

بررسی تأثیر هندسه و اندازه حفره بر انتشار موج شوک در جسم جامد به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

فرهاد ستوده^۱، سید عباس سادات سکاکی^۲، علی رجب‌پور^{۳*}، منصور خانکی^۴

۱- کارشناس ارشد، ۲ و ۳- استادیار دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره) - قزوین

(تاریخ وصول: ۹۴/۷/۱۳، تاریخ پذیرش: ۹۴/۱۰/۲۶)

چکیده

در این تحقیق اثر وجود حفره‌ها در عبور موج ناشی از شوک در آرگون جامد و تأثیر آن بر افزایش دما به وسیله روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. جسم مورد مطالعه یک جسم جامد غیر واکنشی است که اتم‌ها با پتانسیل دو جسمی باکینگهام یا یکدیگر برهمکنش می‌کنند. موج ناشی از شوک توسط حرکت یک پیستون با سرعت‌های متفاوت در جسم ایجاد می‌شود که باعث افزایش ناگهانی دما بلافاصله بعد از انتشار شوک در جسم می‌گردد. سرعت موج شوک ایجاد شده در تطابق خوبی با نتایج تجربی و منحنی هوگونیوت بود. همچنین در این تحقیق نشان داده شد که وجود حفره با هندسه و سایز متفاوت باعث می‌شود تا با سرعت پیستون کمتر (آستانه آغازگری کمتر) همان میزان افزایش دما توسط موج شوک حاصل گردد.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، موج شوک، نقاط داغ، حفره، آستانه آغازگری.

Effect of Geometry and Size of Void on Shockwave Propagation in a Solid Using Molecular Dynamics Simulation

F. Sotoudeh, S. A. Sadatsakkak, A. Rajabpour*, M. Khanaki

Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran

(Received: 10/5/2015, Accepted: 1/16/2016)

Abstract

In this study, the effect of voids on shockwave propagation in solid argon is investigated by molecular dynamics simulation. The case study is a non-interactive solid modeled by Buckingham potential function. The shockwave is generated using the motion of a piston with different velocities in the solid that leads to increase the temperature after its propagation. The resulted shockwave velocity is in good agreement with the experimental data and the Hugoniot curve. It is also found that voids with different geometries and sizes lead to have the same temperature increment with less initiation piston velocity (less threshold initiation).

Keywords: Molecular Dynamics Simulation, Shockwave, Hot Spots, Void, Threshold Initiation.

۱- مقدمه

مطالعه موج شوک یک روش شناخته شده برای شناخت رفتار مواد تحت شرایط بحرانی (دما و فشار بالا) است. پدیده عبور موج شوک در جامدات و کاربردهای آن دارای تاریخچه‌ای طولانی است [۱-۳]. موج شوک برای درک رفتار مواد در حالتی که کاملاً از وضعیت تعادل خود دور شده‌اند اهمیت خاصی دارد، چرا که موج شوک دو وضعیت متفاوت در جامد که همان وضعیت قبل و پس از عبور شوک است را به هم‌دیگر متصل می‌کند. در دو دهه گذشته شبیه‌سازی‌های مقیاس اتمی برای فهمیدن فیزیک حاکم و کمک به تفسیر آزمایش‌های تجربی مشاهده شده در موج شوک به طور گسترده‌ای استفاده شده‌اند. شبیه‌سازی‌های مقیاس اتمی دارای قابلیت‌هایی هستند که تقریب‌های عددی در مقیاس ماکروسکوپی قادر به انجام آن نیستند. در این روش‌ها برای تحلیل عبور موج شوک به معادلات حالت نیاز هست. این معادلات حالت معمولاً از انجام آزمایش‌های تجربی با هزینه‌های زیاد حاصل می‌شوند. برای نمونه نلیس و همکاران با استفاده از تفنگ گازی با ایجاد سرعت‌هایی در محدوده 4-8km/s معادلات حالت هگونیوت را در جامداتی نظیر مس، آلومینیوم و تانتال محاسبه کردند [۳]. شبیه‌سازی‌های مقیاس اتمی می‌توانند بدون صرف هزینه‌های زیاد، معادلات حالت را با تقریب خوبی پیش‌بینی کنند. به عنوان مثال، برینگا و همکاران به کمک شبیه‌سازی مقیاس اتمی توانستند معادله حالت جامد مس را در تقریب خوبی با نتایج تجربی پیش‌بینی کنند [۴]. در روش‌های ماکروسکوپی جزئیات فیزیک انتشار موج در جسم قابل مشاهده 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 رایانه‌ای است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده 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 است [۵].

معمولاً برای مدل‌سازی انتشار موج شوک که پس از آن پدیده‌های همچون انتقال فاز [۶-۹]، شکست [۱۰ و ۱۱] و تشکیل ناهنجاری‌ها [۱۲ و ۱۳] رخ می‌دهد، روش دینامیک مولکولی به کار گرفته می‌شود. شبیه‌سازی

دینامیک مولکولی از انتهای دهه هفتاد (قرن بیستم) به عنوان یک آزمایشگاه مجازی موج شوک به کار گرفته شده است و دانشمندان با در دست داشتن این ابزار قادر به آزمایش مواد تحت شرایط خاص بوده‌اند. تلاش‌های اولیه بر روی موادی با کاربردهای زیاد مثل آهن متمرکز شده بود. در سال ۱۹۷۹، هولیان و استراب [۱۴] با استفاده از تابع پتانسیل لنارد جونز شبیه‌سازی سه‌بعدی 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-هگونیوت بود نشان داد. در سال ۱۹۸۰ مقایسه‌ای بین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی با توصیف مکانیک محیط‌های پیوسته‌ی نویر استوک از موج شوک توسط هولیان و همکاران انجام شد [۱۵]. در سال ۱۹۸۸، هولیان [۱۶] با استفاده از تابع پتانسیل لنارد جونز نشان داد که کاهش تنش برشی در نتیجه باز آرایشی اتم در پشت جبهه‌ی شوک اتفاق می‌افتد.

دو دهه پس از آغاز به‌کارگیری دینامیک مولکولی در شبیه‌سازی انتشار موج شوک، تلاش‌هایی برای مدل‌سازی تغییر شکل پلاستیک ناشی از موج شوک انجام شد. در سال ۱۹۹۸، 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 [۱۶]. لویولا [۱۰] و همکاران یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را بر روی آرگون جامد برای بررسی تغییرات خواص فیزیکی و ترمودینامیکی حاصل از انتشار موج شوک انجام دادند. آن‌ها مکانیزم شکست حاصل از انتقال موج در آرگون جامد را توصیف کردند.

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 پرش دمایی به دست آمده از این روش را با یک مدل ساده مقایسه کردند تا نشان دهند که چگونه نقاط داغ^۱ می‌تواند تحت شرایط موج شوک تولید شود [۱۷].

روند اساسی ناپایداری ناشی شده از شوک برای مواد، به ویژه انفجار مواد پرنرژ، هنوز مبهم است. زبین و همکاران [۱۸] این فرآیند را در اندازه اتمی، روی یک مدل واقع‌بینانه از یک ماده منفجره‌ی پلیمری که شامل ۳۶۹۵۳۷۵ اتم بود انجام دادند. آن‌ها با ایجاد نقص‌هایی در ماده، وقوع نقاط داغ را نشان دادند که باعث افزایش درجه حرارت شده و برای مواد پرنرژ این افزایش درجه حرارت باعث فعال‌تر شدن واکنش شیمیایی می‌شود که در نهایت انفجار در ماده مورد نظر صورت می‌گیرد. آن‌ها همچنین نشان دادند که با کاهش جرم مخصوص بستر پلیمری، نقاط داغ از بین می‌رود. فومن و همکاران با روش دینامیک

$$F_i = \frac{-\partial \sum_{i < j} \varphi(r)}{\partial r_i} \quad (۴)$$

که در رابطه فوق r فاصله میان دو اتم با اندیس i و j است و φ تابع پتانسیل حاکم بر ذرات است. برای محاسبه نیروهای بین مولکولی در این پژوهش، از پتانسیل باکینگهام استفاده شده است. تابع پتانسیل باکینگهام از نوع پتانسیل‌های جفت-جفت است که اتم‌های برهم‌کنش‌کننده با زمان تغییر می‌کنند. پتانسیل باکینگهام، طرد پائولی و انرژی واندروالسی را برای اندرکنش دو اتم که مستقیماً به عنوان تابعی از فاصله بین اتمی r_{ij} پیوند ندارد توصیف می‌کند. در این رویکرد انرژی پتانسیل، φ_{ij} بین دو اتم i و j با معادله (۵) توصیف می‌شود.

$$\varphi(r) = D_1 e^{-\left(\frac{r}{r_0}\right)} - \frac{D_2}{r^6} \quad (۵)$$

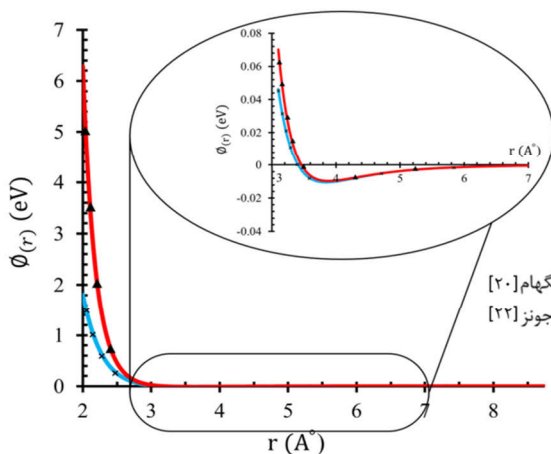
که در آن r فاصله بین اتم‌ها و ثابت‌های r_0, D_1, D_2 مقادیر ذیل هستند:

$$D_1 = 6127.097 \text{ eV}$$

$$D_2 = 61.5497 \text{ eV } \text{Å}^6$$

$$r_0 = 0.285 \text{ Å}$$

دو جمله مثبت و منفی سمت راست معادله (۵) به ترتیب متعلق به انرژی‌های جذب و دفع می‌باشند. نمودار این تابع پتانسیل در شکل (۱) نشان داده شده است. همچنین تابع پتانسیل لنارد-جونز (LJ) نیز برای مقایسه در کنار تابع پتانسیل باکینگهام نشان داده شده است. 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 فشرده‌گی 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 شده است [۲۰ و ۲۲]. تابع پتانسیل باکینگهام برای جامدهای گاز نجیب در دیگر شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به کار رفته است [۱۰ و ۲۳].



شکل ۱- رفتار تابع پتانسیل بر حسب فاصله بین اتمی برای دو تابع پتانسیل باکینگهام و لنارد-جونز [۲۰ و ۲۲]

مولکولی به بررسی نفوذ اثر حرارتی 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 تخریب شده را مشاهده کردند و داده‌های به دست آمده از دینامیک مولکولی را با معادلات بقای حاکم بر انفجار مقایسه کردند [۱۹].

در این پژوهش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای شناسایی تأثیر حفره به عنوان یکی از مکانیسم‌های آغازگری، در ایجاد هرچه بهتر نقاط داغ برای فعال‌سازی واکنش شیمیایی در نتیجه انتقال موج شوک در یک ماده (آرگون جامد) انجام می‌شود و همچنین در مورد سایز و هندسه حفره بحث می‌شود که تا کنون مورد مطالعه قرار نگرفته است. لازم به ذکر است اگرچه که برخورد موج شوک با حفره توسط هولیان و همکاران [۱۷] به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است، ولی تأثیر قابل توجه هندسه‌های مختلف حفره توسط آن‌ها مورد پژوهش قرار نگرفته است. در این تحقیق برای اعتبارسنجی نتایج، ابتدا منحنی رنگین-هوگونیوت آرگون جامد استخراج و با نتایج تجربی موجود مقایسه می‌گردد. برای انجام یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جامع نیاز به شناخت مفهومی از طبیعت ماده وجود دارد. این اطلاعات به ما در انتخاب یک تابع پتانسیل مناسب برای شبیه‌سازی کمک می‌کند. در اینجا عنصر آرگون به عنوان نمونه تحت موج شوک انتخاب شده است تا با ساده‌سازی شبیه‌سازی، فیزیک حاکم بر مسئله بهتر درک گردد. از سوی دیگر این ماده، یک ماده رایج است که در محدوده‌ی وسیعی خواص آن در فازهای مختلف به صورت تجربی مطالعه شده است [۲۰ و ۲۱].

۲- 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 پرکاربردترین این الگوریتم‌ها، الگوریتم سرعت ولت است [۵] که در آن سرعت و موقعیت هر ذره بدین صورت محاسبه می‌شود:

$$r_i(t+dt) = r_i(t) + v_i(t)dt + \frac{1}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} dt^2 \quad (۱)$$

$$v_i\left(t + \frac{dt}{2}\right) = v_i(t) + \frac{dt}{2} \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (۲)$$

$$v_i(t+dt) = v_i\left(t + \frac{dt}{2}\right) + \frac{dt}{2} \frac{F_i\left(t + \frac{dt}{2}\right)}{m_i} \quad (۳)$$

در این رابطه r_i, v_i, F_i, m_i به ترتیب موقعیت، سرعت، نیرو و جرم ذره i هستند 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 می‌شود و نیروی وارد بر ذرات در زمان $(t+dt)$ با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل φ_{ij} حاصل می‌شود [۵].

۳- محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی

بعد از انتگرال‌گیری معادلات حرکت و به دست آوردن موقعیت مکانی و سرعت ذرات در هر لحظه، کمیت‌های ترمودینامیکی مورد نیاز شامل چگالی، دما، فشار و تابع توزیع شعاعی^۱ محاسبه می‌گردند.

۳-۱- چگالی

برای محاسبه چگالی جعبه شبیه‌سازی را به تعداد ۲۵ سلول محاسباتی تقسیم و چگالی به صورت شمارش تعداد ذرات در هر سلول محاسباتی در گام‌های پی‌درپی 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.

۳-۱-۱- تابع توزیع شعاعی

در مباحث مکانیک آماری، تابع توزیع شعاعی در یک سیستم ذرات بیانگر تغییرات چگالی بافاصله از یک ذره مرجع است و از رابطه زیر قابل محاسبه است [۵]:

$$g(r) = \frac{n(r)}{\rho 4\pi r^2 \Delta r} \quad (6)$$

۳-۲- دما

در محاسبه دما از رابطه انرژی جنبشی با دما استفاده می‌شود [۵]:

$$T_z = \frac{1}{3NK} \sum_{i=0}^N (v_{i,z} - v_z)^2 \quad (7)$$

که در آن N تعداد ذرات و v_i سرعت ذره i در سلول شبیه‌سازی است. کمیت K نیز معرف ثابت بولتزمن^۲ است. این رابطه 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.

۳-۳- فشار

برای محاسبه فشار ترم‌های تانسور تنش به دست آمده در سه راستای x ، y و z با یکدیگر جمع شده، کمیت اسکالر اول به دست می‌آید. مقدار فشار هیدرو استاتیک برابر خواهد بود با این مقدار تقسیم بر ۳:

$$P = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (8)$$

محاسبه تنش در بررسی‌های اتمی با استفاده از تعریف ویرال^۳ انجام می‌گیرد [۵].

$$\sigma = \frac{1}{2V} \left(\sum_{i,j \neq i}^N r_{ij} \times f_{ij} \right) \quad (9)$$

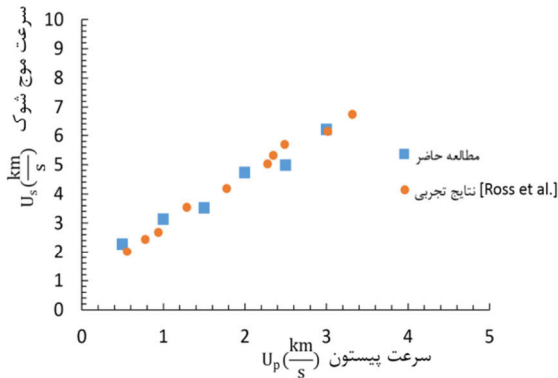
۴- انتشار موج شوک

شبیه‌سازی در یک مکعب به ابعاد $L_x=L_y=L_z=63.6 \text{ \AA}$ و $L_x=477 \text{ \AA}$ با 51840 اتم با شبکه بلوری FCC و جرم مخصوص $\rho = 1.78 \text{ kg/m}^3$ انجام شده است. 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 لمپس^۴ انجام شده است. لمپس یک بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی است که در آزمایشگاه ملی ساندا^۵ ایجاد و توسعه داده شده است. این بسته نرم‌افزاری آزاد و متن باز است و با مجوز GPL در دسترس عموم قرار دارد [۲۳]. لازم به ذکر است که خروجی این نرم‌افزار تنها داده‌های عددی هست و برای پس‌پردازش داده‌ها، کدهای عددی جداگانه‌ای نوشته شده است.

ابتدا نمونه‌ی مورد نظر برای ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی در هنگرد NPT با تنش صفر در دمای 5K به تعادل رسانده می‌شود که هر گام زمانی یک فمتوثانیه هست ($\Delta t = 1 \text{ fs}$) و سپس این دما تا انتهای زمان شبیه‌سازی آزاد می‌شود. مطابق شکل (۲) جعبه‌ی شبیه‌سازی به ۲۵ شبکه‌ی مساوی در راستای z تقسیم شده است. نتایج شبیه‌سازی با استفاده از میانگین‌گیری متغیرهای هنگرد در این شبکه‌ها به دست آمده است. شرایط مرزی به این نحو است که به منظور ایجاد موج شوک در نمونه یک پیستون شامل سه لایه اتمی که شامل ۱۰۱۴ اتم است در راستای z در یک طرف جعبه 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 یک سرعت ثابت به پیستون در مدت ۴۰۰۰ گام زمانی و سپس بعد از متوقف کردن پیستون در این زمان، تولید می‌شود. در این روش جبهه‌ی موج شوک ایده آل تشکیل می‌شود و از یک انتها به انتهای دیگر نمونه پیشروی می‌کند و همچنین یک موج انعکاس^۶ در جهت مخالف توسعه یافته و حرکت می‌کند. موج شوک حاصل به وسیله‌ی یک جبهه‌ی شوک صفحه‌ای که با سرعت ثابت طول ماده را طی می‌کند مشخص می‌شود، بنابراین با در نظر گرفتن سرعت پیستون به مقدار $U_p = 0.5 \text{ km/s}$ مشاهده می‌گردد که یک موج شوک با سرعت بیشینه $U_s = 2.27 \text{ km/s}$ در نمونه ایجاد می‌گردد. جبهه‌ی شوک یک پرش در خواص مکانیکی و ترمودینامیکی ماده ایجاد می‌کند و در سراسر نمونه حرکت می‌کند. البته به علت اینکه پیستون بعد از مدتی متوقف می‌شود، سرعت جبهه‌ی موج شوک در طی زمان کاهش پیدا می‌کند و از یک موج شوک، تبدیل به یک موج صوتی خواهد شد. روند پیشرفت جبهه موج شوک را می‌توان در شکل (۳) مشاهده کرد که نشان‌دهنده تفاوت جرم مخصوص بین جبهه‌ی موج شوک و قسمتی که هنوز موج به آن نرسیده، است.

4- Lammms
5- Sandia National Laboratories
6- Rarefaction Wave

1- RDF (Radial Distribution Function)
2- Boltzmann Constant
3- Virial

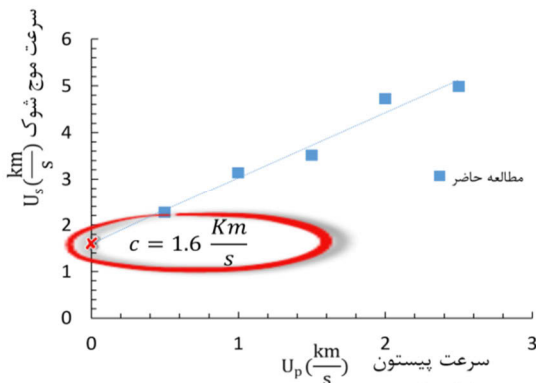


شکل ۴- سرعت موج شوک (U_s) بر حسب سرعت پیستون (U_p).

این منحنی برای ساختن معادله حالت ماده به کار می‌رود. در یک رژیم قوی شوک معمولاً رابطه‌ی زیر برقرار است:

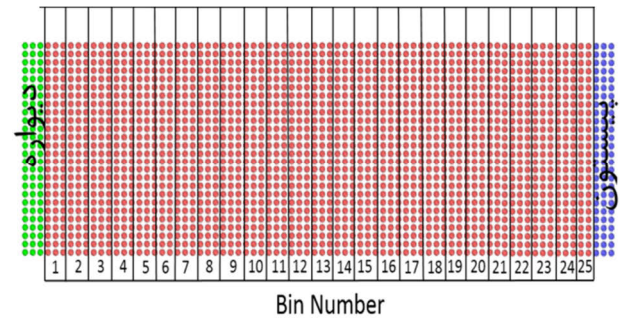
$$U_s = c + S U_p \quad (10)$$

که S و C ثابت هستند. نظریه مکانیک محیط پیوسته پیش‌بینی می‌کند که در محدوده‌ی سرعت‌های بسیار کوچک پیستون، سرعت موج باید به سرعت صوت در ماده شوک نزده برسد [۲۶]. بنابراین در رابطه‌ی (۱۰) ثابت C بیان‌گر سرعت صوت است. همچنین پارامتر S یک ثابت در محدوده‌ی 0.5 تا $2/5$ است. برای به دست آوردن سرعت صوت در جامد آرگون می‌توان از رابطه خطی میان سرعت موج شوک و سرعت پیستون بهره برد (شکل ۵) که با یافتن عرض از مبدا (محل برخورد منحنی برون‌یابی شده با محور افقی) آن می‌توان سرعت صوت در جامد آرگون را به دست آورد.

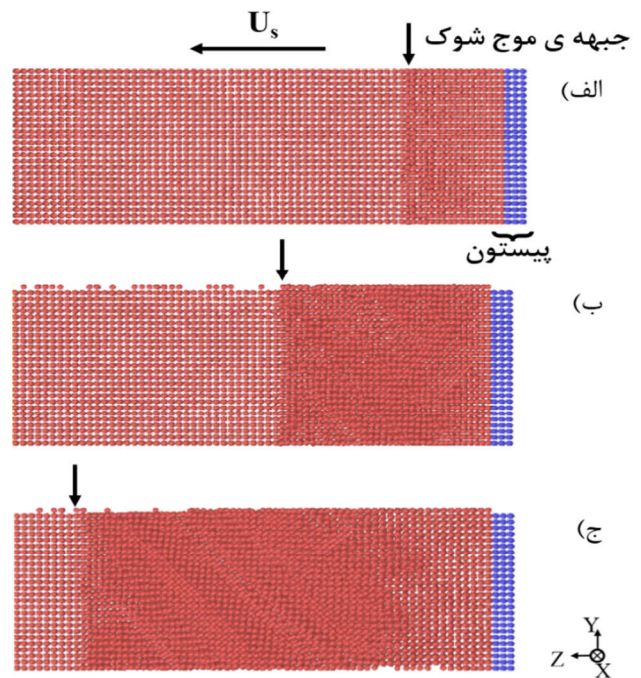


شکل ۵- رابطه خطی میان سرعت موج شوک و سرعت پیستون (عرض از مبدا منحنی نمایانگر سرعت صوت در جامد است).

اگر تبدیل فاز اتفاق بیفتد شیب منحنی U_s-U_p تغییر می‌کند که می‌تواند برای تشخیص پدیده تغییر فاز به کار رود. با ترکیب معادلات بقای جرم، ممنتوم و انرژی (به ترتیب معادله‌های ۱۱ تا ۱۳)، می‌توان خواص ترمودینامیکی بعد از عبور موج شوک را بر حسب خواص قبل از عبور موج شوک به دست آورد [۲۷].



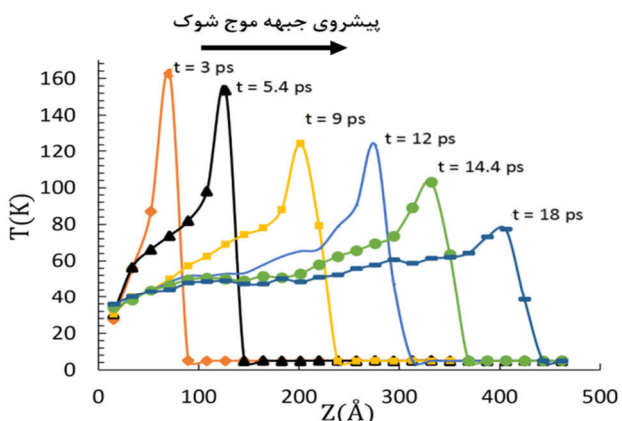
شکل ۲- تقسیم‌بندی جعبه شبیه‌سازی به تعداد ۲۵ جعبه کوچک^۱ برای محاسبه پارامترهای مورد نظر.



شکل ۳- تصاویر عبور موج شوک (بعد از ضربه پیستون) از یک طرف نمونه به انتهای دیگر در سه زمان مختلف. (الف) نمونه در زمان 2ps. (ب) موج شوک در حال عبور از نمونه در زمان 4ps (زمان متوقف شدن پیستون). (ج) موج شوک در حال عبور از نمونه در زمان 7ps.

برای ارزیابی صحت عملکرد شبیه‌سازی، مدل با چندین اجرا با سرعت‌های متفاوت پیستون انجام شد و چندین سرعت موج شوک تولید شد. تکرار شبیه‌سازی‌ها با تعداد ذرات و طول نمونه‌ی متفاوت، رفتار مشابهی را برای ماده نشان می‌دهد. داده‌های به دست آمده با این روش در شکل (۴) نشان داده شده است. این منحنی برای هر ماده منحصربه‌فرد است و منبعی برای به دست آوردن منحنی هوگونیت است که رابطه‌ی بین حالت ابتدا تعیین شده و حالت انتهای به دست آمده حاصل از تراکم شوک را نشان می‌دهد [۲۵]. نتایج تطبیق خوبی را با داده‌های تجربی منحنی هوگونیت نشان می‌دهد.

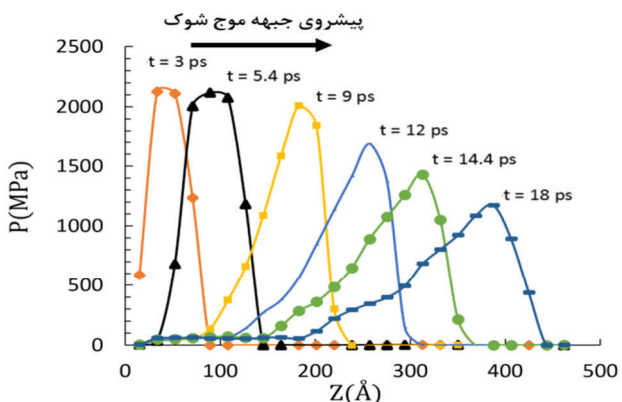
این پیک با پیشروی موج به تدریج کاهش می‌یابد که علت آن همان طور که ذکر گردید به دلیل کاهش قدرت موج و انتشار موج عقب رو است. همچنین مقدار دما در پس از عبور شوک در ماده به محدوده دمایی ۵۰ تا ۷۰ کلوین رسیده است. لازم به ذکر است که برای محاسبه دما، از میانگین انرژی جنبشی اتم‌های هر ناحیه که سرعت مرکز جرم از آن کاسته شده است، استفاده گردیده است.



شکل ۷- توزیع دما در راستای Z در زمان‌های مختلف.

شکل (۸) تغییرات فشار را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می‌دهد. همان طور که مشخص است موج شوک باعث رسیدن حداکثر فشار به مقدار 2126 MPa در نمونه می‌شود. این مقدار، همانند آنچه برای دما مشاهده شد، با پیشروی موج شوک کاهش می‌یابد با این تفاوت که مقدار فشار پس از عبور شوک برخلاف 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 14.4ps در انتهای نمونه عریض شده و رفته‌رفته از یک موج شوک به یک موج صوتی در حال تبدیل است. در یک ماده منفجره واقعی، دما و فشار افزایش یافته در اثر عبور موج شوک باعث آغازگری واکنش شیمیایی شده که منجر به انفجار و آزادسازی انرژی می‌گردد.



شکل ۸- توزیع فشار در راستای Z در زمان‌های مختلف.

$$V = V_0 \left(1 - \frac{U_p}{U_s} \right) \quad (11)$$

$$P = P_0 + \rho_0 U_p U_s \quad (12)$$

$$E = \frac{1}{2} (P - P_0) (V_0 - V) \quad (13)$$

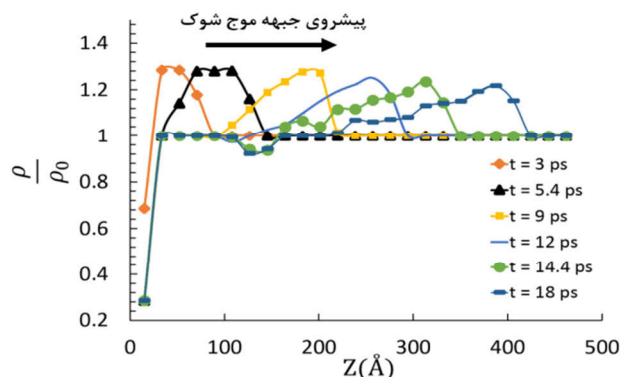
در معادلات فوق V ، P ، ρ و E به ترتیب حجم، فشار، جرم مخصوص و انرژی درونی هستند که اندیس 0 نمایانگر خواص قبل از عبور موج شوک است. پس از بررسی اعتبار مدل دینامیک مولکولی چندین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برای مطالعه‌ی تأثیر حفره در انتشار موج شوک در آرگون انجام شد. فرآیند تشکیل موج شوک و تغییرات خواص مکانیکی و ترمودینامیکی پس از جبهه‌ی شوک بررسی شد. نتایج در بخش بعد ارائه شده است.

۵- نتایج و بحث

۵-۱- ماده بالک

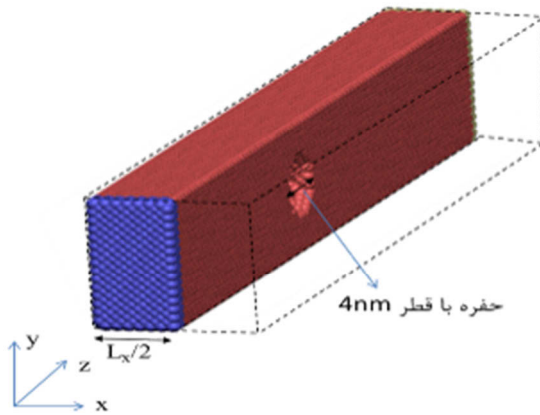
در این قسمت، با توجه به انتشار موج شوک در نمونه، تغییرات جرم مخصوص، دما، فشار، سرعت متوسط ذرات و تابع توزیع شعاعی برای ماده‌ای بالک (بدون وجود حفره)، ارائه می‌شوند. شکل (۶) تغییرات جرم مخصوص به جرم مخصوص اولیه (ρ / ρ_0) را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود مقدار جرم مخصوص ابتدا افزایش پیدا می‌کند به طوری که تقریباً ۱.۳ برابر مقدار اولیه‌ی خود می‌رسد. شکل (۶) تغییرات عرض جبهه‌ی موج شوک و هم پیشروی موج شوک را در نمونه نشان می‌دهد. قابل توجه است که چون در مواجهه با موج مافوق صوت هستیم، چگالی در جلوی موج شوک تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. از طرفی چون انرژی موج شوک در حال کاهش است، مقدار پیک در حال کاهش و عرض آن در حال گسترش است. حدوداً در فاصله 150 Å مقدار نسبت چگالی از یک کمتر شده است که به علت انتشار موج رو به عقب است که باعث زوال قدرت موج شوک با گذشت زمان می‌شود و در نهایت آن را تبدیل به یک موج صوتی می‌کند.

شکل (۷) تغییرات دما را بر حسب انتشار موج شوک در نمونه نشان می‌دهد، همان طور که مشاهده می‌شود مقدار دما در نمونه از 5K با عبور موج شوک افزایش یافته و به مقدار پیک $T_{max} = 160$ K می‌رسد.

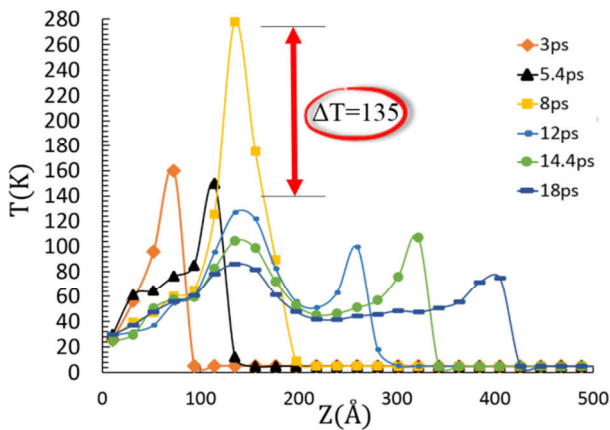


شکل ۶- توزیع چگالی در امتداد راستای Z در زمان‌های مختلف.

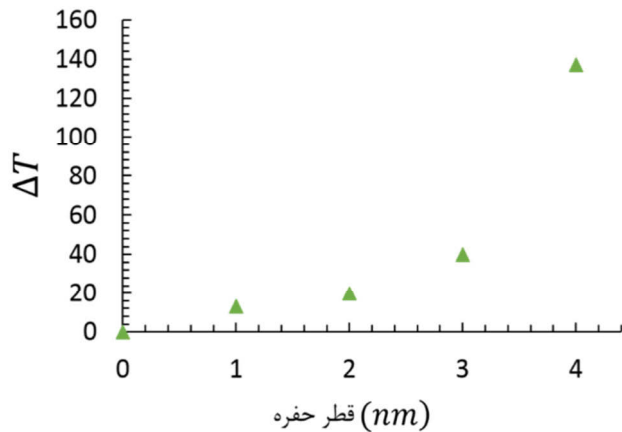
نانومتري است افزایش دمای ۱۳۵ کلویني را تجربه می‌کند. همچنین در شکل (۱۳) میزان افزایش دما با افزایش قطر حفره را به تصویر کشیده و نشان‌دهنده‌ی این موضوع است که با افزایش قطر حفره، افزایش دما بیشتر می‌گردد. این میزان افزایش دما ناشی از برخورد شدید شوک و سرعت گرفتن آنها و برخورد آنها با دیواره حفره است.



شکل ۱۱- نمای سه‌بعدی نمونه با موقعیت حفره.

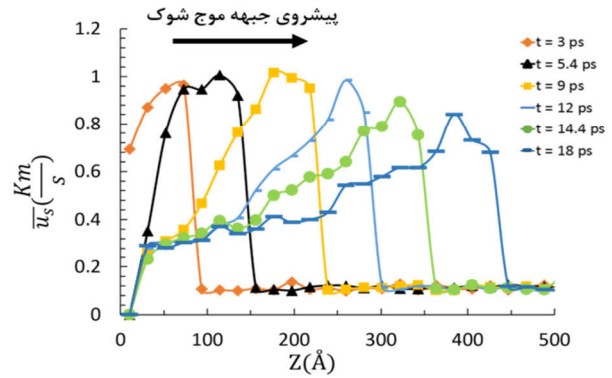


شکل ۱۲- توزیع دما در راستای Z در نمونه با حفره با قطر 4 nm.

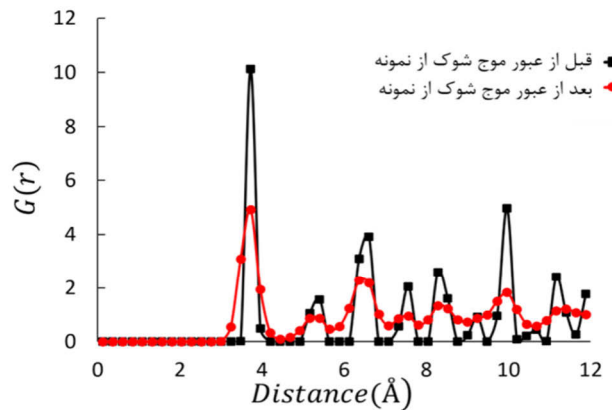


شکل ۱۳- دمای بیشینه بر حسب افزایش قطر حفره.

شکل (۹) نمودار سرعت متوسط ذرات در راستای انتشار موج شوک نشان داده شده است. به منظور بررسی ساختار بلوری پس از عبور موج شوک نمودار تابع توزیع شعاعی در قبل و بعد از عبور موج شوک در نمودار شکل (۱۰) نشان داده شده است. این نمودار بیانگر آن است که پس از عبور موج شوک ماده ساختار شبکه منظم خود را از دست داده است.



شکل ۹- سرعت متوسط ذرات در راستای انتشار موج شوک در موقعیت و زمان‌های مختلف



شکل ۱۰- نمودار تابع توزیع شعاعی آرگون در قبل و بعد از عبور موج شوک

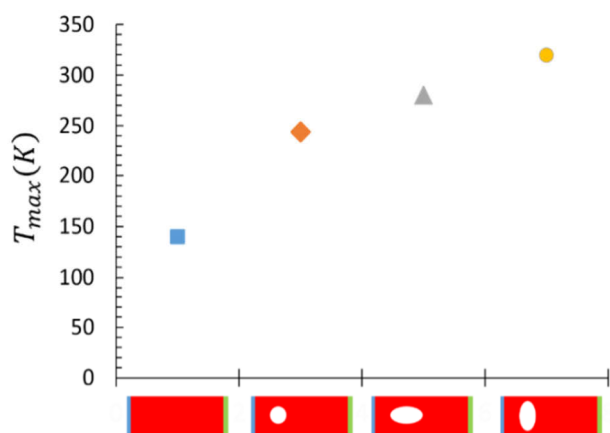
۲-۵- تأثیر حفره

۵-۲-۱- سائز حفره

در این بخش به بررسی تأثیر حفره‌ها در میزان افزایش دمای ناشی از شوک پرداخته می‌شود. برای این منظور در موقعیت $Z = 150 \text{ \AA}$ حفره به قطرهای $D = 1, 2, 3 \text{ \& } 4 \text{ nm}$ ایجاد کرده و مجدداً نمونه را تحت سرعت پیستون $U_p = 0.5 \text{ km/s}$ قرار می‌دهیم (شکل ۱۱). شکل ۱۲ نتایج توزیع دما بر حسب انتشار شوک برای قطر حفره $D = 4 \text{ nm}$ را نشان می‌دهد، همان طور که می‌بینیم در زمان 8ps دما به مقدار 277 K افزایش می‌یابد. همان طور که از شکل (۷) مشخص است در موقعیت ۱۵۰ آنگستروم در حالتی که حفره وجود ندارد دما تقریباً برابر ۱۴۰ کلوین است. بنابراین نمونه در حالتی که دارای حفره‌ی ۴

جدول ۱- اطلاعات هندسه‌ی حفره کروی و بیضی گون افقی و عمودی.

نمونه	$a(nm)$	$b(nm)$	$c(nm)$	$V(nm^3)$
بدون حفره	۰	۰	۰	۰
حفره کروی	۳/۸۷	۳/۸۷	۳/۸۷	۲۴۳/۷۳۵۲
حفره بیضی گون افقی	۳/۵	۳/۵	۴/۷۵	۲۴۳/۷۳۵۲
حفره بیضی گون عمودی	۴/۷۵	۳/۵	۳/۵	۲۴۳/۷۳۵۲



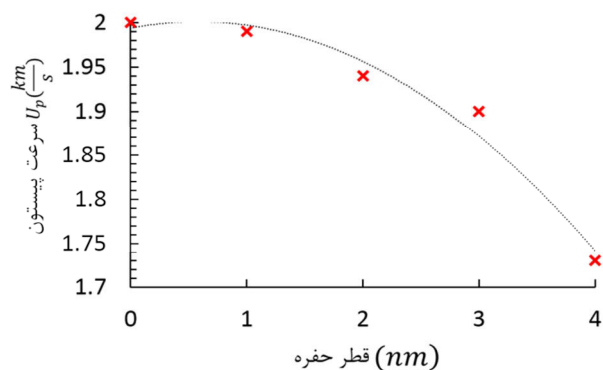
شکل ۱۶- مقایسه دمای بیشینه ایجادشده بر اساس هندسه حفره.

۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتشار شوک در یک جسم جامد مورد مطالعه قرار گرفته و منحنی‌های افزایش دما، فشار و چگالی را محاسبه شده است. همچنین نشان داده شد که وجود حفره باعث افزایش بیشتر دما در جامد می‌گردد. برای نمونه، در حالتی که جامد دارای حفره‌ی کروی با قطر ۴ نانومتر بود افزایش دمای ۱۳۵ کلون را نسبت به حالت بدون نقص تجربه کرد. همچنین نشان داده شد که این میزان افزایش دما نسبت مستقیمی با قطر حفره دارد به نحوی که با افزایش حجم حفره این میزان افزایش دما بیش تر می‌گردد و همچنین مشاهده شد که افزایش قطر حفره می‌تواند در کاهش آستانه آغازگری تأثیر بسزایی داشته باشد به نحوی که با سرعت تحریک پیستون کمتری به همان میزان افزایش دما در نمونه دست پیدا کرد و همچنین مشاهده شد که هندسه بیضی گون عمودی در ایجاد افزایش دمایی ایجادشده در نمونه عملکرد بهتری را از خود نشان می‌دهد. بنابراین ایجاد چنین حفره‌هایی و به تبع آن وقوع نقاط داغ در ماده، می‌تواند در کاربردهای مختلف موج شوک موثر باشد.

۵-۲-۲- تأثیر سایز حفره در آستانه آغازگری

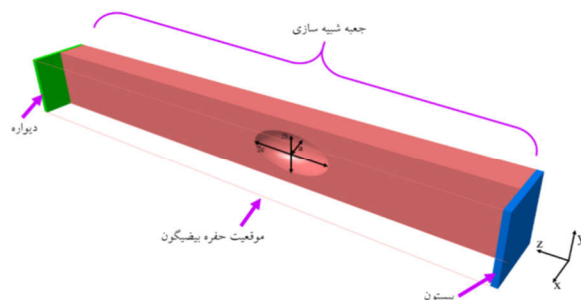
برای بررسی تأثیر حفره بر کاهش آستانه آغازگری چندین اجرا گذاشته شد. با توجه به توضیح بخش قبلی متوجه شدیم که؛ با افزایش شعاع حفره، نقاط داغ در داخل جسم ایجاد می‌گردد و این امر خود موجب فعال شدن واکنش شیمیایی می‌شود، در نتیجه تأثیر به سزایی در کاهش آستانه آغازگری دارد. برای بهتر نشان دادن این امر، ما به پیستون سرعت $U_p = 2 \text{ km/s}$ را دادیم و با ایجاد حفره و افزایش شعاع آن میزان افزایش دما را نسبت به حالتی که نمونه بدون حفره است را محاسبه کردیم. شکل (۱۴) مبین این پدیده می‌باشد که با افزایش قطر حفره، می‌توان با سرعت پیستون کمتر به همان افزایش دمای ماده بدون حفره دست پیدا کرد.



شکل ۱۴- کاهش آستانه آغازگری در اثر افزایش قطر حفره.

۵-۲-۳- تأثیر هندسه حفره بر میزان تغییرات در دمای بیشینه

به منظور بررسی هندسه حفره بر میزان تغییرات در دمای بیشینه، سه حفره با هندسه کروی، بیضی گون افقی و عمودی با حجم یکسان (مطابق جدول یک) در نمونه ایجاد کردیم. حال در این قسمت با بزرگ کردن جعبه‌ی شبیه‌سازی و تحریک کردن نمونه با سرعت پیستون $U_p = 0.5 \text{ km/s}$ نمودار توزیع دما را رسم کردیم (شکل ۱۵). در موقعیت حفره، افزایش دمایی نسبت به حالتی که نمونه بدون حفره می‌باشد، مشاهده شد. شکل (۱۶) میزان افزایش دما در موقعیت حفره را با توجه به هندسه حفره ایجادشده در نمونه، نمایش داده شده است. همان طور که مشاهده می‌کنید، حفره با هندسه بیضی گون عمودی دارای افزایش دمای ۳۰۰K را است.



شکل ۱۵- نمای از موقعیت حفره بیضی گون.

مراجع

- [13] Tanguy, D.; Mareschal, M.; Lomdahl, P. S.; Germann, T. C.; Holian, B. L.; Ravelo, R. "Dislocation Nucleation Induced by a shockwave in a Perfect Crystal: Molecular Dynamics Simulations and Elastic Calculations"; *Phys. Rev. B* 2003, 68, 144111.
- [14] Holian, B. L.; Straub, G. K. "Molecular Dynamics of Shockwaves in 3-Dimensional Solids Transition from Nonsteady to Steady Waves in Perfect Crystals and Implications for the Rankine-hugoniot Conditions"; *Phys. Rev. Lett.* 1979, 43, 1598-1600.
- [15] Holian, B. L.; Hoover, W. G.; Moran, B.; Straub, G. K. "Shock-wave Structure *via* Non-equilibrium Molecular Dynamics and Navier Stokes Continuum Mechanics"; *Phys. Rev. Lett. A* 1980, 22, 2798-2808.
- [16] Holian, B. L. "Modeling Shock-wave Deformation *via* Molecular Dynamics"; *Phys. Rev. Lett. A* 1988, 37, 2562-2568.
- [17] Holian, B. L.; Germann, T. C.; Maillet, J. B.; White, C. T.; Cetegen, B. M. "Atomistic Mechanism for Hot Spot Initiation"; *Phys. Rev. Lett.* 2002, 89, 285501.
- [18] An, Q.; Zybin, S. V.; Goddard, W. A.; Jaramillo-Botero, A.; Blanco, M.; Luo, Sh. N. "Elucidation of the Dynamics for Hot Spot Initiation at Nonuniform Interfaces of Highly Shocked Materials"; *Phys. Rev. B* 2011, 84, 220101(R).
- [19] Fomin, V. M.; Golovnev, I. F.; Utkin, A. V. "Influence of Molecular Characteristics of a Substance on Detonation Phenomena"; *Shock Waves* 2006, 15, 325-331.
- [20] Ross, M.; Mao, H. K.; Bell, P. M.; Xu, J. A. "The Equation of State of Dense Argon: a Comparison of Shock and Static Studies"; *J. Chem. Phys.* 1986, 85, 1028-1033.
- [21] Stishov, S.; Makarenko, I.; Ivanov, V.; Pedoslmov, V. "Melting of Argon at High Temperatures"; *J. Exp. Theor. Phys.* 1970, 11, 13-16.
- [22] Rowley, L. A.; Nicholson, D.; Parsonage, N. G. "Monte Carlo Grand Canonical Ensemble Calculation in a Gas-Liquid Transition Region for 12-6 Argon"; *J. Comput. Phys.* 1975, 17, 401-414.
- [23] LAMMPS is available at <http://lammps.sandia.gov>
- [24] Belonoshko, A. B. "Atomistic Simulation of Shock Wave Induced Melting in Argon"; *Science* 1997, 275, 955-957.
- [25] Ross, M. "Shock Compression and the Melting Curve for Argon"; *Phys. Rev. A* 1973, 8, No. 3.
- [26] Zel'dovich, Y. B.; Raizer, Y. P. "Physics of Shock waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena"; New York, 1967.
- [27] Cooper, P. W. "Explosives Engineering"; New York, Wiley, 1996.
- [1] Nellis, W. J.; Moriarty, J. A.; Mitchell, A. C.; Ross, M.; Dandrea, R. G.; Ashcroft, N. W.; Holmes, N. C.; Gathers, G. R. "Metals Physics at Ultrahigh Pressure: Aluminum, Copper, and Lead as Prototypes"; *Phys. Rev. Lett.* 1988, 60, 1414-1417.
- [2] Mitchell, A. C.; Nellis, W. J.; Moriarty, J. A.; Heinle, R. A.; Holmes, N. C.; Tipton, R. E.; Repp, G. W. "Equation of State of Al, Cu, Mo, and Pb at Shock Pressures Up to 2.4 TPa (24 Mbar)"; *J. Appl. Phys.* 1991, 69, 2981.
- [3] Nellis, W. J.; Mitchell, A. C.; Young, D. A. "Equation-of-State Measurements for Aluminum, Copper, and Tantalum in the Pressure Range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar)"; *J. Appl. Phys.* 2003, 93, 304.
- [4] Bringa, E. M.; Cazamias, J. U.; Erhart, P.; Stolken, J.; Tanushev, N.; Wirth, B. W.; Rudd, R. E.; Caturla, M. J. "Atomistic Shock Hugoniot Simulation of Single-Crystal Copper"; *J. Appl. Phys.* 2004, 96, 7.
- [5] Rapaport, D. C. "The Art of Molecular Dynamics Simulation"; Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [6] Kadau, K.; Germann, T. C.; Lomdahl, P. S.; Holian, B. L. "Microscopic View of Structural Phase Transitions Induced by Shock waves"; *Science* 2002, 296, 1681-1684.
- [7] Kadau, K.; Lomdahl, P. S.; Holian, B. L. "Atomistic Simulations of Shock Induced Transformations and Their Orientation Dependence in bcc Fe Single Crystals"; *Phys. Rev. B* 2005, 72, 064120.
- [8] Kadau, K.; Germann, T. C.; Lomdahl, P. S.; Holian, B. L. "Atomistic Simulations of Shock Induced Melting in Fe"; AIP Conference Proceedings, Baltimore, MD, 2006.
- [9] Liu, Z. L.; Yang, J. H.; Zhao, Z. G.; Cai, L. C.; Jing, F. Q. "The Anisotropy of Shock Induced Melting of Pt Observed in Molecular Dynamics Simulations"; *Phys. Lett. A* 2010, 374, 1579-1584.
- [10] Loyola, C.; Davis, S.; Peralta, J.; Gutierrez, G. "Onset of Failure in Argon by the Effect of a Shock wave: a Molecular Dynamics Study"; *Comput. Mater. Sci.* 2010, 49, 582-587.
- [11] Tanguy, D.; Mareschal, M.; Germann, T. C.; Holian, B. L.; Lomdahl, P. S.; Ravelo, R. "Plasticity Induced by a Shock wave: Large Scale Molecular Dynamics Simulations"; *Mater. Sci. Eng. A* 2004, 387-389, 262-265.
- [12] Germann, T. C.; Tanguy, D.; Holian, B. L.; Lomdahl, P. S.; Mareschal, M.; Ravelo, R. "Dislocation Structure Behind a Shock Front in fcc Perfect Crystals: Atomistic Simulation Results"; *Metal. Mater. Trans. A* 2004, 35, 2609-2615.