文章编号：1000-5773(2013)02-0211-05

钨合金冲击塑性行为的分子动力学模拟*

于 超，任会兰，宁建国

（北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室，北京 100081）

摘要：利用分子动力学方法，结合钨合金的嵌入原子势，研究了在高速冲击载荷下钨合金的熔化行为。首先，建立了钨合金的冲击模型，采用相同的冲击加载速度，分别对钨(100)、(110)和(111)晶面进行冲击数值模拟，得到 Hugoniot 关系、压力、温度、体积和波后粒子速度等相关数据及曲线，通过对数据和曲线的分析可知，冲击压力与冲击温度成正比例关系，冲击压力与冲击体积成反比例关系。计算结果在低速冲击过程中与实验数据比较吻合，从而进一步将其拓展到高速冲击领域，计算结果可以定性地说明钨合金在高速冲击下的塑性性质。

关键词：钨合金；冲击相变；分子动力学；Hugoniot；数值模拟

中图分类号：O347.3 **文献标识码**：A

1 引 言

钨及钨合金具有高强度、高密度，良好的抗腐蚀性，导电、导热性和热膨胀系数小等一系列优良物理和力学性能。近几十年，被广泛应用在航空航天、化工、能源和船舶等行业，并使相关领域取得了长足的发展和巨大的成就[1]。

由于在军事领域中，如坦克、火炮、航空发动机、核潜艇、导弹和舰艇等装备的一些关键部件大量采用了钨及钨合金，它们的结构设计和安全性能与所采用材料的物理、化学和机械特性有着十分密切的关系，所以，许多研究学者对钨及钨合金进行了大量的实验研究，Zhou[2]、刘海燕[3]、李娜[4]、Pink[5]、Kumar[6]等先后研究了钨合金在动、静载荷作用下冲击和拉伸的力学性能问题，取得了一些研究成果。但是由于实验研究费用高、采集数据困难、实验环境局限性强等复杂因素，使得钨合金的实际应用与微纳米尺度下材料行为特性的研究受到了限制。

分子动力学模拟是一种用于计算经典多体体系平衡和传递性质的方法，是针对原子核和电子组成的多体系统，应用牛顿力学运动方程，对原子核运动过程进行模拟，记录运动过程中的轨迹，最终利用统计力学方法计算一些相关物理量，得出物质结构特性的一种理论计算方法。该模拟手段已成功应用于研究晶体熔化、晶体冲击、晶格畸变等方面[7]，并且随着计算方法的发展以及计算机性能的提高，将广泛应用于生物、化学和医药等领域，有着广阔的应用前景。目前，采用分子动力学方法，对金属钨的冲击塑性问题还未展开系统研究。

本研究利用分子动力学模拟金属钨的冲击塑性力学行为，分别对钨(100)、(110)和(111) 晶面进行冲击加载，得到金属钨的波后粒子速度、冲击压强、冲击温度等相关热力学数据，解决实验中无法获得的一些关键数据的问题，为进一步了解高速冲击下金属钨的一些相变特性提供更客观的依据。

* **收稿日期**：2013-03-20

基金项目：国家重点基础研究发展计划(2010CB832706)；国家自然科学基金(11032002，11172045)

作者简介：于 超(1983—)，男，博士研究生，主要从事材料动态力学研究. E-mail：chao_yu2009@163.com

通讯作者：任会兰(1973—)，女，博士，副教授，博士生导师，主要从事材料动态力学研究. E-mail：huilanren@bit.edu.cn

2 单晶钨的冲击模型

2.1 嵌入式原子势

嵌入式原子势(Embedded Atom Method,EAM)是 Daw 和 Baskes[8]根据 Hohen-Kohn 定理建立的势函数模型,具有运算量小、运算效率高、适合金属间的作用等优点。EAM 原子势的总能量 E 可以表示为

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i,j(i\neq j)}\varphi_{ij}(r_{ij})+\sum_{i}F_i(\rho_i) \tag{1}$$

式中:φ_{ij} 表示距离为 r_{ij} 的原子 i 和原子 j 之间的对势能,F_i 表示电子密度为 ρ_i 的原子 i 嵌入能。

2.2 金属钨计算模型

金属钨为体心立方结构,如图 1 所示,晶格常数为 $a=b=c=0.3165$ nm[8]。对于沿[100]晶向的拉伸加载情况,建立超晶胞为 $30a\times20b\times20c$,共有 80 000个原子,如图 2 所示。利用这个模型模拟钨合金的冲击熔化问题,与采用更大的初始模型的模拟结果基本一致。x、y、z 坐标轴分别对应[100]、[010]、[001]方向。

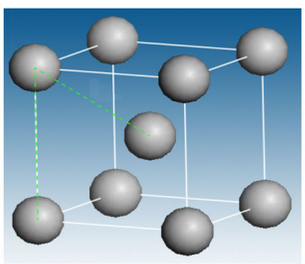


图 1 体心立方结构

Fig. 1 Body-centered cubic structure

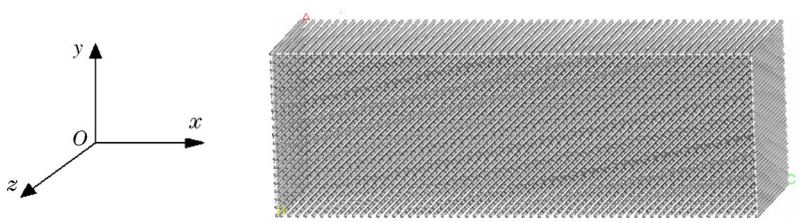


图 2 加载模型

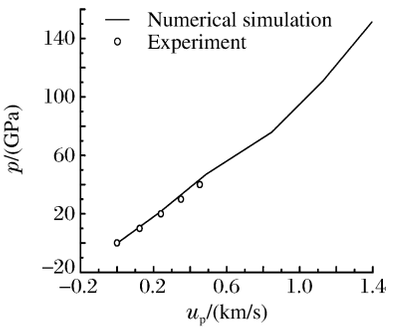
Fig. 2 Loading model

3 模拟方法

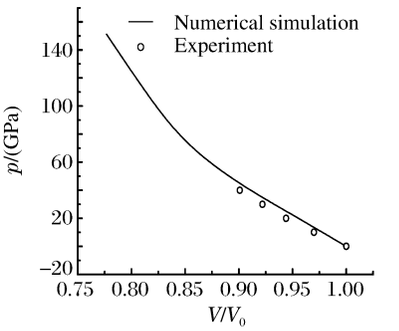
采用 Ackland 的 EAM 势函数描述钨合金原子之间的相互作用,能准确地拟合出单晶钨的弹性性质、结合能、缺陷形成能、层错能等参数,而且还能较好地拟合钨合金在高压下的物态方程。初始温度为 300 K,初始压力为 0 GPa。x、y 和 z 方向均采用非周期边界条件,将模型弛豫 20 ps,然后在 x 方向加载冲击波,采用"Shrinking Periodic Boundary Condition"方法产生冲击波,即冲击波沿 x 方向传播,则 t 时刻 x 方向的长度为 $L(t)=L(0)-2u_pt$,u_p 为粒子速度,其它两个方向的长度则保持不变。因整个体系不存在自由边界,因而利用此方法可以保证原子不被蒸发。为了进一步考核 EAM 势函数在冲击波加载条件下的适用性,首先利用此势函数模拟研究钨合金的冲击压缩线,并与文献中的有关实验数据[9]进行比较。

4 EAM 势函数的验证

主要模拟钨合金在不同冲击加载条件下对模型的冲击响应。计算在不同初始冲击速度(4.50、5.00、5.50、6.00、6.25、6.75 km/s)加载下钨合金的冲击压力-粒子速度关系(p-u_p)和冲击压力-比体积关系(p-V/V_0),并与实验数据[9]进行了比较。从图 3 可以看出,模拟结果与低速冲击实验数据比较吻合(因目前实现高速冲击实验比较困难,而实验数据相关资料特别少),从以上处理后的数据与实验数据的对比可知,该势函数在冲击加载的模拟中是适用的。模拟数据比实验值偏高的主要原因是,数值模拟采用的是材料完全无缺陷模型,而在实际情况下,试件中存在各种缺陷(如空洞、裂纹、杂质等),从而导致了模拟中的强度等性能有一定的降低,但模拟数值对分析研究不会产生本质的影响。



(a) The relation between the shock pressure and the particle velocity



(b) The relation between the shock pressure and the specific volume

图 3　数值模拟与实验数据的对比

Fig. 3　The comparison between the numerical simulation and the experimental data

5　计算结果与分析

在 11 km/s 的冲击速度下,不同晶面波后粒子速度 u_p 随时间变化的曲线如图 4 所示。由图 4 可知,在冲击过程中,同一时刻,(110)晶面波后粒子速度大于其它两个晶面波后粒子速度,而在冲击相变发生后可以看到,(111)晶面波后粒子速度高于(100)和(110)晶面。这些数据对进一步研究材料加工的特殊性能具有重要意义,对于现在比较难于在实验中证明的高速冲击具有一定的研究价值。从图 4 中还可以看出,系统稳定时,波后粒子速度为 5.3 km/s,约为冲击速度的 1/2,与理论值比较吻合,说明模拟结果是比较准确的。

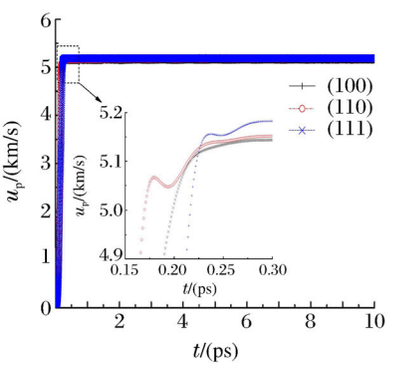


图 4　不同晶面的 u_p-t 曲线

Fig. 4　u_p-t curves for different crystal planes

随着冲击时间的变化,冲击物质的体系温度与压强成正比例增长。从图 5 可以看出,当冲击的体系达到平衡态后,温度与压强没有明显的变化,并在一个区域内小幅波动,可认为是一个稳定的值。在同一压强条件下,冲击(100)晶面的温度小于冲击(110)、(111)晶面体系的温度。

从图 6 中可得出以下结论,随着冲击波波速的增大,压强不断增大,原子体积减小,在冲击载荷作用下,当系统平衡后,压强与原子体积成反比例关系。

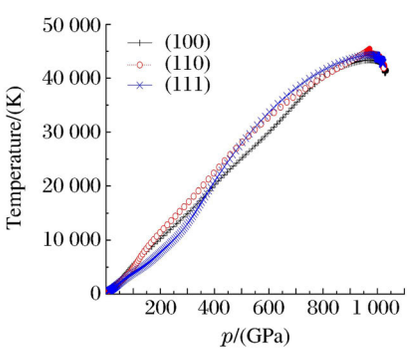


图 5　不同晶面压强与温度的关系

Fig. 5　The relationship between the pressure and temperature of the different crystal planes

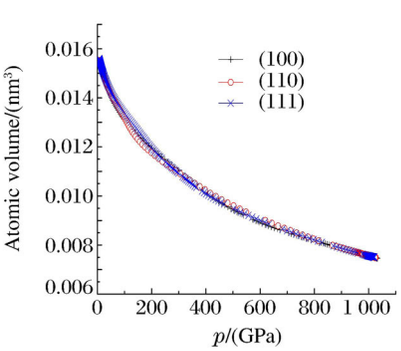
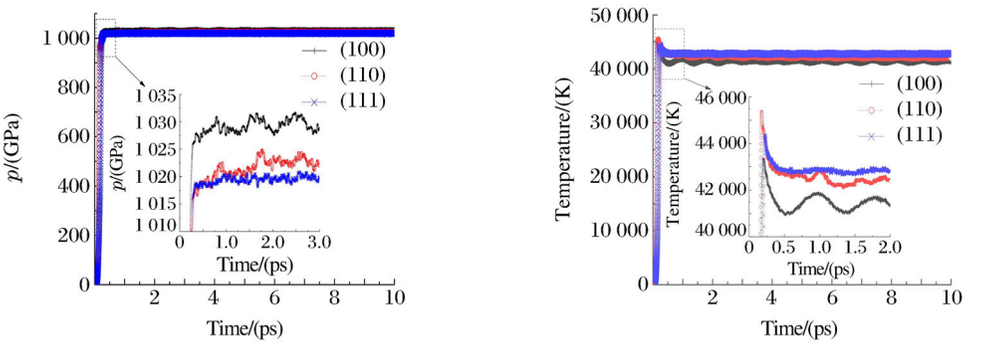


图 6　不同晶面原子体积与压强的关系

Fig. 6　The relationship between the atomic volume and pressure of the different crystal planes

图 7(a)显示的是,当冲击波波速为 11 km/s 时 3 个晶面冲击体系中压强随时间的变化曲线。在同一时刻,冲击(100)晶面产生的压力大于冲击(110)与(111)晶面产生的压力,差值大约为 10 GPa,而冲击(110)与(111)晶面产生的压力差值变化比较小。图 7(b)显示的是,当冲击波波速为 11 km/s 时冲击(100)、(110)与(111)晶面体系中温度随时间的变化关系。对比图 7(a)和图 7(b)可以看出,压强较高的晶面其温度较低,动能的贡献小于势能的贡献。由此可以看出,不同晶面的冲击可以得到不同状态对应的热力学参量,对于研究钨合金在相同冲击载荷下表现的不同冲击塑性行为有一定的意义。



(a) Pressure (b) Temperature

图 7 不同晶面的温度和压强随时间的变化曲线

Fig. 7 The curves of the pressure and temperature changing with the time of the different crystal planes

图 8 显示的是,在冲击波作用下不同晶面径向函数的分布情况。从图 8 可以明显看出,在冲击波作用下,随着温度的增加,其波峰逐渐变缓并下降,说明因温度的升高,能量不断积聚,晶格振动的能力加强,其原子的无序度也在增加。对于冲击不同晶面体系条件下,随着时间的变化,波峰越来越小,进一步说明原子的无序度不断增大。

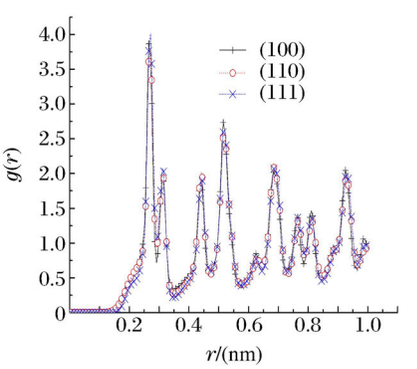


图 8 径向分布函数 $g(r)$的变化趋势

Fig. 8 The changing trend of radial distribution function $g(r)$

6 结 论

利用分子动力学方法研究高速冲击钨合金不同晶面塑性行为。首先,低速冲击钨合金体系,将得到的冲击数据与实验数据进行对比,验证了本研究中的 EAM 势函数适合研究该类问题;其次,建立了传统的钨合金(100)、(110)和(111)晶面模型体系,在 11 km/s 的高速冲击下分别建立了模型;第三,对模拟得到的冲击数据进行分析,得到了在高速冲击条件下,冲击钨合金的热物理学参量,以及参量之间的关系,随着冲击波波速的增加,波后粒子速度、温度和压强均升高,原子体积减小,固体的无序化增强。

以上结论中,低速冲击模拟结果与实验数据比较吻合,便于将其扩展到高速冲击领域,也可以定性地说明钨合金在冲击载荷作用下,热力学参量的变化规律和发生相变的主要机理,为进一步研究存在缺陷的钨及其合金提供了一定的基础,也为航空航天飞行器的高速碰撞提供了比较有价值的热力学数据,具有一定的参考价值。

References:

[1] Xu Y L, Zhao C J, Qian X Z. Introduction to Nanomaterials [M]. Shanghai: East China University of Science and Technology Press, 2008: 10. (in Chinese)
徐云龙,赵崇军,钱秀珍. 纳米材料学概论 [M]. 上海:华东理工大学出版社,2008:10.

[2] Zhou Y X, Wang Y, Mallick P K, et al. Strain softening constitutive equation for tungsten heavy alloy under tensile impact [J]. Mater Lett, 2004, 58: 2725-2729.

[3] Liu H Y, Song W D, Ning J G. Dynamic behavior of tungsten alloys with different grain sizes [J]. Journal of Materials Engineering, 2007(6): 3-6. (in Chinese)
刘海燕,宋卫东,宁建国. 不同晶粒度钨合金动态力学性能研究 [J]. 材料工程,2007(6):3-6.

[4] Li N, Li Y L, Guo W G. Study on the mechanical behaviors and microcosmic damage of two tungsten alloys [J]. Ordnance Material Science and Engineering, 2009, 32(4): 99-103. (in Chinese)
李　娜,李玉龙,郭伟国. 两种钨合金材料力学行为及微观损伤研究 [J]. 兵器材料科学与工程,2009,32(4):99-103

[5] Pink E, Kumar S. Deformation mechanisms operating in a tungsten heavy alloy [J]. Mater Sci Eng: A, 1997, 234-236: 102-105.

[6] Kumar S, Pink E. Dynamic strain aging in a tungsten heavy metal [J]. Script Mater, 1996, 35(9): 1047-1052

[7] Frenkel D, Smit B. Understanding Molecular Simulation－From Algorithms to Applications [M]. Translated by Wang W C, et al. Beijing: Chemical Industry Press, 2002. (in Chinese)
Frenkel D, Smit B. 分子模拟——从算法到应用 [M]. 汪文川,等译. 北京:化学工业出版社,2002.

[8] Tao J, Yao Z J, Xue F. Fundamentals of Materials Science [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2006. (in Chinese)
陶　杰,姚正军,薛　烽. 材料科学基础 [M]. 北京:化学工业出版社,2006.

[9] Meyers M A. Dynamic Behavior of Macerials [M]. Translated by Zhang Q M, Liu Y, Huang F L, et al. Beijing: National Defense Industry Press, 2006. (in Chinese)
迈耶斯 M A. 材料的动力学行为 [M]. 张庆明,刘　彦,黄风雷,等译. 北京:国防工业出版社,2006.

Molecular Dynamic Simulation on Shock Plasticity Behaviour of Tungsten Alloy

YU Chao, REN Hui-Lan, NING Jian-Guo

(*State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: The tungsten alloy melting behaviors under high-velocity shock loading is investigated by Molecular Dynamic (MD) method combined with Embedded Atom Method (EAM) potential of tungsten alloy. First, the shock model of tungsten alloy is set up and the numerical simulations of lattice planes (100), (110), (111) under the shock loadings with the same velocity are conducted respectively. The Hugoniot curve and the relative data of pressure, temperature, volume and particle velocity behind the shock wave are obtained. Based on the analyses of the data and the curve, it is found that the shock pressure is in proportion to the shock temperature and inversely proportional to the shock volume. The above conclusions fit to experimental data well when the loading velocity is low, which are extended to the high-velocity impact field. The calculations show the plasticity of tungsten under high-velocity impact in qualitative description.

Key words: tungsten alloy; shock induced phase transition; molecular dynamic; Hugoniot; numerical simulation