

冲击作用下金属表面微喷射的分子动力学模拟

陈 军^{1)†} 经福谦^{2)§} 张景琳¹⁾ 陈栋泉¹⁾

¹⁾北京计算物理与应用数学研究所计算物理实验室,北京 100088)

²⁾西南流体物理研究所,绵阳 621900)

³⁾西南交通大学高温高压物理研究所,成都 610031)

(2001 年 10 月 22 日收到,2002 年 4 月 17 日收到修改稿)

利用二维分子动力学程序,结合类紧束缚杂化多体势,研究冲击载荷下金属表面包含沟槽型缺陷的微喷射动力学过程.在产生微喷射以后,结果表明材料内部传播着两种波系:反射稀疏波和二次加载压缩波,其中,反射稀疏波波面与沟槽形状相似,而二次压缩波波面随沟槽夹角的变化而变化,并形成了两个压强区:负压区和正压区.负压区的存在表明材料中可能产生微损伤.同时,统计结果表明微喷射体的速度随沟槽半角增加而增加的趋势,微喷射体的粒子数随沟槽半角增大而减少的趋势,当沟槽半角大于 60° ,微喷射效应消失.以上计算结果可以定性说明射流是沟槽型缺陷产生微喷射的主要机理.

关键词:冲击波,沟槽型缺陷,微喷射,分子动力学

PACC: 8240F, 7115Q, 6185, 6830

1. 引 言

当材料自由表面受到强动载荷作用时,将有一些物质微粒以比自由表面整体运动速度更大的速度从自由表面喷射出来,这种效应即是冲击作用下的金属表面微喷射.这种微粒子喷射现象,是金属自由表面中的一个重要现象,是冲击波或爆轰驱动技术中的一项重要研究内容,同时对激光束或高能离子束驱动的惯性约束聚变研究也有重要意义.自从 1953 年 Walsh^[1]从实验中观察到此现象以来,得到了人们的极大关注^[1-8].在实验方面,人们已经利用全息摄影技术和反射线透视摄影技术研究了冲击作用下金属微喷射物的质量、尺寸大小以及喷射物的形状等物理量,得到了大量的实验结果^[6-8].实验发现,微喷射过程是一个十分复杂的过程,影响微喷射的机理是随表面缺陷的类型不同而不同,同时与冲击加载时间、冲击波强度都有关系.理论研究却较少有文献报道.1969 年 Asay^[9]从统计力学出发研究了微喷射量与表面粗糙度的关系.1999 年 Sorenson^[10]运用渗滤理论(percolation theory)研究微喷射体的质量和大小.但是,关于各种缺陷产生微喷

射的机理及动力学过程的研究却未见文献报道,这是由于微喷射的质量是以微小的颗粒组成,在发射过程及自由面的进一步运动中都涉及到材料的损伤和断裂,无论运用解析或数值方法都遇到了很大困难.目前,有希望解决这一问题的方法是分子动力学计算^[11,12].

金属自由表面上引起微喷射效应的缺陷类型主要有以下几种^[9]:1)材料表面的不完整;2)材料中含有其他夹杂物;3)材料的结构中存在缺陷等.各种缺陷产生微喷射的机理各不相同.本文模拟了带有沟槽缺陷的金属表面在冲击加载下的微喷射效应.沟槽缺陷可以代表表面凹坑、划痕等缺陷类型.本文的重点是研究微喷射的动力学过程和微喷射与初始条件的关系.在本文的模拟过程中使用了类紧束缚杂化多体势模型^[13-18]表达金属原子间的相互作用,该势已被证明是适合于金属表面研究,并被广泛运用于研究金属表面扩散和分子束外延薄膜生长的动力学过程.

2. 研究方法

[†]E-mail address: chen_junjun@yahoo.com

2.1. 计算原理

分子动力学的基本出发点是经典的牛顿动力学运动方程,本文使用了二维分子动力学程序^[19]研究金属表面微喷射效应。

在经典分子动力学计算中,原子间相互作用势能的选择直接关系到计算性质的准确性.因此,我们

$$V_r(r_{ij}) = \begin{cases} A \exp(-p(r/d_0 - 1)) & r \geq r_1, \\ A_0 + A_1 r + A_2 r^2 + A_3 r^3 & r_1 > r > r_2, \\ B_m (0.35e^{-0.3r/a_f} + 0.55e^{-1.2r/a_f} + 0.1e^{-6.0r/a_f}) & r \leq r_2, \end{cases} \quad (3)$$

式中参数 r_{ij} 是原子 i 和 j 的距离, d_0 是最近邻原子间的距离. 参数 $\xi, q, d_0, A, A_0, A_1, A_2, A_3$ 和 p 是从拟合材料的结合能和体材料的弹性模量得到, 本文计算所需的参量见表 1^[14]. 已有的文献表明, 由

表 1 金属 Cu 原子间相互作用 TB 杂化势参量

ξ/eV	Q	d_0/nm	A/eV	p	r_1/nm	r_2/nm	B_m/eV	a_f/nm
1.2291	2.282	0.2546	0.0869	10.83	0.22	0.16	0.000121	0.0073

2.2. 计算模型

面心立方晶体 Cu 的晶格常数是 0.344nm ^[20], 在本文计算中, 为了研究二维问题, 计算模型选择了 Cu(001)面的晶格排列. 冲击波是由一个 Cu 原子排列构成的飞片与 Cu 原子排列构成的靶相互碰撞形成. 靶的长度和高度都是 80nm , 飞片的长度和高度分别是 50.0nm 和 80.0nm , 具体的模型结构见图 1. 沿垂直于波的传播方向使用了镜像反射边界条件. 飞片的初始速度从 1km/s 到 8km/s . 在现在的计算中, 选择了表面沟槽作为计算对象, 表面沟槽的径向深度是 30.0nm , 沟槽半角 θ 从 30° 到 60° , 分别称为模型 1 2 3 4. 在计算中我们总和了大约 8 万个原子, 计算的时间步长选择 0.001ps .

3. 计算结果和讨论

首先, 我们计算了波阵面运动速度 D 和波后粒子速度 u 的关系, 计算结果如图 2 所示. 从图中可知, $D-u$ 满足线形关系. 根据方程 $D = C_0 + \lambda u$, 我们拟合得到的参数 C_0 和 λ 分别是 4.13km/s 和 1.6 , 与实验值 3.96 km/s 和 1.5 ^[21] 符合得较好, 说明了我们

使用了一种带有 Molere 势^[13, 14]修正的类紧束缚杂化多体势^[15-18] (tight-binding hybrid potential), 势能分为吸引势 ϕ_b^i 和排斥势 ϕ_r^i 两部分:

$$\phi_b^i = - \left[\sum_{j \neq i} \xi^2 \exp(-2q(r_{ij}/d_0 - 1)) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

$$\phi_r^i = \sum_{j \neq i} V_r(r_{ij}). \quad (2)$$

其中

于考虑了原子间的多体效应, 类紧束缚杂化势可以更好表达金属原子间的相互作用, 适合于研究金属表面的各种效应。

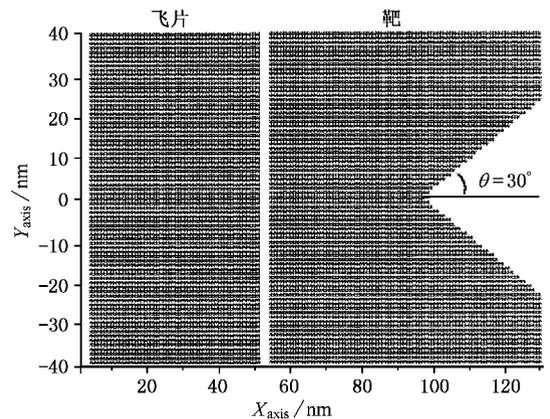


图 1 初始计算模型 ($\theta = 30^\circ$), θ 是沟槽半角

使用的势函数是适合于模拟冲击波在金属 Cu 中的传播的。

为了说明金属表面沟槽的微喷射机理, 我们详细表达了沟槽半角等于 30° 时微喷射过程, 如图 3 所示. 为了比较清楚地显示, 图中仅仅包括了距离沟槽顶点 15.0nm 内的粒子. 飞片与靶相互碰撞产生了在飞片与靶中传播的冲击波. 在图 3(a) 中, 冲击波阵面到达沟槽顶点 ($t = 40.0\text{ps}$); 在图 3(b) ($t = 42.0\text{ps}$), 冲击波与沟槽自由面相互作用并产生反射

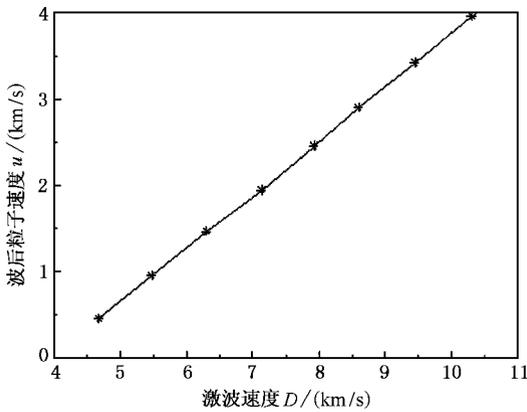


图2 冲击波速度 D 与波后粒子速度 u 关系图

稀疏波 稀疏波沿冲击波反方向传播,同时,在稀疏波作用下,沟槽自由面朝外运动.在图 3(c) ($t = 46.0\text{ps}$)中,因为冲击波到达沟槽自由面的时间差,材料内部的反射稀疏波呈现出与沟槽相似的波面.同时,在沟槽的自由面前面出现了以比自由面更大速度运动的粒子.需要特别指出的是,材料内部分为了两个不同的粒子密度区:区域 1 是粒子稀疏区,区域 2 是粒子高密度区,在下面的压强分析中可以了解到它们分别对应于一个负压区和一正压区.我们认为,粒子高密度区的存在说明了在反射稀疏波后传播着一个压缩波.压缩波的形成可以利用射流机理解释:向外运动的沟槽自由面相互斜碰产生了向内运动的压缩波,而微喷射体可以认为是斜碰产生的射流.计算的结果定性解释了沟槽型缺陷微喷射的射流机理.我们称此压缩波为二次加载压缩过程.在 $t = 50.0\text{ps}$ 时,微喷射体形成锥形结构.在 $t = 55.0$ 到 65.0ps 时微喷射体进一步运动并与沟槽自由面的距离逐步增大,但微喷射体的统计粒子数量几乎不再增加.总的来说,我们可以将以上微喷射过程大致分为三个阶段:1)冲击波与自由面作用,产生反射稀疏波和沟槽自由面向外运动的过程;2)形成二次加载压缩波和射流;3)微喷射锥形体形成和从自由面分离的过程.

为了研究微喷射后材料中压力分布,我们选择计算了模型 1 中沿 $Y = 0$ 轴的平方结构的平均压力,平方结构的大小取为 $2.6\text{nm} \times 2.6\text{nm}$,压力 $P(r)$ 计算公式如下^[22]:

$$\begin{aligned} P(r)V &= P_f(r)V + P_b(r)V \\ &= Nk_B T + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i, \quad (4) \end{aligned}$$

式中 r 是计算平方结构的重心坐标, N 是计算结构中的粒子数, k_B 是 Boltzmann 常数, r_i 是第 i 原子的坐标, F_i 是第 i 原子的受力.其计算结果见图 4,以上图中各时间与图 3 相对应.对比图 3,可以了解到,各点压强随着冲击波的传播而变化.在 $t = 2.0\text{ps}$ 时,图 4(a)中 $r = 50.0\text{nm}$ 出现了一个正压区,表示飞片与靶相撞产生冲击波并在靶中传播.在 $t = 40.0\text{ps}$ 时(见图 4(b)),正压区扩展到 $r = 100.0\text{nm}$ 的范围内,表示激波传播到达沟槽顶部.在 $t = 46.0\text{ps}$ 时(见图 4(c)),在 $r = 97.0\text{nm}$ 处出现了一个负压区,在 $r = 100.0\text{nm}$ 出现了一个正压区,其横向坐标正对应于图 3(c)中粒子高密度区和低密度区,说明负压区和高压区分别由反射稀疏波和二次压缩波产生.而产生负压区的原因可以解释为入射冲击波与沟槽模型的自由面相互作用存在时间差,在反射稀疏波中出现了径向应力并使粒子向径向运动,在稀疏波传播过程中产生了负压区.我们认为,负压区的存在表明冲击波在沟槽自由面的反射稀疏波可以引起材料内部的微损伤.同时,在 $t = 55.0\text{ps}$ (见图 4(d)),在 $r = 87.0\text{nm}$ 附近存在一正压区,这正是二次冲击压缩波的传播形成.压强计算结果印证了图 3 中得到的在模型中存在两种不同激波传播的结论.

图 5 显示了在相同初始条件下不同的沟槽半角的微喷射情况,结合图 3 可以看出,随着半角的变化,微喷射的量随着夹角的增大而减少的趋势.将进入沟槽内的粒子速度与完整表面的粒子速度对比,统计了微喷射体包含的粒子数目.当然,由于分子动力学模拟的粒子数远小于实际的材料包含的粒子数,我们的统计结果不能与实际的实验结果进行量的比较,但可以定性地讨论随着半角的变化微喷射量的变化趋势.在夹角为 30° , 40° , 50° 时统计得到微喷射体包含粒子数分别是 424, 375, 253.当夹角大于和等于 60° 时,微喷射不再出现.这一现象与射流中材料强度封锁效应相一致^[23,24],这也进一步说明了沟槽模型微喷射的射流机理.以上得到的微喷射量随着半角的变化趋势与实验结论是相符合^[9].同时,随着半角的不同,二次加载压缩波的波面随之变化.在半角等于 30° , 40° , 50° 时,如图 5 中标号 1 所示,出现了带尖顶的压缩波波形,随着半角的增大尖顶逐渐平缓,在半角等于或大于 60° ,随着微喷射体的不存在,尖顶完全消失.产生带尖顶的压缩波的原因,有待于进一步深入的波系分析.

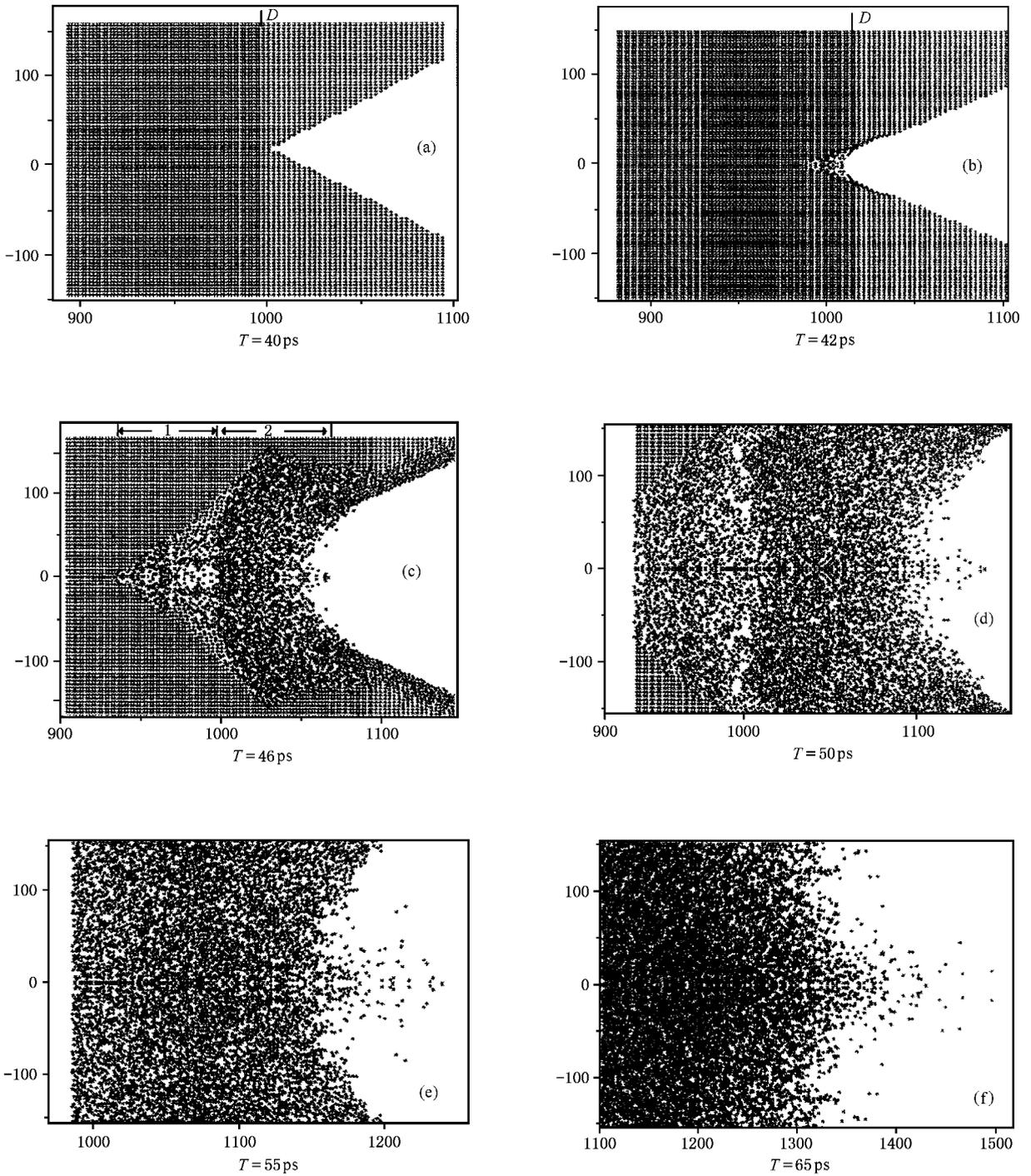


图3 沟槽半角等于 30°时不同时刻靶原子位置示意图，D 是冲击波阵面位置

同时,我们统计分析了微喷射速度和自由面速度随夹角的变化关系.微喷射速度是所有统计微喷射粒子的速度平均,自由面速度是所有进入沟槽内的表面粒子速度的平均,如图 6 所示.随着夹角的增

大自由面速度和微喷射体速度随之增大.这一现象可以利用斜冲击波的分解关系得到较好理解:随着夹角的增大,在垂直于沟槽自由面的方向上分解的冲击波速度更大,相应波后粒子的速度也增大.这与



我们的计算结果是符合的.

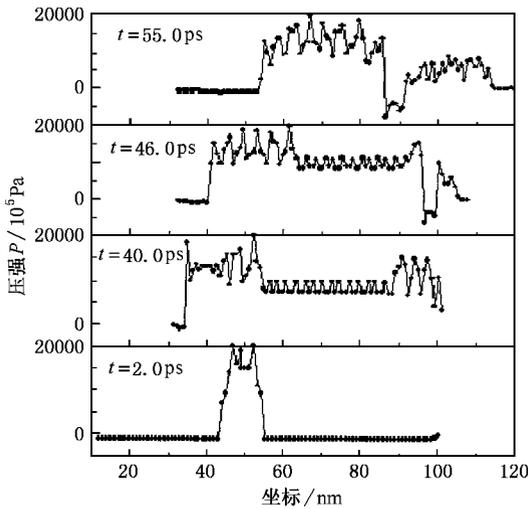


图 4 模型 1 中沿 $Y=0$ 轴的平方结构在不同时刻计算的平均压强与位置坐标的关系图

4. 结 论

本文选择表面有沟槽型缺陷的金属 Cu 作为微喷射研究对象,利用分子动力学模拟研究了沟槽型缺陷微喷射的机理.计算结果表明,整个微喷射过程可以大致分为三个阶段:1)冲击波与自由面作用,产生反射稀疏波和沟槽自由面向外运动的过程;2)形成二次加载压缩波和射流;3)微喷射锥形形成和从自由面分离的过程.在产生微喷射以后,可以把在材料内部传播的波分为两种波系:反射稀疏波和二次加载压缩波,并形成了两个压强区:负压区和正压区.我们认为,负压区的存在说明表面沟槽反射稀疏波在材料中可以产生微损伤.研究了微喷射与沟槽夹角的关系,统计结果表明,微喷射体和自由面运动速度随沟槽夹角增大而增大的趋势,微喷射体的粒子数随沟槽半角增大而减少的趋势.当沟槽半角大于 60° 时,微喷射效应消失,这一结果与射流的材料强度封锁效应相符合.本文模拟结果从定性地解释了沟槽型缺陷微喷射的射流机理假设.在后续研究中,我们将进一步研究各种缺陷在冲击作用下的微喷射效应.

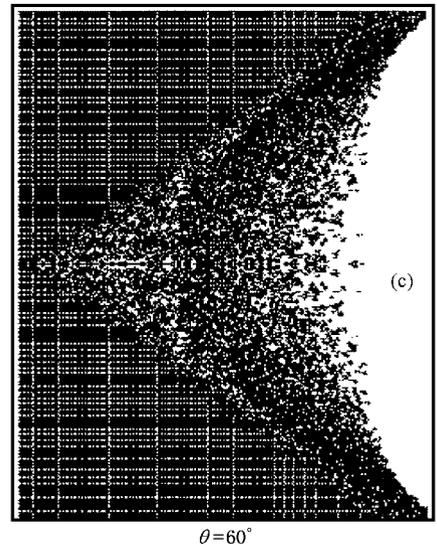
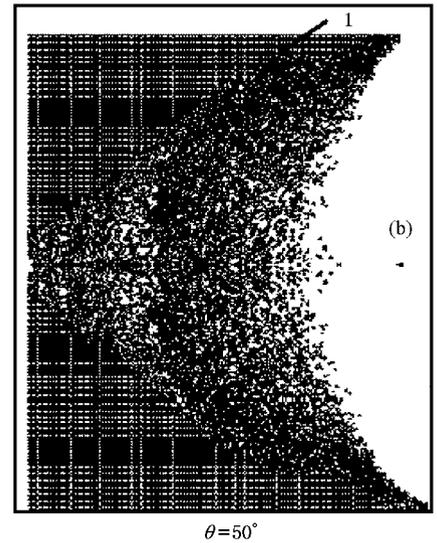
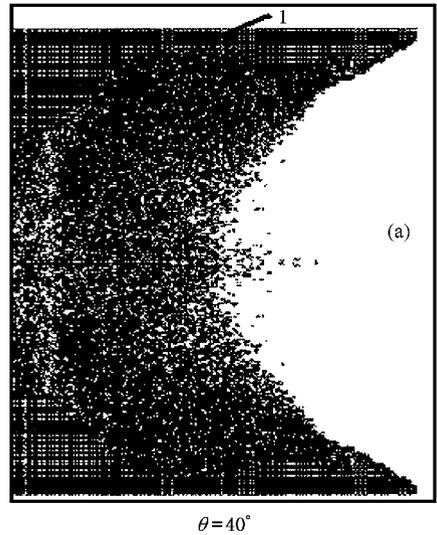


图 5 相同初始冲击条件下(飞片速度 $v = 8\text{km/s}$),不同沟槽模型 1 2 3 4 的微喷射示意图(标号 1 指二次加载压缩波面顶端)

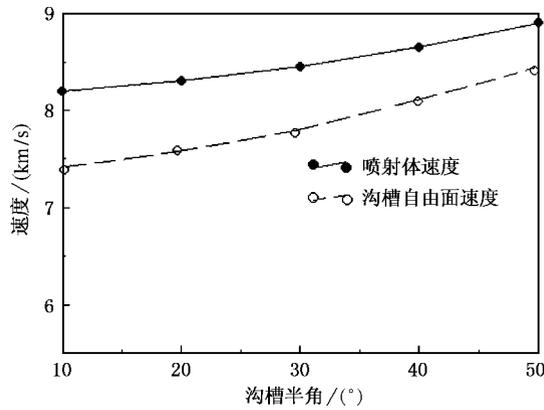


图6 微喷射速度和自由面速度随沟槽半角 θ 的变化关系

- [1] Walsh J M , Shreffler R G and Willing F 1953 *J. Appl. Phys.* **24** 349
- [2] Asay J R , Perry F C and Mix L P 1976 *Appl. Phys. Lett.* **29** 284
- [3] Barness J K , Blewett P J , McQueen R G *et al* 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 727
- [4] Meyer K A and Blewett P J 1972 *Phys. Fluids* **15** 753
- [5] Warnes R H 1979 *Bull. Amer. Phys. Soc.* **24** 720
- [6] Freeman J R , Clauser M J , Thompson S J 1977 *Nuclear Fusion* **17** 223
- [7] Perry F C and Mix L P 1974 *Appl. Phys. Lett.* **24** 624
- [8] Elias. P Shock 1986 *Waves in Condensed Matter*-1985 Ed Gupta Y M (Plenum Press) p56
- [9] Asay J R 1976 SAND 76-0542 (Sandia Laboratory)
Asay J R 1978 SAND 78-1256 (Sandia Laboratory)
- [10] Sorenson D S , Carpenter B , King N S P *et al* 1997 CONF-9706119
- [11] Wang D M and Wu Z Q 2000 *Chin. Phys.* **9** 368
- [12] Wu F M , Zhu Q P and Shi J Q 2000 *Chin. Phys.* **9** 49
- [13] Lee R W and Pan Z Y 1996 *Phys. Rev. B* **53** 4156
- [14] Yue Y , Huo Y K and Pan Z Y 1998 *Phys. Rev. B* **57** 6685
- [15] Li R W , Pan Z Y and Huo Y K 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 7 [李融武、潘正瑛、霍裕昆 1996 物理学报 **45** 7]
- [16] Xu Y , Pan Z Y and Wang Y X 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 88 [in Chinese] [徐 毅、潘正瑛、王月霞 2001 物理学报 **50** 88]
- [17] Rosato V , Guillope M and Legrand B 1989 *Philos. Mag. A* **59** 321
- [18] Loisel B , Gorse D and Pontikis V 1989 *Surf. Sci.* **221** 365
- [19] Wang J H and Zhang J L 1989 *Chin. J. Comput. Phys.* **6** 53 [in Chinese] [王继海、张景琳 1989 计算物理 **6** 53]
- [20] Wyckoff R W G 1951 *Crystal Structure* (Interscience Publishers , INC) Vol. 1 p5
- [21] Duvall G E and Fowles G R 1963 *High Pressure Physics and Chemistry* (New York and London : Academic Press) p567
- [22] Allen M P and Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford : Clarendon Press) p56
- [23] Ward G N 1955 *Linearized Theory of Steady High-speed Flows* (Cambridge : Cambridge Univ. Press) p312
- [24] Bai Shih I 1958 *Introduction to Theory of Compressible Flow* (New York : D. Van Nostrand Company. Inc.) p235

Molecular dynamics simulation of micro particle ejection from a shock-impacted metal surface

Chen Jun^{1)†} Jing Fu-Qian^{2)✉} Zhang Jing-Lin¹⁾ Chen Dong-Quan¹⁾

¹⁾*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*

²⁾*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Southwest Institute of Fluid Physics, Mianyang 621900, China*

³⁾*Institute of High Temperature and High Pressure Physics, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China*

(Received 22 October 2001 ; revised manuscript received 17 April 2002)

Abstract

The dynamic process of micro particle ejection from shock-impacted metal with grooved surface is investigated by molecular dynamics simulation using a hybrid tight-binding-like potential. The calculated results show that, after ejection, there propagate in sequence a reflection rarefaction wave and a second uploading compression wave in the material, and correspondingly a negative-pressure region and a high-pressure region are induced. The front shape of the reflection rarefaction wave is similar to the groove shape, but the front shape of the second uploading compression wave varies with the groove angle. The average velocity of the ejected particles increases with the groove angle. On the contrary, the amount of ejected particles decreases as groove angle increases. When the groove semi-angle is larger than 60 degrees, ejection disappears.

Keywords : shock wave, groove, micro particles ejection, molecular dynamics

PACC : 8240F, 7115Q, 6185, 6830

[†]E-mail address : chen_junjun@yahoo.com