文章编号:1000-5773(2006)02-0172-07

单晶铜中冲击波阵面结构的数值模拟研究*

邓小良[1,2],祝文军[2,3],罗 晋[1,2],
贺红亮[2],伍登学[1],经福谦[2,3]

(1. 四川大学物理科学与技术学院,四川成都 610064;
2. 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,四川绵阳 621900;
3. 四川师范大学高压物理研究中心,四川成都 610068)

摘要:用分子动力学方法模拟计算了在初始温度为 0 K 时单晶铜中的冲击波结构,相互作用势采用铜的嵌入原子势(EAM),模拟计算结果表明即使是在初始温度为 0K 的 FCC 晶体中,冲击波波阵面后的区域也会向平衡态演化。局域分析表明冲击波阵面后区域的压力、粒子速度、应变和温度随时间逐步变化到稳定态,在所研究的冲击波强度(约 262 GPa)下,波后区域的平均压力、粒子速度、应变均在约 1 ps 内逐渐上升并达到稳定值。动能温度在波阵面处始终为最大值,随着冲击波的传播,波后非零温度区域逐渐扩大,不同时刻的粒子速度分布函数说明波后区域逐渐向热力学平衡态演化,并最终达到热力学平衡,进一步的分析说明局域平衡是系统向平衡态演化的基本过程。

关键词:冲击波;分子动力学;平衡态
中图分类号:O521.12 **文献标识码**:A

1 引 言

以连续介质力学为基础的固体中传统的冲击波理论认为,冲击波是一物理间断面,波前和波后区域分别处于各自的热力学平衡态,可以通过 Rankine-Hugoniot 跃迁条件将波前和波后的这两个平衡状态联系起来。对于这一间断面内部的情况还较少研究,实际上冲击波从开始压缩到波后的力学量和热力学量达到稳定值(平衡状态)需要一个弛豫过程,在这个过程中各力学量和热力学量发生快速的剧烈变化,但由于这个非平衡态过程的空间或时间尺度很小,从而使人们无法用现有实验手段直接观测冲击波阵面内的力学量和热力学量演化的真实过程。分子动力学(Molecular Dynamics, MD)是一种可用于计算一个经典多体体系的平衡态、非平衡态和输运性质的方法,它能够得到原子尺度的各种信息(位置、速度等),然后用统计平均计算方法求出各种宏观热力学量的值。

随着现代计算机技术的发展及并行计算方法的应用,人们能够计算的体系尺度越来越大,并使分子动力学广泛应用于各个科学研究领域。分子动力学方法能够在皮秒量级时间求得所需要的力学量和热力学量,从而使人们对微观尺度的物理过程有更深入的了解。迄今,人们用分子动力学方法研究材料中的冲击波结构已经作过一些尝试[1-6]。长时间以来,Holian 等人[7-12]用 L-J 相互作用势分别对初始状态为零温和非零温 FCC 晶体中的冲击波结构进行了深入研究,他们的一维模拟计算结果表明中弱冲击波的阵面厚度均随时间呈线性增长关系,在冲击波后区域不可能达到热力学平衡状态,表现为波后粒子速度分布不符合麦克斯韦速度分布律;但他们的三维模拟表明,当晶格的初始温度为零时,晶体中的冲击

* **收稿日期**:2005-06-16;**修回日期**:2005-09-09
基金项目:国家自然科学基金 NSAF 联合基金重点项目(10476027);中国工程物理研究院科学技术基金(20050105)
作者简介:邓小良(1978—),男,硕士研究生,主要研究方向为材料动态响应数值模拟. E-mail:xiaoliangdeng@163.com
通讯作者:祝文军(1968—),男,博士,副研究员,主要研究方向为材料动态响应数值模拟. E-mail:wjzhu@caep.ac.cn

波始终是自相似波,不能形成稳定的冲击波剖面;当晶格为非零初始温度时,才有可能形成稳定的冲击波结构。另外,潘原生[13]的计算结果则表明,在一维分子链中,即使晶体的初始温度为零,波后也会出现热力学平衡区域,能够形成稳定的冲击波。

针对上述的两个矛盾的分子动力学模拟计算结果,本研究的目的是,借助现代计算机技术的发展,用多体嵌入原子势(EAM)对单晶铜进行三维的大尺度并行分子动力学模拟计算,以期澄清零温初始温度对冲击波阵面结构的影响。

2　模拟方法

在模拟计算中,我们用 EAM 势[14]描述铜原子间的相互作用,其适用性已经在文献[15]中得到验证。EAM 势认为,体系中的能量包含对势和嵌入势两部分

$$E_{\mathrm{tot}}=\frac{1}{2}\sum_{ij}V(r_{ij})+\sum_{i}F(\bar{\rho}_i) \tag{1}$$

式中第一项是对势,它是 i 和 j 原子之间距离的函数,F 是嵌入能,它是在 i 原子处由其它所有原子产生的电子密度的函数,其中 $\bar{\rho}_i=\sum_{j\neq i}\rho(r_{ij})$,$\rho(r)$是电子密度函数。

模拟计算时的 x、y、z 三个坐标轴分别为[100]、[010]、[001]晶向,通过推动 x 方向边界处的一个运动活塞对静止靶的作用来产生冲击压缩,通过改变活塞速度来得到不同的冲击波速度;冲击波沿 x 方向传播,与活塞作用靶界面对称的靶的另一个边界为自由边界。为了减少表面对模拟结果的影响,在 y 和 z 方向上采用周期性边界条件,模型示意图如图 1 所示。在计算中,时间都以时间步数表示,每个时间步为 MD 中的计算步长,每个步长的物理时间取为 1 fs,模拟体系的初始温度为 0 K,此时,原子静止于晶格平衡位置,没有附加的热运动。

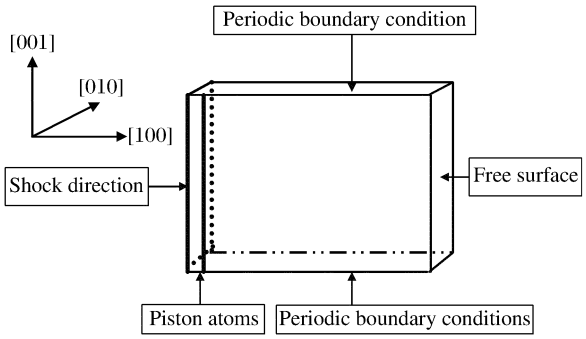


图 1　模型示意图

Fig. 1　Map of simulation model

在模拟计算过程中,体系中的各个物理量的计算方法如下:瞬时应力张量的计算借鉴 Cormier 方法[16],在边长不小于 2 个晶格常数的体元内,根据维里定理[17]计算应力,并作体元体积的统计平均后得到体元的应力张量。应力张量的表达式如下

$$\sigma_{\alpha\beta}=-\frac{1}{V}\left(\sum_{i}\frac{P_{i\alpha}P_{i\beta}}{m_i}+\sum_{i}\sum_{j>i}r_{ij\alpha}r_{ij\beta}\right) \tag{2}$$

式中:i、j 为原子标号,α、β 表示坐标轴,应力项等于原子距离 r_{ij} 与原子对$<ij>$的相互作用力的矢量积总和,V 是体元的体积,m_i 是原子质量,$P_{i\alpha}$、$P_{i\beta}$是原子动量。

静水压力为:$p=(1/3)(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}+\sigma_{zz})$,压力单位均取为 GPa,体应变为:$\varepsilon=(V_0-V)/V_0$,$V_0$ 为初始状态的体积,V 为终了状态的体积, 粒子速度为在一定空间内对各个粒子速度求平均,粒子速度单位取 km/s。

为了反映局域热运动状态,无论粒子速度分布是否符合 Maxwell 速度分布率,定义 $T_{aa}=(1/k_{\mathrm{b}}N)\sum_{i=1}^{N}m_i(v_{ia}-\bar{v}_a)^2$,$(a=x,y,z)$ 的值为动能温度, 平均动能温度 $T=(T_{xx}+T_{yy}+T_{zz})/3$,其中 k_{b} 是玻耳兹曼常数,m 是铜原子质量,v 是粒子速度,$\bar{v}_a$ 为所求区域的质心速度,N 为所求区域的原子个数,计算时扣除了区域内质心运动的动能。严格地说,只有当所研究的区域处于热力学平衡状态时,动能温度才符合热力学的平衡温度定义,但从下面的讨论可以看出,我们所计算的区域并非都是处于热力学平衡状态,但为了便于讨论,本文根据文献[18]的意见仍把用上式计算的结果称为动能温度。

沿 x、y、z 三个方向,模拟体系的大小为 49.5 nm×10.8 nm×10.8 nm,整个模拟体系内约包含 495 000个原子。计算时使用我们自己开发的 LZ-Parallel-MD 并行分子动力学程序。

3 结果与讨论

模拟体系在 x 方向上有 137 个单位晶胞长度，在 y、z 方向上各有 30 个单位晶胞长度；沿 x 方向将整个系统划分为不同部分以便进行局域分析。以 $a_0/2$ 为单位（a_0 为常压下铜的晶格常数），可知沿着[100]方向共有 275 个互相平行的(100)晶面，其中每个晶面含有 1800 个原子。由于冲击波的传播直接表现为冲击波到达处材料状态参量的变化，如应力、粒子速度、温度等，因此可以通过数值计算得到相应的参量，以了解冲击波在三维材料里传播的微观物理过程的信息。

首先模拟得到了单晶铜中冲击波速度和粒子速度之间的关系，结果如图 2 所示，图中冲击波速度和粒子速度均用铜中体波声速归一化（$c_0=3.94$ km/s），可见在粒子速度 $u_p\in(0,0.88)$，二者有很好的线性关系。将铜的冲击加载实验所测得冲击波速度和粒子速度的数据[19]经过同样的归一化处理后，发现实验得到的冲击波速度和粒子速度之间的关系式为 $u_s=1+1.489u_p$，其中 u_s 是冲击波速度，u_p 是波后粒子速度，和我们模拟所得结果相比，两者有比较明显的不一致。我们分析，造成这种不一致的主要原因是由于通常实验所用的样品和我们模拟的模型之间有所不同，和用铜的多晶为样品的试验结果相比，试验测得的结果将是晶体沿不同晶向加载响应的一个平均效果，我们用分子动力学模拟所用的模型是纯粹的单晶体，加载是沿着单一的晶向，由于晶体响应的各向异性，必将和实验得到不同的结果。特别需要指出的是，对于 FCC 铜而言，它的弹性常数 $c_{11}=168.4$ GPa，$c_{12}=121.4$ GPa，$c_{44}=75.4$ GPa，所以铜的各向异性因子 $A=2c_{44}/(c_{11}-c_{12})=3.21$，它是属于立方晶系的晶体中各向异性因子最大的晶体，因此，铜晶体的各向异性的响应行为必将更加明显；和用铜单晶为样品的实验结果相比，据报道[20]，即便是经过良好退火处理过的铜单晶体，其内部的位错密度也高达 $10^5\sim10^8/\mathrm{cm}^2$，缺陷的存在必将影响到材料的性质，从而影响冲击波的传播，而我们模拟的是理想的单晶体，里面不存在任何缺陷；另外，和国外其他学者的分子动力学研究结果[20]相比，他们得到的单晶铜中冲击波速度和粒子速度之间的关系为：$u_s=1.07+1.31u_p$，和我们得到的结果 $u_s=1.12+1.35u_p$ 相比，二者吻合得比较好。

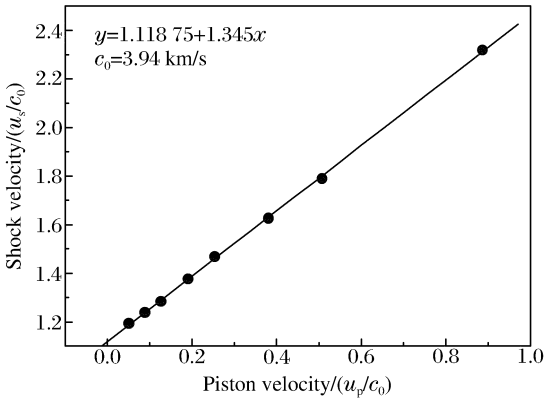


图 2 冲击波速度和粒子速度关系

Fig. 2 Relationship between shock wave velocity and particle velocity

为了考察波后区域的演化过程，在活塞速度为 3.5 km/s 情况下，对应的应变率为 2.2×10^{11}/s，计算了波后区域内的压力、粒子速度、应变、动能温度等参量。根据传统的冲击波理论处理实际问题时，假定冲击波扫过的区域立即转变为处于热力学平衡的终了状态，而不考虑这一转变的弛豫过程的细节，但从我们的模拟计算中可以看到，冲击波扫过的区域内压力、粒子速度、应变以及动能温度都有一个向平衡态弛豫的微观过程。为了进一步了解这个过程，在体系内选择一个固定区域，这个区域位于沿[100]晶向第 111～122 个(100)晶面之间，以冲击波阵面到达这个区域的时刻为零时刻，在这个固定区域内，观察了冲击压力、粒子速度、应变以及动能温度随时间的演化关系，图 3 是模拟计算的结果。

由图 3(a)和图 3(b)可以看到，在开始的大约 700 个时间步之内，研究区域的压力、粒子速度一直处于上升阶段，在 700 个时间步时，它们才基本上达到其稳态值，这个弛豫过程的时间尺度约为 1 ps。从图 3(c)中也可以看出，在几乎相同的时间范围内，应变也达到稳定值。图 3(d)是相同区域的动能温度分布图，从图中可以看到，在冲击波刚刚到达所考察区域时，沿冲击方向的动能温度（T_{xx}）非常大，随着冲击波的传播，T_{xx} 逐渐降低，同时，另外两个自由度（T_{yy}、T_{zz}）上的动能温度连续上升，直至在三个自由度上的温度达到一稳定值，随后，该区域的温度基本保持该稳定值，从图中可以看到，温度达到稳定值的时间尺度也大约是 1 ps。

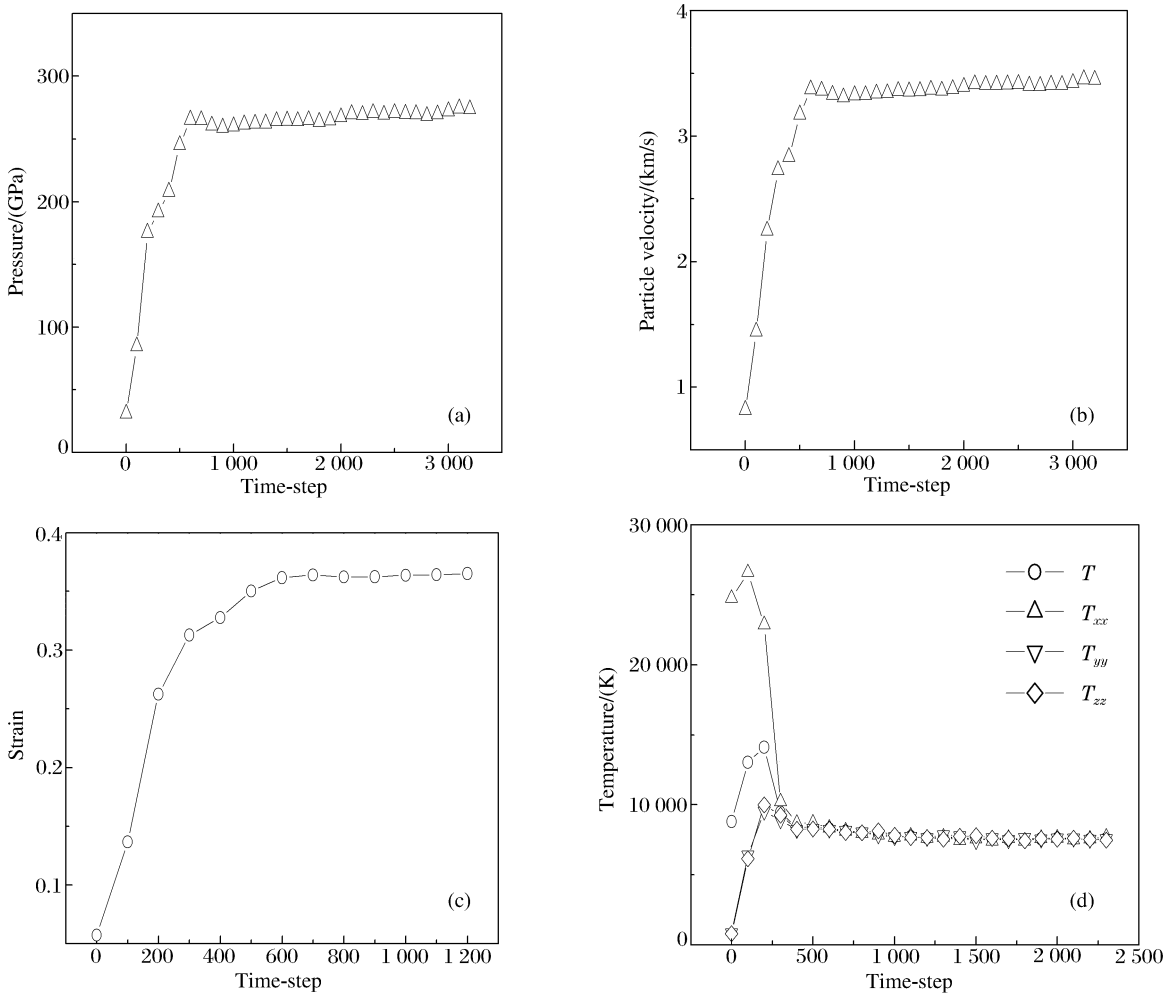


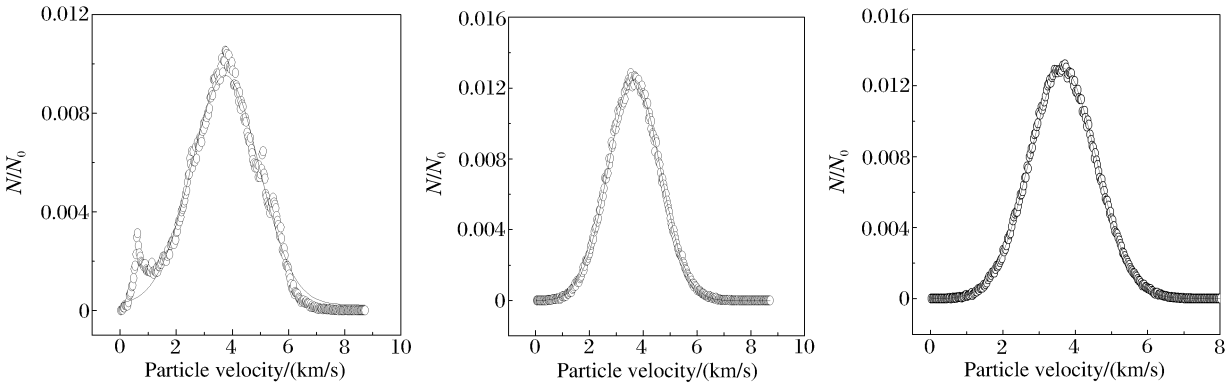
图 3　(a) 压力-时间的演化;(b) 粒子速度-时间曲线;(c) 应变-时间曲线;(d) 动能温度-时间曲线

Fig. 3　(a) The time history of pressure;(b) The time history of particle velocity;(c) The time history of strain;(d) The time history of kinetic temperature

为了能更清晰地观测波后区域向热力学平衡态演化的详情,在不同时刻对波后区域的粒子速度分布做了统计,图 4 是波后粒子速度在 1 800、2 800、3 800 个时间步时刻的速度分布图,图中空心圆表示计算值,细实线是用麦克斯韦分布拟合的曲线,N_0 为总粒子数,N 为一定速度范围内的粒子数。统计时扣除了活塞原子,从图中可以看出。随着时间步的增加,粒子速度分布与相应的麦克斯韦分布偏离越来越小,在 2 800 个时间步时粒子速度的分布函数已经和相应的麦克斯韦分布函数十分吻合,表明此时该区域达到热力学平衡态。另外,图 4(b)和图 4(c)的分布函数基本相同,并且都符合麦克斯韦分布函数,这说明当波后区域达到平衡态以后,随着冲击波向前传播,达到平衡态的区域以基本和冲击波相同的速度向前扩展。

为了更细致地研究体系趋于平衡态的过程,将 1 800 时间步时扰动到达的区域平均分成更小的部分,由压力或速度剖面可以知道,在 1 800 个时间步时,冲击波波阵面沿[100]方向大约已经扫过前 100 个(100)晶面,把这 100 个晶面分成相等的几个部分,对其中的一些部分做出它们的随机速度分布图,统计时扣除了活塞原子,所得结果见图 5。其中:图 5(a)是沿[100]方向上的第 3～14 个(100)晶面范围,是靠近活塞的区域;图 5(b)是相同方向上的第 34～45 个(100)晶面范围,为接近中心的区域,图 5(c)是第 67～78 个(100)晶面范围,为靠近波阵面的区域。从 3 个图的比较中可以看到,图 5(b)的计算值和相应的拟合曲线吻合最好,图 5(a)其次,图 5(c)则有很大偏差。通过这样的分析,可以得到如下结论:首先在靠近冲击波阵面处,粒子速度分布远远偏离麦克斯韦分布,表明这个区域还处于非热力学平衡态,该区域内各个力学量和热力学量围绕平衡值波动;从前面的讨论可以知道,在 1 800 个时间步时,整

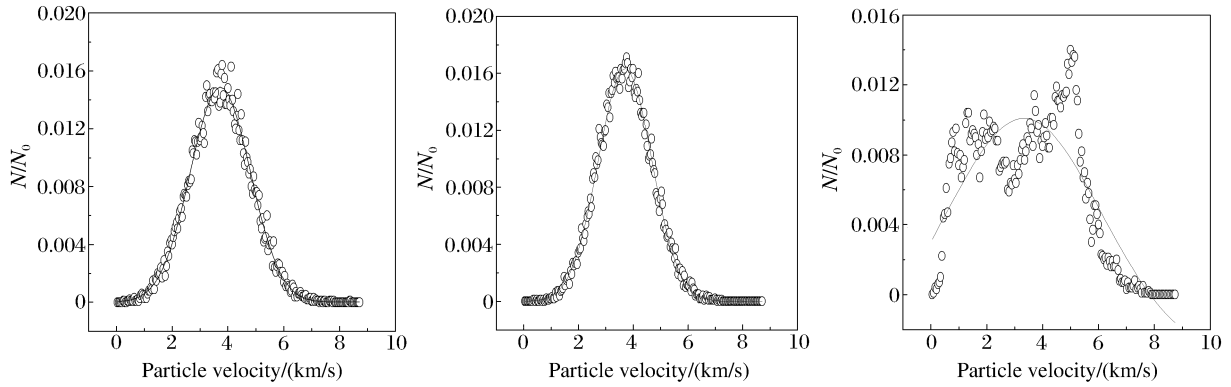
个波后区域还没有达到热力学平衡态，但图 5(b)表明此时该区域靠近中间的部分已经首先达到了平衡态，这说明局域平衡是系统向平衡态演化的基本过程。由此可以知道，冲击波在材料中传播时，体系经过一定的演化时间后，在冲击波扫过的区域中，该区域中心附近的部分区域将首先达到平衡态；在同一个时间步，偏离中心位置越多，该区域的速度分布函数和相应的麦克斯韦分布偏离也越大；随着冲击波的传播，达到平衡态的区域逐渐扩大，最后波后整个区域达到热力学平衡。



(a) 1 800 time step (b) 2 800 time step (c) 3 800 time step

图 4 不同时刻波后粒子速度分布(实线是符合麦克斯韦分布的拟合曲线)

Fig. 4 Distribution of particle velocity behind shock wave in different time (Solid line are fitted with Maxwell distribution function)



(a) 3～14 crystal plane (b) 34～45 crystal plane (c) 67～78 crystal plane

图 5 1 800 个时间步时不同区域的速度分布函数(实线是符合麦克斯韦分布的拟合曲线)

Fig. 5 Distribution function of particle velocity in different zone on 1 800 time-step (Solid line are fitted with Maxwell distribution function)

4 结 论

采用 EAM 势对初始温度为 0 K 时的单晶铜中冲击波阵面结构和波后区域的演化进行了三维模拟计算，发现在所研究的冲击波强度下波后区域平均压力、应变、粒子速度等力学量在约 1 ps 内从初始值逐渐上升到稳定值，反映温度特征的动能温度在冲击波阵面内一直处于极大值，波后区域温度逐渐上升，非零温度区域逐渐变大。对波后粒子速度在不同时刻进行统计，发现其速度分布逐渐趋向于相应平衡态的麦克斯韦分布。更细致的分析表明，局域平衡是波后区域向平衡态演化的基本过程，模拟结果说明即使初始温度为零温时，系统也能到达热力学平衡态。

感谢中国工程物理研究院计算机应用研究所张亚林在程序并行编制过程中提供的帮助。

References:

[1] Tsai D H, Beckett C W. Shock Wave Propogration in Cubic Lattices [J]. J Geophys Res, 1966, 71: 2601-2608.

[2] Zhakhovskii V V, Zybin S V, Nishihara K, et al. Shock Wave Structure in Lennard-Jones Crystal via Molecular Dynamics [J]. Phys Rev Lett, 1999, 83: 1175-1178.

[3] Tsai D H, MacDonald R A. Second Sound in a Solid under Shock Compression [J]. J Phys C: Solid St Phys, 1973, 6: L171-175.

[4] Tsai D H, MacDonald R A. Molecular-Dynamical Study of Second Sound in a Solid Excited by a Strong Heat Pulse [J]. Phys Rev B, 1976, 14: 4716-4723.

[5] Paskin, Gohar A, Dienes G J. Simulations of Shock Waves in Solids [J]. J Phys, 1977, 10: L563-L566.

[6] Manvi R, Duvall G E, Lowell S C. Finite Amplitude Longitudinal Waves in Lattices [J]. Int J Mech, 1969, 11: 1-8.

[7] Straub G K, Holian B L, Petschek R G. Molecular Dynamics of Shock Wave in One-Dimensional Chains(Ⅱ): Thermalication [J]. Phys Rev B, 1978, 19: 4049-4055.

[8] Timothy C, Germann, Holian B L. Plastic Deformation in Shock Waves via Molecular-Dynamics Simulations [A]. //Furnish M D, Chhabildas L C, Hixson R S. Shock Compression of Condensed Matter-1999 [C]. New York: American Institute of Physics, 2000: 297-300.

[9] Holian B L, Straub G K. Molecular Dynamics of Shock Wave in Three-Dimensional Solids: Transition from Nonsteady to Steady Waves in Perfect Crystals and Implications for the Rankine-Hugoniot Conditions [J]. Phys Rev Lett, 1979, 43: 1598-1600.

[10] Holian B L, Hoover W G, Moran B, et al. Shock-Wave Structure via Nonequilibrium Molecular Dynamics and Navier-Stokes Continum Mechanics [J]. Phys Rev A, 1980, 22: 2798-2808.

[11] Holian B L. Modeling Shock-Wave Deformation via Molecular Dynamics [J]. Phys Rev A, 1987, 37: 2562-2568.

[12] Norman J, Wagner, Holian B L. Molecular-Dynamics Simulation of Two-Dimensional Materials at High Strain Rates [J]. Phys Rev A, 1992, 45: 8457-8469.

[13] Pan Y S. Molecular Dynamics Study of High Pressure Shock Compression of Solids [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 1997: 1-37. (in Chinese)
潘原生. 固体高压冲击压缩的分子动力学研究 [D]. 绵阳:中国工程物理研究院, 1997: 1-37.

[14] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A. Structural Stability and Lattice Defects in Copper: *Ab initial*, Tight-Binding, and Embedded-Atom Caculations [J]. Phys Rev B, 2001, 63: 224106-1-15.

[15] Luo J, Zhu W J, Lin L B, et al. Molecular Dynamics Simulation of Void Growth in Single Crystal Copper under Uniaxial Impacting [J]. Acta Physica Sinica, 2005, 54(6): 2791-2798. (in Chinese)
罗　晋, 祝文军, 林理彬, 等. 单晶铜在动态加载下空洞增长的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2005, 54(6): 2791-2798.

[16] Cormier J, Rickman J M, Delph D J. Stress Calculation in Atomistic Simulations of Perfect and Imperfect Solids [J]. J Appl Phys, 2001, 89: 99-104.

[17] Seppala E T, Beleak J, Rudd R E. Effect of Stress Triaxiality on Void Growth in Dynamic Fracture of Metals: A Molecular Dynamics Study [J]. Phys Rev B, 2004, 69: 134101-1-19.

[18] Zybin S V, Elert M L, White C T. Molecular Dynamics Study of Non-Reacting Shock Waves in Anthracene [A]. //Furnish M D, Gupta Y M, Forbes J W. Shock Compression of Condensed Matter-2003 [C]. New York: American Institute of Physics, 2004: 306-309.

[19] Hayes D, Hixson R S, McQueen R G. High Pressure Elastic Properties, Solid-Liquid Phase Boundary and Liquid Equation of State from Release Wave Measurements in Shock-Loaded Copper [A]. //Furnish M D, Chhabildas L C, Hixson R S. Shock Compression of Condensed Matter-1999 [C]. New York: American Institute of Physics, 2000: 483-488.

[20] Bringa E M, Cazamias J U, Erhart P, et al. Atomistic Shock Hugoniot Simulation of Single-Crystal Copper [J]. J Appl Phys, 2004, 96: 3793-3799.

Numerical Simulation of Shock Wave Structure in Single Crystal Copper

DENG Xiao-Liang[1,2], ZHU Wen-Jun[2,3], LUO Jin[1,2],
HE Hong-Liang[2], WU Deng-Xue[1], JING Fu-Qian[2,3]

(1. *Department of Physics, Sichuan University, Chengdu* 610064, *China*;
2. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
3. *Research Center of High Pressure Physics, Sichuan Normal University, Chengdu* 610068, *China*)

Abstract: The structure of shock wave in single crystal copper has been studied by means of molecular dynamics (MD) method with a realistic embedded atom potential at initial condition of zero temperature. The simulation results indicate that the after-shock state will evolve to thermodynamic equilibrium state even initial state is zero temperature. By means of local analysis and calculation, time history of the distribution of pressure, particle velocity, strain and kinetic temperature after the shock front were obtained. The pressure, particle velocity, and strain increase and arrive at the stable condition within time period about 1 ps when shock pressure is about 262 GPa. The kinetic temperature always keeps maximum value in shock wave front and the nonzero temperature region broadens behind the shock wave as time passes by. After evolution of a critical time, the particle velocity in the after-shock region reaches a typical Maxwell distribution which means it reaches equilibrium state. The further analysis indicates that local equilibrium is an elemental course when the whole system evolves to thermodynamic equilibrium state.

Key words: shock wave; molecular dynamic; equilibrium state