عرض شکاف را در یک جامد غیرفعال دوبعدی لنارد-جونز بررسی کردند و پرس دمایی به دست آمده از این روش را با یک مدل ساده مقایسه کردند [5].

فومن و همکاران با روش دینامیک مولکولی به بررسی نفوذ اثر حرارتی

2- LAMMPS

1- Rankine-Hugoniot

ذرات در هر لحظه، کمیت‌های ترمودینامیکی مورد نیاز شامل چگالی، دما و فشار محاسبه می‌گردند.

برای محاسبه چگالی جعبه شبیه‌سازی را به تعداد 25 سلول محاسباتی تقسیم و چگالی به صورت شمارش تعداد ذرات در هر سلول محاسباتی در گام‌های پی در پی و تقسیم عدد به دست آمده بر حجم سلول محاسباتی انجام می‌گیرد. بدین ترتیب میانگین‌گیری در زمان صورت می‌پذیرد. در نهایت با توجه به وجود تنها یک نوع ذره در شبیه‌سازی‌ها جرم هر ذره را می‌توان در کمیت محاسبه‌شده ضرب نمود تا مقدار چگالی جرمی نیز محاسبه گردد.

در محاسبه دما از رابطه انرژی جنبشی با دما استفاده می‌شود:

$$T = \frac{1}{3NK} \sum_{i=0}^N |v_i|^2 \quad (9)$$

که در آن N تعداد ذرات و v_i سرعت ذره i در سلول شبیه‌سازی است. کمیت K نیز معرف ثابت بولتزمن است. رابطه (9) در حالتی که ذرات دارای حرکت صلب باشند به پاسخ نادرست می‌انجامد به همین دلیل باید در هر سلول محاسباتی مقدار سرعت کل جریان در سلول محاسبه گردد و از سرعت ذره کم شود.

برای محاسبه فشار ترم های تانسور تنش به دست آمده در سه راستای x ، y و z با یکدیگر جمع شده، کمیت ناوردای اول به دست می‌آید. مقدار فشار هیدرواستاتیک از تقسیم این مقدار بر عدد 3 بدست می‌آید:

$$P = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (10)$$

محاسبه تنش در بررسی‌های اتمی با استفاده از تعریف ویریا² انجام می‌گیرد [24].

$$\sigma = \frac{1}{2V} \left(\sum_{i,j \neq i}^N \langle r_{ij} \times f_{ij} \rangle \right) \quad (11)$$

2-3- انتشار موج شوک

ابتدا نمونه‌ی مورد نظر برای 100000 گام زمانی در هنگرد³ NPT (دما و فشار ثابت) با فشار صفر در دمای 5K به تعادل رسانده می‌شود که هر گام زمانی یک فمتوثانیه هست ($\Delta t = 1\text{fs}$). لازم به توضیح است به مجموعه‌ای از میکروحوالت‌ها با خواص ماکروسکوپی مشخص هنگرد گفته می‌شود. الگوریتم مورد استفاده در هنگرد فوق برای تنظیم فشار و دما، ترموستات⁴ (تنظیم کننده دما) و باروستات⁵ (تنظیم کننده فشار) نوز-هوفر است. در این ترموستات و باروستات متغیرهایی دینامیکی به سرعت ذرات برای تنظیم دما و به ابعاد جعبه شبیه‌سازی برای تنظیم فشار افزوده می‌گردند [24]. بعد از تنظیم دما و فشار هنگرد NPT غیرفعال شده و در هنگرد NVE (حجم و انرژی ثابت) به حل معادلات حرکت پرداخته می‌شود.

شرایط مرزی به این نحو است که به منظور ایجاد موج شوک در نمونه، یک پیستون شامل سه لایه اتمی شامل 1014 اتم از ذرات نمونه در راستای z در یک طرف نمونه در نظر گرفته می‌شود و در انتهای دیگر جعبه سه لایه دیگر نقش دیواره ثابت را ایفا می‌کند. همچنین در دو راستای x و y شرایط مرزی دوره‌ای هستند. موج شوک توسط اعمال ناگهانی یک سرعت ثابت به پیستون برای مدت فقط 4000 گام زمانی (4ps) تولید می‌شود. لازم به ذکر است که موج شوک با حرکت پیستون در یک انتهای نمونه ایجاد می‌گردد. در این روش جبهه‌ی موج شوک از یک انتها به انتهای دیگر نمونه پیشروی

$$v_i(t + dt) = v_i \left(t + \frac{dt}{2} \right) + \frac{dt}{2} \frac{F_i(t + dt)}{m_i} \quad (3)$$

روابط (1) تا (3) v_i ، r_i و F_i و m_i به ترتیب موقعیت، سرعت، نیرو و جرم ذره i اند که به کمک آن‌ها دینامیک سیستم در زمان $t + dt$ به دست می‌آید. برای این منظور موقعیت، سرعت و شتاب اولیه مشخص به سیستم داده شود و نیروی وارد بر ذرات در زمان $t + dt$ با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل حاصل می‌شود [25]:

$$F_i = \frac{-\partial \sum_{i < j} \varphi(r)}{\partial r_i} \quad (4)$$

که در رابطه (4) r فاصله میان دو اتم با اندیس i و j است و φ تابع پتانسیل حاکم بر ذرات است که در اینجا از تابع پتانسیل باکینگهام استفاده می‌گردد. تابع پتانسیل باکینگهام از نوع پتانسیل‌های جفت-جفت¹ می‌باشد که اتم‌های برهم‌کنش کننده با زمان تغییر می‌کنند [22]:

$$\varphi(r) = D_1 e^{-\frac{r}{r_0}} - \frac{D_2}{r^6} \quad (5)$$

که در آن ثابت‌های r_0 ، D_1 و D_2 مقادیر (6) تا (8) هستند:

$$D_1 = 6127.097 \text{ eV} \quad (6)$$

$$D_2 = 61.5497 \text{ eV}\text{\AA}^6 \quad (7)$$

$$r_0 = 0.285 \text{ \AA} \quad (8)$$

دو جمله‌ی مثبت و منفی سمت راست معادله (5) به ترتیب متعلق به انرژی‌های جذب و دفع می‌باشند. نمودار این تابع پتانسیل در شکل 1 نشان داده شده‌است. همچنین تابع پتانسیل لنارد-جونز (LJ) نیز برای مقایسه در کنار تابع پتانسیل باکینگهام نشان داده شده‌است. این دو تابع در فواصل طولانی بین اتمی تا رسیدن به شعاع قطع، رفتاری مشابه دارند اما تابع پتانسیل لنارد-جونز با نزدیک شدن فواصل دو اتم به یکدیگر شدیداً افزایش می‌یابد. این مسئله منجر به بروز ناپایداری حل در مسائل مدل‌سازی فشرده‌ی سخت مانند موج شوک می‌شود؛ لذا عموماً در چنین کاربردهایی بهتر است تا از تابع پتانسیل باکینگهام استفاده کرد. این تابع پتانسیل برای عناصر تک اتمی در شرایط بحرانی توسعه یافته شده‌است [26,22]. تابع پتانسیل باکینگهام برای جامدهای گاز نجیب در دیگر شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به کار رفته است [27,7].

2-2- محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی

بعد از انتگرال‌گیری معادلات حرکت و بدست آوردن موقعیت مکانی و سرعت

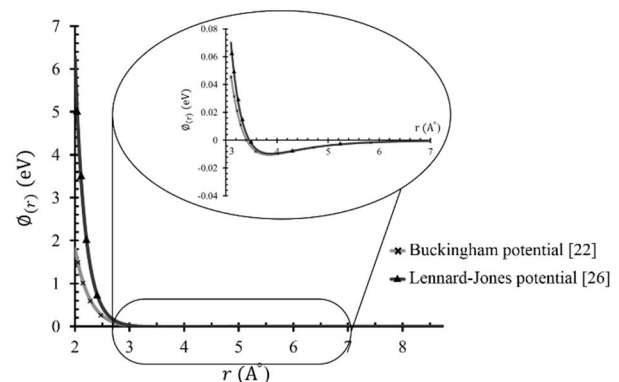


Fig. 1 Potential function behavior versus interatomic distance for Buckingham and Lennard-Jones potential functions [22,26]

شکل 1 رفتار تابع پتانسیل بر حسب فاصله بین اتمی برای دو تابع پتانسیل باکینگهام و لنارد-جونز [26, 22]

2- Virial
3- Ensemble
4- Thermostat
5- Barostat

1- Pairwise potentials

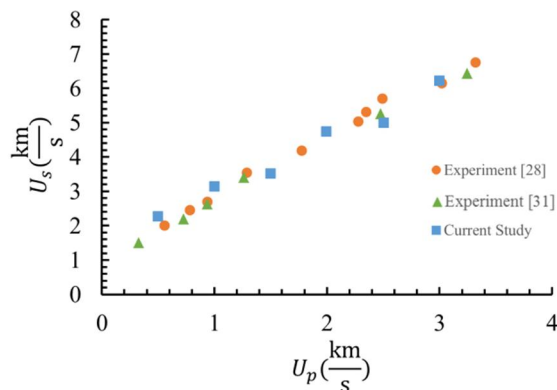


Fig. 3 Shockwave velocity (U_s) versus piston velocity (U_p)

شکل 3 سرعت موج شوک (U_s) بر حسب سرعت پیستون (U_p)

مخصوص و انرژی درونی هستند که اندیس 0 نمایانگر خواص قبل از عبور موج شوک می باشد [29].

این منحنی برای ساختن معادله حالت ماده به کار می رود. در یک رژیم قوی شوک معمولا رابطه ی (15) برقرار است:

$$U_s = c + S U_p \quad (15)$$

که c و S ثابت هستند. تئوری مکانیک محیط پیوسته پیش بینی می کند که در محدوده ی سرعت های بسیار کوچک پیستون، سرعت موج باید به سرعت صوت در ماده شوک نزده برسد [30]. بنابراین در رابطه ی (15) ثابت c بیان گر سرعت صوت می باشد. همچنین پارامتر S یک ثابت در محدوده ی 0.5 تا 2.5 می باشد. برای بدست آوردن سرعت صوت در جامد آرگون می توان از رابطه خطی میان سرعت موج شوک و سرعت پیستون بهره برد (شکل 4) که با یافتن عرض از مبدا (محل برخورد منحنی برون یابی شده با محور افقی) آن می توان سرعت صوت در جامد آرگون را بدست آورد.

اگر تبدیل فاز رخ دهد شیب منحنی $U_s - U_p$ تغییر می کند که می تواند برای تشخیص پدیده تغییر فاز به کار رود. فرآیند تشکیل موج شوک و تغییرات خواص مکانیکی و ترمودینامیکی پس از جبهه ی شوک بررسی گردیده است که نتایج در بخش بعد ارائه شده است.

3- نتایج

3-1- نمونه بدون کرنش اولیه

در این قسمت، با توجه به انتشار موج شوک در نمونه، تغییرات جرم مخصوص،

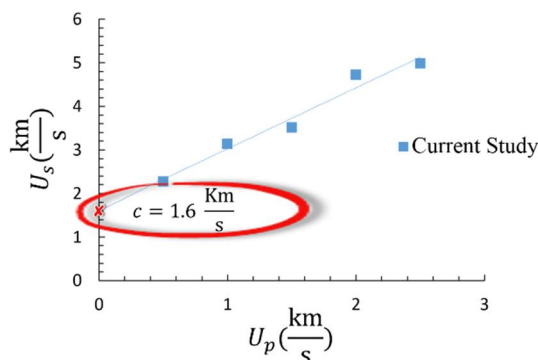


Fig. 4 Linear relationship between shockwave velocity and piston velocity (y-intercept shows the sound velocity in solid)

شکل 4 رابطه خطی میان سرعت موج شوک و سرعت پیستون (عرض از مبدا نمایانگر سرعت صوت در جامد است)

می کند. با در نظر گرفتن سرعت پیستون به مقدار $U_p = 0.5 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ مشاهده می گردد که یک موج شوک با سرعت ماکزیمم $U_s = 2.27 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ در نمونه ایجاد می گردد. البته به علت اینکه پیستون بعد از مدت 4ps متوقف می شود، سرعت جبهه ی موج شوک در طی زمان کاهش پیدا می کند (سرعت صوت در جامد آرگون تقریبا برابر $1.5 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ است) و از یک موج شوک، تبدیل به یک موج صوتی خواهد شد. روند پیشرفت جبهه موج شوک را می توان در شکل 2 مشاهده کرد. به تفاوت جرم مخصوص بین جبهه ی موج شوک و قسمتی که هنوز موج به آن نرسیده توجه کنید.

برای ارزیابی صحت عملکرد شبیه سازی، مدل با چند سرعت متفاوت پیستون اجرا گردیده است که نتایج تطبیق خوبی را با داده های تجربی منحنی هوگنیت نشان می دهد. این نتایج در شکل 3 ارائه شده اند [31,28]. منحنی هوگنیت رابطه ی بین حالت دو طرف موج شوک را بیان می کند و به عنوان معادلات کمکی با ترکیب معادلات بقای جرم، ممنتوم و انرژی (به ترتیب معادلات (12) تا (14))، خواص ترمودینامیکی بعد از عبور موج شوک را بر حسب خواص قبل از عبور موج را به دست می آورد [29].

$$V = V_0 \left(1 - \frac{U_p}{U_s}\right) \quad (12)$$

$$P = P_0 + \rho_0 U_p U_s \quad (13)$$

$$E = \frac{1}{2} (P - P_0) (V_0 - V) \quad (14)$$

در معادلات (12) تا (14) ρ ، P ، V به ترتیب حجم، فشار، جرم

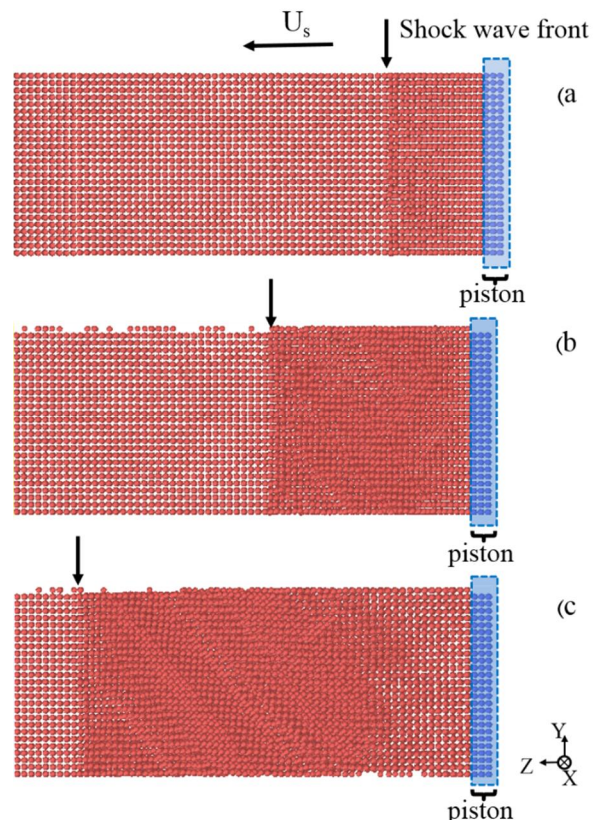


Fig. 2 Snapshots of shockwave propagation (after piston hit) from one side to other side at three different times. a) at time 2ps b) at time 4ps (stop time of piston) c) at time 7ps

شکل 2 تصاویر عبور موج شوک (بعد از ضربه پیستون) از یک طرف نمونه به انتهای دیگر در سه زمان مختلف. a) در زمان 2ps. b) در زمان 4ps (زمان متوقف شدن پیستون). c) در زمان 7ps

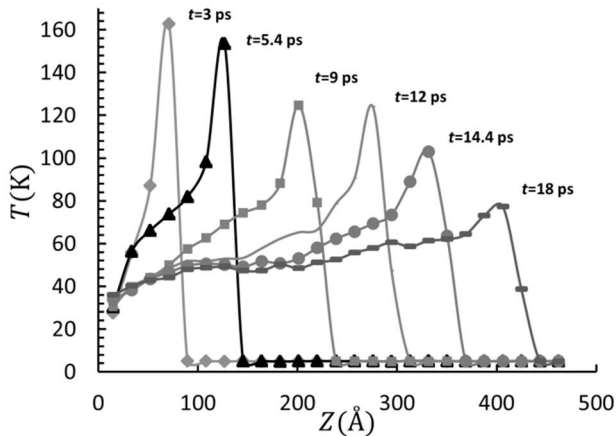


Fig. 6 Temperature profile along z direction at different times

شکل 6 توزیع دما در راستای z در زمان های مختلف

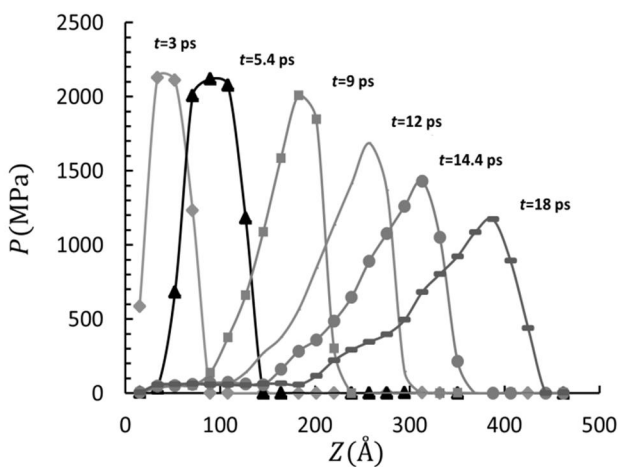


Fig. 7 Pressure profile along z direction at different times

شکل 7 توزیع فشار در راستای z در زمان های مختلف

تغییر طول نمونه و جابجایی موقعیت اتم ها در راستای z قرار می دهیم تا در جسم تنش اولیه ای ایجاد گردد. سپس با عبور موج شوک در نمونه منحنی فشار را محاسبه و مقدار ماکزیمم فشار در هر لحظه اندازه گرفته می شود.

شکل 9 فشار ماکزیمم را بر حسب پیشرفت موج شوک در نمونه نشان می دهد. هر نقطه از این شکل مربوط به یک زمان مشخص عبور شوک از نمونه است. همانگونه که مشاهده می شود وقتی کرنش اولیه در نمونه اولیه افزایش پیدا می کند میزان فشار ماکزیمم هم افزایش پیدا کرده است. همان طور که مشاهده می شود با افزایش کرنش اولیه در نمونه و بالتبع افزایش تنش اولیه، میزان فشار ماکزیمم ایجاد شده در نمونه توسط موج شوک، افزایش یافته است. علت این افزایش می تواند به علت متراکم شدن نمونه تحت تأثیر کرنش اولیه باشد. در حقیقت با متراکم کردن نمونه همانطور که از تابع پتانسیل در شکل 1 مشخص است نیروهای بین اتمی افزایش می یابد. برای نمونه هنگامیکه جسم قبل از اعمال کرنش دارای ثابت شبکه 5.3\AA هست، پس از اعمال کرنش 6.44% می توان فرض کرد تا فاصله ثابت شبکه به میزان 5\AA کاهش یافته باشد. در این صورت همانطور که در شکل 1 مشخص است شیب تابع پتانسیل افزایش می یابد. می توان با یک محاسبه ساده به کمک مشتق رابطه (5) نشان داد که میزان شیب تابع پتانسیل (نیروی بین اتمی) با این فاصله جدید، بیش از 40% افزایش می یابد. هنگام

دما و فشار برای ماده ای که هنوز تحت تنش پسماند قرار نگرفته است ارائه می شوند. شکل 5 تغییرات جرم مخصوص به جرم مخصوص اولیه $(\frac{\rho}{\rho_0})$ را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود مقدار جرم مخصوص ابتدا افزایش پیدا می کند به طوری که تقریباً 1.3 برابر مقدار اولیه خود $(\rho_0 = 1.7823 \frac{g}{cm^3})$ می رسد. شکل 5 تغییرات عرض جبهه ای موج شوک و هم پیشروی موج شوک را در نمونه نشان می دهد. قابل توجه است که چون در مواجهه با موج مافوق صوت هستیم، چگالی در جلوی موج شوک تحت تأثیر قرار نمی گیرد. از طرفی چون انرژی موج شوک در حال کاهش است، مقدار بیشینه در حال کاهش و عرض آن در حال گسترش است. حدوداً در فاصله 150\AA مقدار نسبت چگالی از مقدار یک کمتر شده است که به علت انتشار موج رو به عقب¹ است که باعث زوال قدرت موج شوک با گذشت زمان می شود و در نهایت آن را تبدیل به یک موج صوتی می کند.

شکل 6 تغییرات دما را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می دهد، همانطور که مشاهده می شود مقدار دما در نمونه از 5K با عبور موج شوک افزایش یافته و به مقدار بیشینه $T_{max} = 160\text{K}$ می رسد. این مقدار بیشینه با پیشروی موج به تدریج کاهش می یابد که علت آن همانطور که ذکر گردید به دلیل کاهش قدرت موج و انتشار موج عقب رو است. همچنین مقدار دما در پس از عبور شوک در ماده به محدوده دمایی 50 تا 70 کلوین رسیده است.

شکل 7 تغییرات فشار را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می دهد. همانطور که مشخص است موج شوک باعث رسیدن پیک فشار به مقدار 2126 MPa در نمونه می شود. این بیشینه، همانند آنچه برای دما مشاهده شد، با پیشروی موج شوک کاهش می یابد با این تفاوت که مقدار فشار پس از عبور شوک بر خلاف نمودار دما کاهش قابل ملاحظه ای می یابد که به دلیل ایجاد فضای باز ناگهانی، در پشت شوک است. همچنین مشاهده می گردد که منحنی فشار در زمان 14.4 ps در انتهای نمونه عریض شده و رفته رفته از یک موج شوک به یک موج صوتی در حال تبدیل است.

3-2- نمونه ای تحت تأثیر کرنش اولیه

همانطور که در مقدمه اشاره شد، در کاربردهای واقعی افزایش بیشینه فشار حاصل شده از موج شوک امری مطلوب است [32]. بدین منظور همانطور که در شکل 8 نشان داده شده است ابتدا نمونه را تحت کرنش اولیه معینی (با

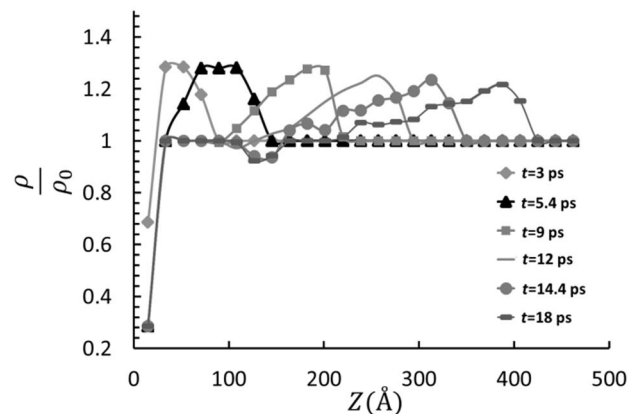


Fig. 5 Density profile along z direction at different times

شکل 5 توزیع چگالی در امتداد راستای z در زمان های مختلف

1- Rarefaction wave

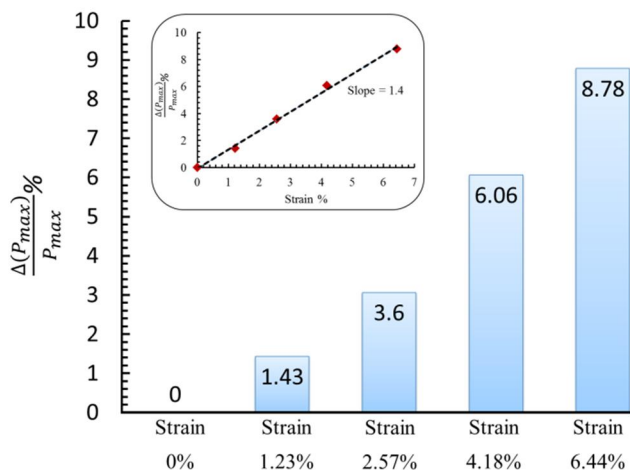


Fig. 10 Maximum pressure increment percentage versus initial strain compared to zero initial strain

شکل 10 درصد افزایش فشار ماکزیمم بر حسب کرنش ایجاد شده در نمونه نسبت به حالت کرنش اولیه صفر

جامد بلوری در لحظات مختلف محاسبه گردید. همچنین نشان داده شد که با ایجاد کرنش اولیه در جسم به میزان 6.5%، می توان میزان افزایش فشار در هنگام عبور موج شوک را به میزان 9% افزایش داد. رابطه خطی بدست آمده میان درصد افزایش نسبی فشار ماکزیمم بر حسب درصد کرنش اولیه و شیب گزارش شده تغییرات آن، می تواند در کاربردهای مختلف موج شوک به صورت تجربی استفاده شود.

5- مراجع

- [1] W. J. Nellis, J. A. Moriarty, A. C. Mitchell, M. Ross, R. G. Dandrea, N. W. Ashcroft, N. C. Holmes, G. R. Gathers, Metals physics at ultrahigh pressure: Aluminum, copper, and lead as prototypes, *Physical Review Letter*, Vol. 60, No. 14, pp. 1414-1417, 1988.
- [2] A. C. Mitchell, W. J. Nellis, J. A. Moriarty, R. A. Heinle, N. C. Holmes, R. E. Tipton, G. W. Repp, Equation of state of Al, Cu, Mo, and Pb at shock pressures up to 2.4 TPa (24 Mbar), *Journal of Applied Physics*, Vol. 69, No. 5, pp. 2981-2986, 1991.
- [3] W. J. Nellis, A. C. Mitchell, D. A. Young, Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar), *Journal of Applied Physics*, Vol. 93, No. 1, pp. 304-310, 2003.
- [4] E. M. Bringa, J. U. Cazamias, P. Erhart, J. Stolken, N. Tanushev, B. D. Wirth, R. E. Rudd, M. J. Caturla, Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper, *Journal of Applied Physics*, Vol. 96, No. 7, pp. 3793-3799, 2004.
- [5] B. L. Holian, T. C. Germann, J. B. Maillet, C. T. White, B. M. Cetegen, Atomistic mechanism for hot spot initiation, *Physical Review Letters*, Vol. 89, No. 28, pp. 285501-4, 2002.
- [6] D. C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, pp. 3.1-3.30, Cambridge: Cambridge University Press., 2004.
- [7] C. Loyola, S. Davis, J. Peralta, G. Gutierrez, Onset of failure in argon by the effect of a shock wave: A molecular dynamics study, *Computational Material Science*, Vol. 49, No. 3, pp. 582-587, 2010.
- [8] Q. An, S. V. Zybin, W. A. Goddard, A. Jaramillo-Botero, M. Blanco, Sh.N. Luo, Elucidation of the dynamics for hot-spot initiation at nonuniform interfaces of highly shocked materials, *Physical Review B*, Vol. 84, No. 22, pp. 220101-4, 2011.
- [9] T. C. Germann, B. L. Holian, P. S. Lomdahl, Molecular dynamics simulations of detonation in defective explosive crystals, in *12th International Detonation*, California, U.S.A., August 11 - 16, 2002.
- [10] K. Kadau, T.C. Germann, P.S. Lomdahl, B.L. Holian, Microscopic view of structural phase transitions induced by shock waves, *Science*, Vol. 296, No. 5573, pp. 1681-1684, 2002.
- [11] K. Kadau, P.S. Lomdahl, B.L. Holian, Atomistic simulations of shock induced transformations and their orientation dependence in bcc Fe single crystals, *Physical Review B*, Vol. 72, No. 6, pp. 064120-25, 2005.
- [12] K. Kadau, T.C. Germann, P.S. Lomdahl, B.L. Holian, Atomistic simulations of shock induced melting in Fe, *Proceeding of American Institute of Physics Conference*, Baltimore, U.S.A. June 12-16, 2006.
- [13] Z.L. Liu, J.H. Yang, Z.G. Zhao, L.C. Cai, F.Q. Jing, The anisotropy of shock induced melting of Pt observed in molecular dynamics simulations, *Physics Letter A*, Vol. 374, No. 13, pp. 1579-1584, 2010.

عبور موج شوک این نیروها طبق رابطه ویرال (رابطه 11)) باعث افزایش بیشتر فشار در نمونه می شوند.

این میزان افزایش در شکل 10 به صورت درصد نسبت تغییرات فشار ماکزیمم بر حسب میزان کرنش ایجاد شده در نمونه است. همچنین در شکل 10، شیب رابطه میزان درصد افزایش نسبی فشار ماکزیمم بر حسب درصد کرنش اولیه گزارش گردیده است که بیانگر رابطه خطی میان این دو کمیت است. همچنین مینم مشاهده شده در شکل 9 به علت ناحیه کم فشار موضعی ایجاد شده در پشت پیستون است.

4- نتیجه گیری

در این مقاله به بررسی عبور موج شوک در یک جامد بلوری به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی پرداخته شد که یک پیستون شبیه یک تحریک کننده¹ در آزمایش تجربی شبیه سازی گردید. چندین اجرا با سرعت پیستون مختلف اجرا گردید و سرعت های موج شوک ایجاد شده در نمونه ثبت گردید. نتایج حاصل از این شبیه سازی با نتایج بدست آمده از تجربه در تطابق خوبی هستند و در نهایت منحنی هوگونیت جامد آرگون تحت یک شوک ایده آل بدست آمد. موج شوک عبور کرده از نمونه باعث ایجاد تغییراتی در خواص ترمودینامیک و مکانیکی نمونه می گردد که این تغییرات در لحظات مختلف به تصویر کشیده شده است. میزان افزایش فشار در هنگام عبور موج شوک در

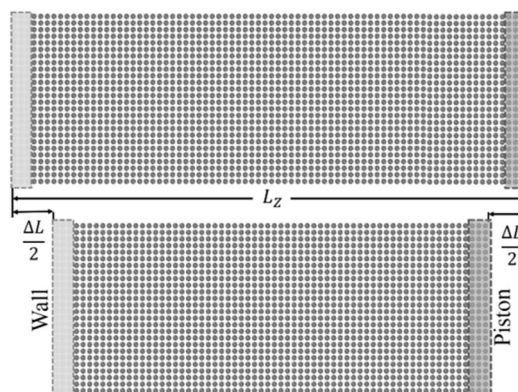


Fig. 8 Force applying direction for creating initial strain

شکل 8 راستای اعمال نیرو برای ایجاد کرنش اولیه در نمونه

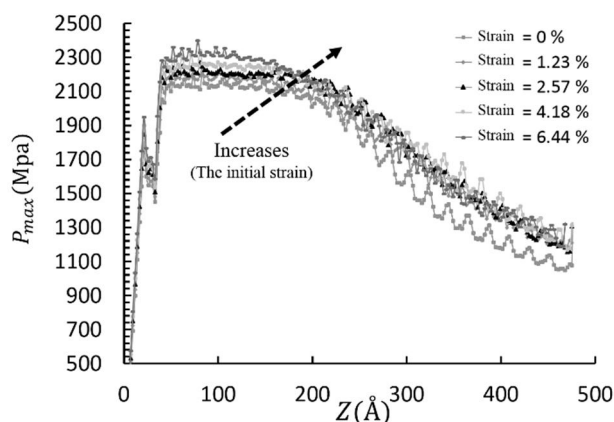


Fig. 9 Maximum pressure profile versus four initial strains in the solid

شکل 9 نمودار فشار ماکزیمم بر حسب چهار کرنش اولیه ایجاد شده در نمونه

1- the propeller

- [22] M. Ross, H.K. Mao, P.M. Bell, J.A. Xu, The equation of state of dense argon: A comparison of shock and static studies, *Journal Chemical Physics*, Vol. 85, No.2, pp. 1028-1033, 1986.
- [23] I.N. Makarenko, A.M. Nikolaenko, V.A. Ivanov, S.M. Stishov, Equation of state of alkali metals: Sodium, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, Vol. 42, No. 5, pp. 875-879, 1975.
- [24] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.
- [25] J.M. Haile, *Molecular dynamics simulation: Elementary methods*, pp. 2.20-2.50, New York: Wiley, 1992.
- [26] L.A. Rowley, D Nicholson, N.G Parsonage, Monte Carlo grand canonical ensemble calculation in a gas-liquid transition region for 12-6 Argon, *Journal of Computational Physics*, Vol. 17, No. 4, pp. 401-414, 1975.
- [27] L. S. Dubrovinsky, A.B. Belonoshko, Shock wave-induced melting in argon by atomistic simulation, *Science*, Vol. 278, No. 5342, pp. 1474-1476, 1997.
- [28] M. Ross, Shock compression and the melting curve for argon, *Physical Review A*, Vol. 8, No. 3, pp. 1466-1474, 1973.
- [29] P. W. Cooper, *Explosives Engineering*, pp. 170-200, New York: Wiley, 1996.
- [30] Y. B. Zel'dovich, Y. P. Raizer, *Physics of shock waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena*, pp. 150-200, New York: Wiley, 1967.
- [31] J. H. Carpenter, S. Root, K. R. Cochrane et al, Equation of state of argon: experiments on Z, density functional theory (DFT) simulations, and wide-range model, *Sandia Report*, Vol. 7791, No. 1, pp. 1-56, 2012.
- [32] P. Politzer, J. S. Murray, *Energetic Materials Part 2. Detonation, Combustion*, pp. 71-100, New York: Oxford, 2003.
- [14] M. Mahnamaa, R. Naghdabadi, M. R. Movahhedy, Atomistic investigation of phase transition in solid argon induced by shock wave transmissio, *Phase Transitions: A Multinational Journal*, Vol. 86, No. 8, pp. 838-853, 2013.
- [15] D. Tanguy, M. Mareschal, T.C. Germann, B.L. Holian, P.S. Lomdahl, R. Ravelo, Plasticity induced by a shock wave: Large scale molecular dynamics simulations, *Material Science Engineering A*, Vol. 387-389, No. 15, pp. 262-265, 2004.
- [16] T.C. Germann, D. Tanguy, B.L. Holian, P.S. Lomdahl, M. Mareschal, R. Ravelo, Dislocation structure behind a shock front in fcc perfect crystals: Atomistic simulation results, *Metallic Material Transport A*, Vol. 35, No. 9, pp. 2609-2615, 2004.
- [17] D. Tanguy, M. Mareschal, P.S. Lomdahl, T.C. Germann, B.L. Holian, R. Ravelo, Dislocation nucleation induced by a shockwave in a perfect crystal: Molecular dynamics simulations and elastic calculations, *Physical Review B*, Vol. 68, No. 14, pp. 144111-15, 2003.
- [18] B. L. Holian, G.K. Straub, Molecular-dynamics of shock-waves in 3-dimensional solids-transition from nonsteady to steady waves in perfect crystals and implications for the rankine-hugoniot conditions, *Physical Review Letter*, Vol. 43, No. 21, pp. 1598-1602, 1979.
- [19] B. L. Holian, W.G. Hoover, B. Moran, G.K. Straub, Shock-wave structure via non-equilibrium molecular-dynamics and navier-stokes continuum mechanics, *Physical Review A*, Vol. 22, No. 6, pp. 2798-2808, 1980.
- [20] B. L. Holian, Modeling shock-wave deformation via molecular-dynamics, *Physical Review A*, Vol. 37, No. 7, pp. 2562-2568, 1988.
- [21] V. M. Fomin, I. F. Golovnev, A. V. Utkin, Influence of molecular characteristics of a substance on detonation phenomena, *Shock Waves*, Vol. 15, No. 5, pp. 325-331, 2006.