



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

فرهاد ستوده<sup>۱</sup>، علی رجب پور<sup>۲</sup>، منصور خانکی<sup>۲\*</sup>

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

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

\* قزوین، کد پستی ۱۶۸۱۸۳۴۱۴۹ khanaki@eng.ikiu.ac.ir

### 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 ۵۱۸۴۰ اتم در دمای ۵ کلوین است که انتهایها با پتانسیل دوجسمی با یکدیگر برههمکش 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 هوگوئیت می باشد. پیستون از یک طرف جعبه شبیه سازی با سرعت های از ۱.۲ تا ۱.۳ 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 هنگامی که موج شوک از جامد عبور می کند افزایش می یابند. همچنین نشان داده می شود که ایجاد کرنش اولیه در جامد به اندازه ۶.۵٪ باعث بهبود افزایش فشار ایجاد شده در جسم به اندازه ۹٪ می گردد. نتایج بدست آمده می توانند در بهبود قدرت موج شوک با ارائه توصیفی میکروسکوپی از فرآیند کاربرد داشته باشند.

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دربافت: ۲۵ آذر ۱۳۹۴

پذیرش: ۱۸ بهمن ۱۳۹۴

ارائه در سایت: ۰۷ فروردین ۱۳۹۵

کلید واژگان:

شبیه سازی دینامیک مولکولی

موج شوک

کرنش اولیه

## 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.

دارای قابلیت هایی هستند که تقریب های عددی در مقیاس ماکروسکوپیک قادر به انجام آن نیستند. در این روش ها برای تحلیل عبور موج شوک به معادلات حالت نیاز هست. این معادلات حالت معمولا از انجام آزمایشات تجربی با هزینه های زیاد حاصل می شوند. برای نمونه نیسیس و همکاران با استفاده از تنفس گازی با ایجاد سرعت هایی در محدوده 4-8 km/s ۴۸۰ معادلات حالت هوگوئیوت را در جامداتی نظیر مس، آلومینیوم و تانتال محاسبه کردند [۳]. 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 [۱-۳]. موج شوک برای درک رفتار مواد در حالتی که کاملا 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 هم دیگر 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:

F. Sotoudeh, A. Rajabpour, M. Khanaki, Shock wave propagation in the solid argon by molecular dynamics simulation: Effect of initial strain, *Modares Mechanical Engineering*,

روی واکنش شبیه سازی برای فرآیند انفجار یک کریستال مولکولی پرداختند و پارامترهای همچون سرعت انتشار، ساختار موج انفجار، تأخیر زمانی در وقوع واکنش شبیه سازی و مشخصه های انرژی کریستال در ناحیه تخریب شده را مشاهده کردند و داده های به دست آمده از دینامیک مولکولی را با معادلات بقا مقایسه کردند [21].

یکی از پارامترهایی که می تواند 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 شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. برای سادگی شبیه سازی و دوری از محاسبات سنگین و زمان برا، از یک جامد تک بلوری استفاده شده است تا با یک ساده سازی، فیزیک مسئله بهتر درک گردد. یکی از جامدات تک بلوری ساده که معمولاً در شبیه سازی های دینامیک مولکولی استفاده می شود جامد آرگون است که به عنوان یک جامد عمومی شناخته می شود که بسیاری از ویژگی های آن هم از لحاظ تجربی و هم تئوری مورد مطالعه قرار گرفته است [23,22]. برای این منظور از یک کد دینامیک مولکولی استفاده می شود که در گام اول این نوشتار روش محاسباتی، روابط حاکم توصیف شده است. در گام دوم رابطه بین سرعت موج شوک و سرعت تحمیل شده به پیشون (که سرعت پیشون به عنوان نیروی محرکه این پدیده می باشد) محاسبه می گردد. به منظور تعیین اعتبار کد شبیه سازی، نتایج حاصل شده از کد دینامیک مولکولی، با نتایج تجربی مقایسه شده اند. نتایج در تطابق خوبی با نتایج تجربی می باشد. در نهایت تأثیر انتشار موج شوک روی ماده نشان داده شده و همچنین تأثیر کرنش اولیه بر روی ماده بررسی شده است.

## 2- جزئیات شبیه سازی

شبیه سازی در یک جعبه به ابعاد  $L_x = L_y = 63.6\text{A}^\circ$  و  $L_z = 477\text{A}^\circ$  با 51840 اتم با شبکه بلوری FCC با ثابت شبکه  $a = 5.3\text{A}^\circ$  و جرم مخصوص  $\rho_0 = 1.7823 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$  می شود. انجام شده است. انتخاب این ثابت شبکه به منظور صفر شدن فشار اولیه موجود در نمونه می باشد. لازم به ذکر است با انتخاب مقادیر متفاوت تعداد اتم ها و ابعاد جعبه، نتایج یکسانی از شبیه سازی به دست می آید. کلیه شبیه سازی ها در این تحقیق باسته نرم افزاری لمپس<sup>2</sup> انجام شده است. لمپس یک بسته نرم افزاری دینامیک مولکولی است که در آزمایشگاه ملی ساندیا ایجاد و توسعه داده شده است. این بسته نرم افزاری آزاد و متن باز است و با مجوز GPL در دسترس عموم قرار دارد [24]. لازم به ذکر است که خروجی نرم افزار تنها داده های عددی هست و برای پس اپردازش داده ها کد های عددی جداگانه ای نوشته شده است.

## 2-1- معادلات حاکم

معادلات حاکم در شبیه سازی دینامیک مولکولی، قوانین حرکت کلاسیک هستند. رابطه کلاسیک معادله حرکت با استفاده از الگوریتم های مختلفی در زمان انتگرال گیری می شود. یکی از پر کاربرد ترین این الگوریتم ها الگوریتم سرعت ورلت است که در آن سرعت و موقعیت هر ذره به صورت روابط (1) تا (3) محاسبه می شود [25]:

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

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

همکاران به کمک شبیه سازی مقایس اتمی توانستند معادله حالت جامد مس را در تقریب خوبی با نتایج تجربی پیش بینی کنند [4]. در روش های ماکروسکوپیک بررسی تأثیر حفره هایی با مقایس نانو در افزایش قدرت موج شوک توسط روش های ماکروسکوپیک امکان پذیر نیست [5,4]. همچنین در روش های ماکروسکوپیک جزئیات فیزیک انتشار موج در جسم قابل مشاهده نیست. هرچند از معایب روش شبیه سازی در مقایس اتمی محدودیت محاسباتی برای شبیه سازی فرآیندهایی با مدت زمان فراتر از مقایس نانو ثانیه است.

یکی از ابزارهای قدرتمند و محبوب شبیه سازی در مقایس اتمی شبیه سازی دینامیک مولکولی است. شبیه سازی دینامیک مولکولی شکلی از شبیه سازی کامپیوترا است که در آن اتم ها و مولکول ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهمنکش کنند و بر اساس الگوریتم حل معادله نیوتن، چشم اندازی از حرکت اتم ها بدene. روش دینامیک مولکولی یک روش واسط بین روش های تجربی-آزمایشگاهی و تحلیلی است و می توان آن را به عنوان یک آزمایشگاه مجازی در نظر گرفت. دینامیک مولکولی روابط بین ساختار مولکول ها، حرکت مولکول ها و توابع مولکولی را بررسی می کند. امروزه شبیه سازی دینامیک مولکولی به عنوان ابزاری کارآمد جهت آشنایی هر چه بیشتر با پدیده های فیزیکی در مقایس مولکولی رو به رشد می باشد [6].

با توسعه نرم افزارها و امکانات کامپیوترا، در زمینه دینامیک مولکولی کارهای قابل توجهی در زمینه شبیه سازی شوک توسط محققان در دو دهه گذشته صورت گرفته است [7-9]. معمولاً برای مدل سازی انتشار موج شوک که پس از آن پدیده های همچون انتقال فاز [10-14]، شکست [15] و تشكیل نابه جایی ها [16,17] رخ می دهد، روش دینامیک مولکولی به کار گرفته می شود. تلاش های اولیه، بر روی موادی با کاربردهای زیاد مثل آهن متتمرکز شده بود. در سال 1979، هولیان و استراب [18] با استفاده از تابع پتانسیل لنارد جونز شبیه سازی سه بعدی دینامیک مولکولی را بر روی کریستال FCC بی نقص آهن انجام دادند. آن ها تلاش کردند که روند شکل گیری و انتقال موج شوک را نشان دهند. نتایج آن ها پایداری موج شوک را که تأیید کننده شرایط رنکین-هوگونیت<sup>1</sup> بود نشان داد. در سال 1980 ماقایسه های بین شبیه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی با توصیف مکانیک محیط های پیوسته ناویر-استوکس از موج شوک توسط هولیان و همکاران انجام شد [19]. دو دهه پس از آغاز به کار گیری دینامیک مولکولی در شبیه سازی انتشار موج شوک، تلاش های برای مدل سازی تغییر شکل پلاستیک ناشی از موج شوک انجام شد. در سال 1998، هولیان و لاما دل از دینامیک مولکولی مقایس بزرگ برای نشان دادن اینکه فلزات FCC در طول صفحات در هر موقعیت پشت جبهه های شوک می لغزنند استفاده کردند [20].

هولیان و همکاران بررسی برخورد موج شوک با حفره های میکروسکوپی که به موجب آن حرارت قبل توجهی برای فراهم نمودن مقدار مناسب انرژی حرارتی برای آغاز گری و اکتشاف های شبیه سازی در مواد منفجره جامد یا فاز انتقال (گذار) در فلزات می گردد را پیشنهاد کردند. آن ها 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].

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

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

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 بی‌در 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 بولتزمان 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 ناواردی اول به دست می‌آید. مقدار

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

محاسبه تنش در بررسی‌های اتمی با استفاده از تعریف ویریال<sup>2</sup> انجام می‌گیرد [24].

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

## 3-2- انتشار موج شوک

ابتدا نمونه مورد نظر برای 100000 گام زمانی در هنگرد<sup>3</sup> NPT (دما و فشار ثابت) با فشار صفر در دمای 5K به تعادل رسانده می‌شود که هر گام زمانی یک فوتونانیه هست ( $\Delta t = 1\text{ fs}$ ). لازم به توضیح است به مجموعه ای از میکروحالتها با خواص ماکروسکوپی مشخص هنگرد گفته می‌شود. الگوریتم مورد استفاده در هنگرد فوق برای تنظیم فشار و دما، ترموموستات<sup>4</sup> (تنظیم کننده دما) و باروستات<sup>5</sup> (تنظیم کننده فشار) نوز-هوفر است. در این ترموموستات و باروستات متغیرهایی دینامیکی به سرعت ذرات برای تنظیم دما و به ابعاد جعبه شبیه‌سازی برای تنظیم فشار افزوده می‌گردد [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 انتهای دیگر نمونه پیش روی

2- Virial

3- Ensemble

4- Thermostat

5- Barostat

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

روابط (1) تا (3)  $F_i$ ،  $v_i$ ،  $r_i$  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 ازتابع پتانسیل حاصل می‌شود [25]:

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

که در رابطه (4)  $r$  فاصله میان دو اتم با اندیس  $i$  و  $j$  است و  $\varphi$  تابع پتانسیل حاکم بر ذرات است که در اینجا از تابع پتانسیل باگینگهام استفاده می‌گردد. تابع پتانسیل باگینگهام از نوع پتانسیل‌های جفت<sup>1</sup> می‌باشد که اتم‌های برهمنش 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:

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

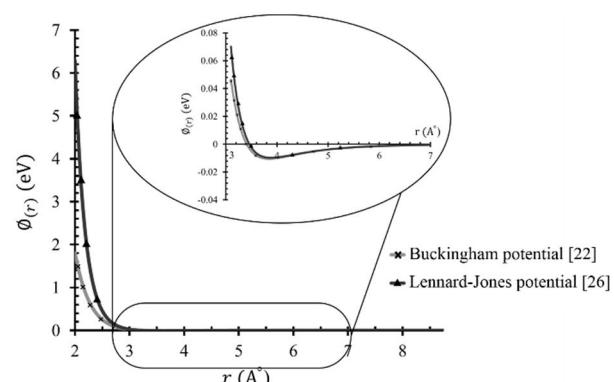
$$D_2 = 61.5497 \text{ eV}\text{\AA}^6 \quad (7)$$

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

دو جمله‌ی مثبت و منفی سمت راست معادله (5) به ترتیب متعلق به اثری‌های 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 باگینگهام نشان داده شده‌است. این دو تابع در فواصل طولانی بین اتمی تا رسیدن به شاع 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 فشرده‌گی سخت مانند انتشار موج شوک می‌شود؛ لذا عموماً در چنین کاربردهایی بهتر است تا از تابع پتانسیل باگینگهام استفاده کرد. این تابع پتانسیل برای عناصر تک اتمی در شرایط بحرانی توسعه یافته شده‌است [26,22]. تابع پتانسیل باگینگهام برای جامدهای گاز نجیب در دیگر شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به کار رفته است [27,7].

## 2- محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی

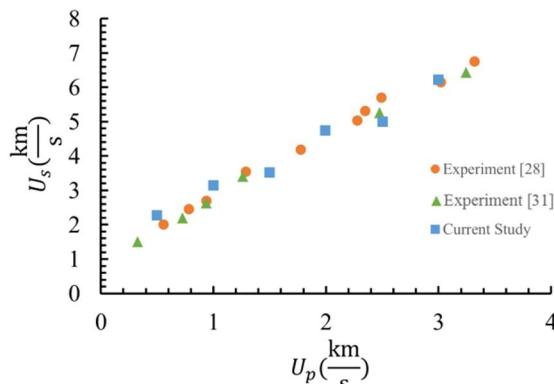
بعد از انتگرال‌گیری معادلات حرکت و بدست آوردن موقعیت مکانی و سرعت



**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 باگینگهام و لنارد-جونز [26, 22]

1- Pairwise potentials



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 می‌باشد [29].

این منحنی برای ساختن معادله حالت ماده به کار می‌رود. در یک رژیم قوی شوک معمولاً رابطه (15) برقرار است:

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

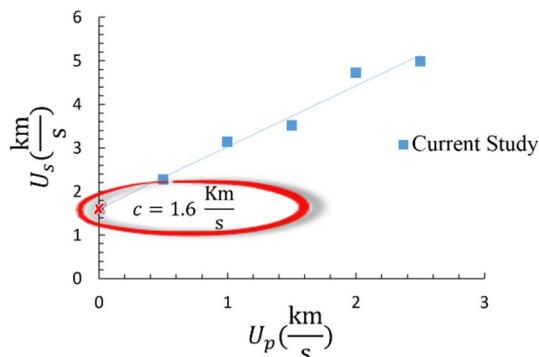
که  $c$  و  $S$  ثابت هستند. ثوری مکانیک محیط پیوسته پیش‌بینی می‌کند که در محدوده سرعت‌های بسیار کوچک پیستون، سرعت موج باید به سرعت صوت در ماده شوک نزدیک برسد [30]. بنابراین در رابطه (15) ثابت  $c$  بیان‌گر سرعت صوت می‌باشد. همچنین پارامتر  $S$  یک ثابت در محدوده 0.5 تا 2.5 می‌باشد. برای بدست آوردن سرعت صوت در جامد آرگون می‌توان از رابطه خطی میان سرعت موج شوک و سرعت پیستون بهره برد (شکل 4) که با یافتن عرض از میدا (محل برخورد منحنی برونو باشید) با محور افقی) آن می‌توان سرعت صوت در جامد آرگون را بدست آورد.

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

### 3- نتایج

#### 3-1-3 نمونه بدون کرنش اولیه

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



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

می‌کند. با در نظر گرفتن سرعت پیستون به مقدار  $U_p = 0.5 \frac{\text{km}}{\text{s}}$  مشاهده می‌گردد که یک موج شوک با سرعت ماکریم  $U_s = 2.27 \frac{\text{km}}{\text{s}}$  در نمونه ایجاد می‌گردد. البته به علت اینکه پیستون بعد از مدت 4ps متوقف می‌شود، سرعت جبهه موج شوک در طی زمان کاهش پیدا می‌کند (سرعت صوت در جامد آرگون تقریباً 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 می‌توان در شکل 2 مشاهده کرد. به تفاوت جرم مخصوص بین جبهه موج شوک و قسمتی که هنوز موج به آن نرسیده توجه کنید.

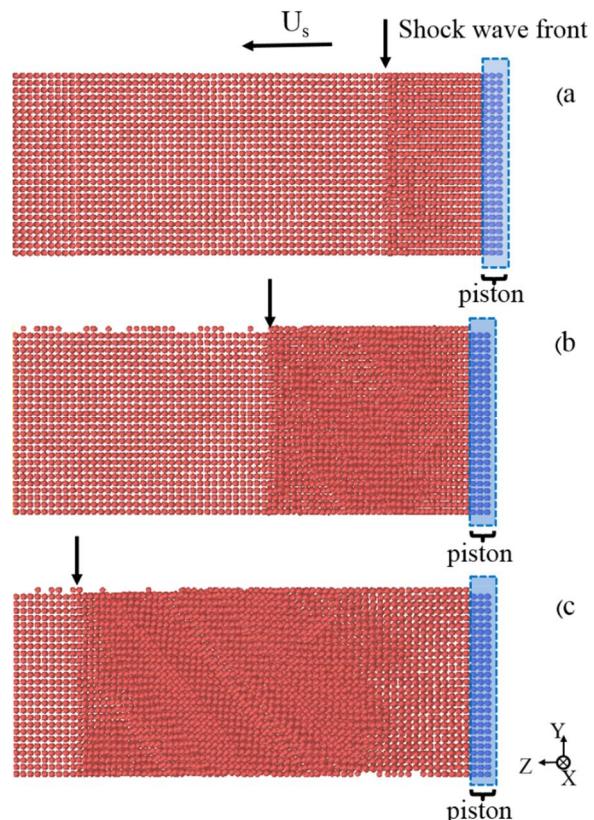
برای ارزیابی صحت عملکرد شبیه‌سازی، مدل با چند سرعت متفاوت پیستون اجرا گردیده است که نتایج تطبیق خوبی را با داده‌های تجربی منحنی هوگوئی نشان می‌دهد. این نتایج در شکل 3 ارائه شده‌اند [31,28]. منحنی هوگوئی رابطه بین حالت دو طرف موج شوک را بیان می‌کند و به عنوان معادلات کمکی با ترکیب معادلات بقای جرم، ممنتوم 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 می‌آورد [29].

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

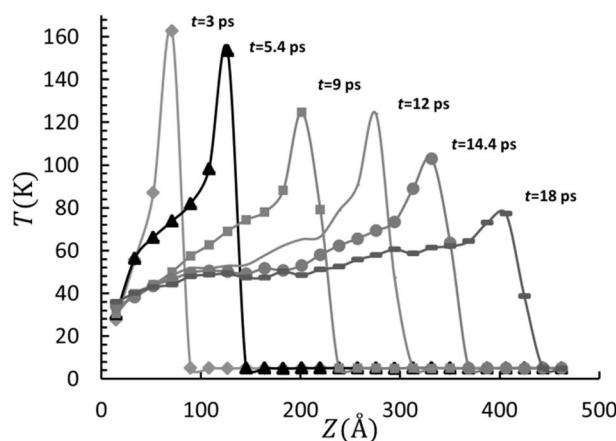
$$P = P_0 + \rho_0 U_p U_s \quad (13)$$

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

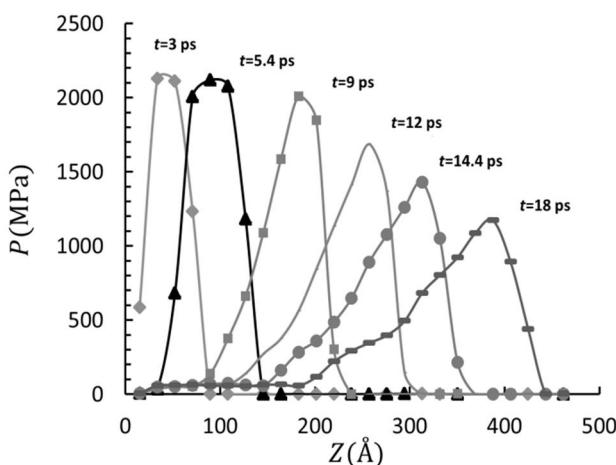
در معادلات (12) تا (14)  $V$ ,  $P$  و  $E$  به ترتیب حجم، فشار، جرم



شکل 2 تصاویر عبور موج شوک (بعد از ضربه پیستون) از یک طرف نمونه به انتهای دیگر در سه زمان مختلف. (a) در زمان 0.2ps (b) در زمان 4ps (زمان متوقف شدن پیستون). (c) در زمان 7ps



شکل 6 توزیع دما در راستای  $z$  در زمان‌های مختلف



شکل 7 توزیع فشار در راستای  $z$  در زمان‌های مختلف

تغییر طول نمونه و جابجایی موقعیت اتم‌ها در راستای  $z$ ) قرار می‌دهیم تا در جسم تنفس اولیه‌ای ایجاد گردد. سپس با عبور موج شوک در نمونه منحنی فشار را محاسبه و مقدار ماکریتم فشار در هر لحظه اندازه گرفته می‌شود.

شکل 9 فشار ماکریتم را بر حسب پیشرفت موج شوک در نمونه نشان می‌دهد. هر نقطه از این شکل مربوط به یک زمان مشخص عبور شوک از نمونه است. همانگونه که مشاهده می‌شود وقتی کرنش اولیه در نمونه اولیه افزایش پیدا می‌کند میزان فشار ماکریتم هم افزایش پیدا کرده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش کرنش اولیه در نمونه و بالتعی افزایش تنش اولیه، میزان فشار ماکریتم ایجاد شده در نمونه توسط موج شوک، افزایش یافته است. علت این افزایش می‌تواند 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 می‌یابد. برای نمونه هنگامیکه جسم قبل از اعمال کرنش دارای ثابت شیکه  $5.3 \text{ A}^\circ$  هست، پس از اعمال کرنش  $6.44\%$  می‌توان فرض کرد تا فاصله ثابت شیکه به میزان  $5 \text{ A}^\circ$  کاهش یافته باشد. در این صورت همانطور که در شکل 1 مشخص است شبیه تابع پتانسیل افزایش می‌یابد. می‌توان با یک محاسبه ساده به کمک مشتق رابطه (5) نشان داد که میزان شبیه تابع پتانسیل (نیروی بین اتمی) با این فاصله جدید، بیش از 40% افزایش می‌یابد. هنگام

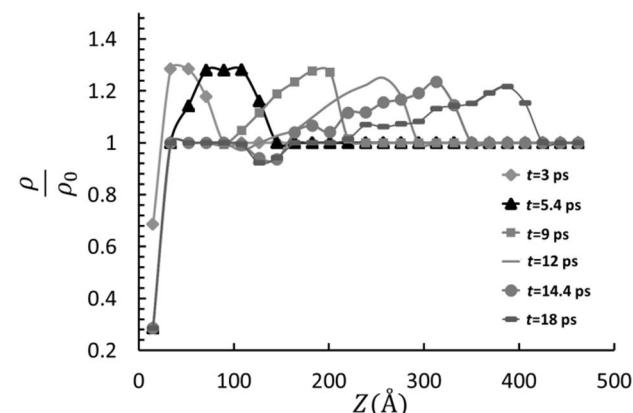
دما و فشار برای ماده‌ای که هنوز تحت تنفس پسماند قرار نگرفته است ارائه می‌شوند. شکل 5 تغییرات جرم مخصوص به جرم مخصوص اولیه  $(\frac{\rho}{\rho_0})$  را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود مقدار جرم مخصوص ابتداء افزایش پیدا می‌کند به طوری که تقریباً 1.3 برابر مقدار اولیه خود ( $\rho_0$ )  $1.7823 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$  می‌رسد. شکل 5 تغییرات عرض جبهه‌ی موج شوک در نمونه نشان می‌دهد. قابل توجه است که چون در مواجهه با موج موفق صوت هستیم، چگالی در جلوی موج شوک تأثیر قرار نمی‌گیرد. 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 ۱۵۰ Å مقدار نسبت چگالی از مقدار یک کمتر شده است که به علت انتشار موج رو به عقب<sup>۱</sup> است که باعث زوال قدرت موج شوک با گذشت زمان می‌شود و در نهایت آن را تبدیل به یک موج صوتی می‌کند.

شکل 6 تغییرات دما را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود مقدار دما در نمونه از ۵ K با عبور موج شوک افزایش یافته و به مقدار بیشینه  $T_{\max} = 160 \text{ K}$  می‌رسد. این مقدار بیشینه با پیشروی موج به تدریج کاهش می‌یابد 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 ۵۰ تا ۷۰ کلوین رسیده است.

شکل 7 تغییرات فشار را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می‌دهد. همانطور که مشخص است موج شوک باعث رسیدن پیک فشار به مقدار ۲۱۲۶ MPa در نمونه می‌شود. این بیشینه، همانند آنچه برای دما مشاهده شد، با پیشروی موج شوک کاهش می‌یابد با این تفاوت که مقدار فشار پس از عبور شوک بر خلاف نمودار دما کاهش قابل ملاحظه‌ای می‌یابد که به دلیل ایجاد فضای باز ناگهانی، در پشت شوک است. همچنین مشاهده می‌گردد که منحنی فشار در زمان ۱۴.۴ ps در انتهای نمونه عریض شده و رفتارهای از یک موج شوک به یک موج صوتی در حال تبدیل است.

### 3-2- نمونه 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 ابتداء نمونه را تحت کرنش اولیه معینی (با



شکل 5 توزیع چگالی در امتداد راستای  $z$  در زمان‌های مختلف

شکل 5 توزیع چگالی در امتداد راستای  $z$  در زمان‌های مختلف

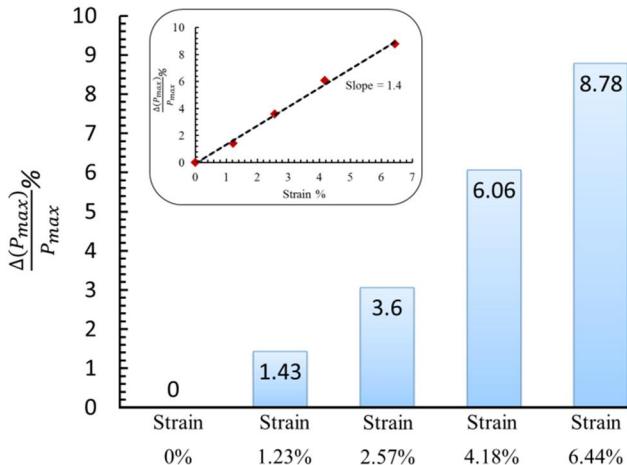


Fig. 10 Maximum pressure incensement percentage versus initial strain compared to zero initial strain

شکل 10 درصد افزایش فشار ماکریم بحسب 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%، می‌توان میزان افزایش فشار در هنگام عبور موج شوک را به میزان 9% افزایش داد. رابطه خطی بدست آمده میان درصد افزایش نسبی فشار ماکریم بحسب درصد کرنش اولیه و شیب گزارش شده تغییرات آن، می‌تواند در کاربردهای مختلف موج شوک به صورت تجربی استفاده شود.

## 5- مراجع

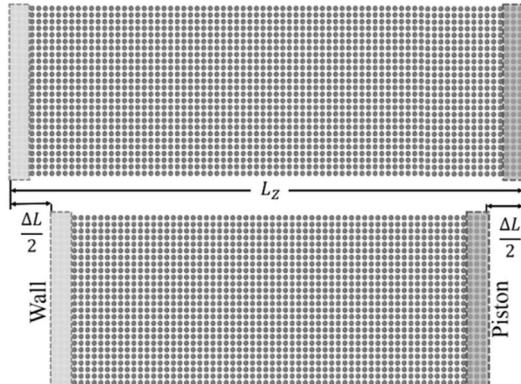
- [1] W. J. Nellis, J. A. Moriarty, A. C. Mitchell, M. Ross, R. G. Dandrea, N. W. Ashcroft, N. C. Holmes, G. R. Gather, Metals physics at ultrahigh pressure: Aluminum, copper, and lead as prototypes, *Physical Review Letter*, Vol. 60, No. 14, pp. 1414-1417, 1988.
- [2] A. C. Mitchell, W. J. Nellis, J. 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. 28501-4, 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. Gutie'rrez, 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, Microscopicview 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 ویریال (رابطه (11)) باعث افزایش بیشتر فشار در نمونه می‌شوند.

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

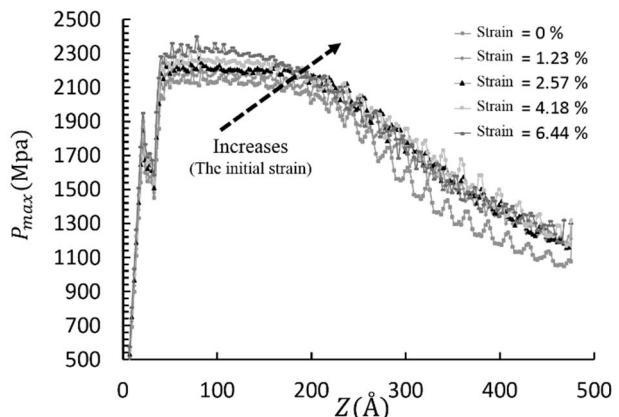
## 4- نتیجه‌گیری

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 کننده<sup>1</sup> در آزمایش تجربی شبیه سازی گردید. چندین اجرا با سرعت پیستون مختلف اجرا گردید و سرعت‌های موج شوک ایجاد شده در نمونه ثبت گردید. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی با نتایج بدست امده از تجربه در تطابق خوبی هستند و در نهایت منحنی هوگوئیت جامد آرگون تحت یک شوک ایده آل بدست آمد. موج شوک عبور کرده از نمونه باعث ایجاد تغییراتی در خواص ترمودینامیک و مکانیکی نمونه می‌گردد که این تغییرات در لحظات مختلف به تصویر کشیده شده است. میزان افزایش فشار در هنگام عبور موج شوک در



شکل 8 راستای اعمال نیرو برای ایجاد کرنش اولیه در نمونه

شکل 8 راستای اعمال نیرو برای ایجاد کرنش اولیه در نمونه



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

شکل 9 نمودار فشار ماکریم 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.