

三角波加载下金属铝动态破坏现象的微观模拟*

邵建立^{1)2)†} 王裴¹⁾²⁾ 何安民¹⁾ 秦承森¹⁾ 辛建婷³⁾ 谷渝秋³⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理实验室, 北京 100094)

3) (中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2012年10月1日收到; 2012年11月2日收到修改稿)

采用嵌入原子势模型和分子动力学方法, 模拟研究了三角波加载下金属铝动态破坏的微观过程和动力学性质. 根据原子中心对称参数变化给出了样品微结构演化过程, 解读了熔化前后破坏过程的形态差异; 基于 Virial 定理统计了样品中压力和温度等力学量波形, 分析了熔化前后材料的强度变化. 通过不同碰撞速度的模拟, 讨论了破碎区内物质形态和密度分布的变化, 给出了材料破坏深度的变化规律. 研究还发现, 熔化后材料的动态拉伸强度已显著降低, 而此时由声学近似推算的材料拉伸强度已明显高于内部应力直接计算结果.

关键词: 破坏, 分子动力学, 冲击

PACS: 62.20.mm, 47.11.Mn, 62.50.Ef

DOI: 10.7498/aps.62.076201

1 引言

微喷射是指当冲击波从材料自由表面反射时, 部分物质脱离自由表面 (或基体) 向外喷射的动力学现象^[1-4]. 微喷射的产生不仅改变了材料界面的动力学响应特性, 还会直接导致界面 (如金属与气体界面的喷射现象) 的物质混合^[5,6], 因而成为诸多强冲击、高速碰撞等领域研究广泛关注的课题. 微喷射是发生在材料近表面区域的一种特殊破坏形态, 其形成过程具有丰富的物理内涵和鲜明特色, 如材料表面的缺陷构成、冲击压力与波形、材料强度与熔化等因素均可造成喷射状态的显著变化^[2,7-9].

已有研究表明, 微喷射的产生可大致分为两类喷射过程: 微射流喷射^[5,10,11]和表面破碎喷射^[12,13]. 前者主要与表面粗糙度或其他结构缺陷相关, 一般喷射速度较高, 空间质量密度较低; 后者主要发生在材料近表面的动态拉伸过程, 尤其是材料熔化后可形成大量的低速喷射物. 针对金属表面的微射流喷射机理, 人们已陆续开展了大量实验和

理论研究, 包括上世纪 70 年代 Asay 等开展的多种金属材料表面沟槽样品的实验研究^[2-4], 及近年来的分子动力学 (molecular dynamics, MD) 和流体动力学数值模拟研究^[10,11,14-17]. 这些研究工作已获得较多现象特征和规律认识, 如微喷射在压力区间的阶段性变化特征、微射流量随表面形貌的变化关系、不同材料喷射特性的差异等等. 然而, 对于材料表面破碎过程的实验测量和理论建模都存在较多困难, 目前取得的物理机理和规律性认识还很缺乏.

随着近年来计算机技术的飞速发展, MD 模拟已成为材料动态响应和破坏过程微观机理研究的一种重要手段^[18-20]. 为探讨熔化前后金属表面破碎的物理过程, 本文采用 MD 方法开展了三角波加载下金属铝表面破坏的微观模拟; 结合原子中心对称参数和 Virial 定理, 分析了熔化前后物质破坏的微观过程和动力学性质; 给出了破碎区内物质形态、密度分布和破坏深度变化的一些认识; 最后讨论了熔化前后材料动态拉伸强度的变化.

* 中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2009A0101007, 2012B0101013) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail:

2 模型与模拟方法

原子间相互作用势是 MD 模拟的物理基础, 势函数形式和参数一般需要根据研究的对象和问题来具体确定. 嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 是基于密度泛函理论的一种多体势函数形式 [21,22], 适合于描述金属及合金的原子间相互作用. 本模拟工作采用 1992 年由 Mei 和 Davenport 发表的关于金属铝的 EAM 势 [23], 该势函数可以较好的反映金属铝的冲击压缩性质和高压熔化现象, 适合于金属动态力学过程的模拟. 如文献 [17] 采用该势函数模拟了冲击诱发金属铝表面微射流现象.

本文模拟工作采用自行编制的 MD3D 经典分子动力学程序. 其中, 初始构型设置为 $45_{[100]} \times 45_{[010]} \times 120_{[001]}$ 个 fcc 晶胞构成的理想单晶铝, 共 97.2 万个原子. 取 x, y, z 轴分别沿 $[100], [010], [001]$ 晶向. 沿 x, y 方向施加周期性边界条件, 即若有粒子跑出模型则必有相同状态粒子从相反的界面回到模型中, 保证该模拟系统的粒子数恒定; 原子间作用力的计算则采取最近镜像方法, 由此消除边界处原子受力的边界效应. 沿 z 方向设为自由边界, 即不施加任何外界约束; 采用速度标定法 [24] 将样品初始温度设为 0 K, 晶格常数为 $a = 0.405$ nm, 然后令模拟样品在 NVT 系综下进行充分弛豫 (10 ps). 原子运动方程积分采用速度 Verlet 算法 [25] 进行积分, 时间步长取 0.001 ps.

将样品左侧 15a 的区域视为飞片, 右侧 105a 区域视为靶, 如图 1 所示. 采用飞片和靶对撞的方式来获得样品中的三角波加载: 首先, 令样品飞片 (左侧 15a 区域) 和靶 (右侧 105a 区域) 以一定初始速度 v_z^0 相撞; 由此产生沿 z 轴反向传播的两个冲击波; 随着左行冲击波在左侧自由面的卸载和卸载波的传播, 便可逐渐演化为样品中的右行三角波. 本文中碰撞速度 v_z^0 的取值范围为 1.0—6.0 km/s.

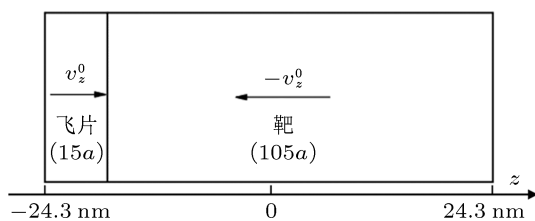


图 1 计算模型示意图

在本文模拟结果的统计分析中, 每间隔 10 个时间步 (0.01 ps) 对样品的力学量和微结构进行一

次统计. 原子级应力张量根据 Virial 定理进行计算, 具体计算公式为 [26,27]

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left(\sum_i m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij\alpha} f_{ij\beta} \right), \quad (1)$$

其中 m 为原子质量, v 为原子速度, $r_{ij\alpha}$ 和 $f_{ij\beta}$ 分别表示原子 i, j 间的距离和相互作用力, α, β 表示坐标轴. 金属的微观变形过程采用原子中心对称参数 c_i 来描述, 其计算公式如下 [28]:

$$c_i = \sum_{(j,j')} |\mathbf{R}_{ij} + \mathbf{R}_{ij'}|^2, \quad (2)$$

上式中, (j, j') 表示以原子 i 为中心呈中心对称的 6 组最近邻原子对, $\mathbf{R}_{ij(j')}$ 表示原子 $j(j')$ 相对于原子 i 的位置矢量; 其中最近邻 12 个原子由初始完整的面心立方晶格给出.

3 结果与分析

3.1 加载波形

基于上述模型和模拟方法, 通过不同碰撞速度的微观过程模拟, 来考察不同强度三角波加载下金属破坏状态的变化. 首先统计了不同时刻各物理量沿碰撞方向 (z 轴) 的分布, 即加载波形的演化过程. 图 2 给出了不同碰撞速度下沿 z 轴方向的粒子速度波形 (v_z-r) 和压力波形 (p_z-r). 图中结果显示, 除碰撞速度 1.0 km/s (在本文计算模型中, 左行冲击波卸载后的稀疏波未能追上右行冲击波, 因此在右侧自由面只形成梯形加载波) 以外, 其余碰撞速度均在到达右侧自由面之前演化成右行三角波. 图 2(a) 中速度波形显示 (所有结果向上平移了各自的碰撞速度), 当冲击波为 3.5—6.0 km/s 时, 左侧自由面附近粒子速度 v_z 明显偏离“两倍速度规则”, 已超过碰撞速度的 9%, 23% 和 32% (此时已发生卸载或冲击熔化). 图 2(b) 中压力波形显示, 到达右侧自由面的压力峰值范围约为 18—130 GPa, 这涵盖了金属铝的弹塑性变形和高压熔化状态.

3.2 破坏过程分析

根据原子中心对称参数的变化, 分析了不同强度三角波作用下金属铝表面破坏的微观过程. 图 3 给出了碰撞速度为 1.5 km/s 的不同时刻的计算结果, 其中, 中心对称参数值 $C \leq 4$ 为弹性变形, $4 < C < 32$ 为塑性变形, $C \geq 32$ 为非晶变形. 图 3 中的微观结构图像显示: 当三角波前沿 (5.5 ps, 箭头

指向位置) 接近右侧自由面时, 冲击波后已存在大量层错结构; 冲击波在自由面反射稀疏波, 与入射三角波稀疏段相互作用, 在近表面形成动态拉伸区; 层错交叉位置出现非晶变形 (7.5 ps, 矩形区域), 在后续拉伸下这些非晶区域出现孔洞形核 (8.0 ps, 矩

形区域, 这与文献 [29—31] 中铜、镍等金属的模拟结果类似), 并逐步发展为一定宽度的孔洞形核和生长区域 (9.0 ps); 随着孔洞的不断长大, 孔洞间大部分物质转变为非晶态, 这促进了孔洞的相互贯通, 最终形成破碎区 (14.0 ps) .

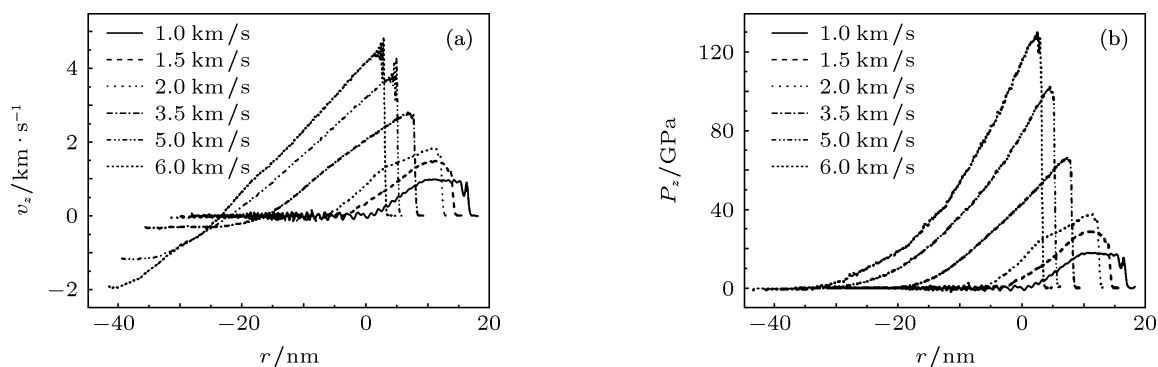


图2 加载波形 (a) 粒子速度; (b) 压力

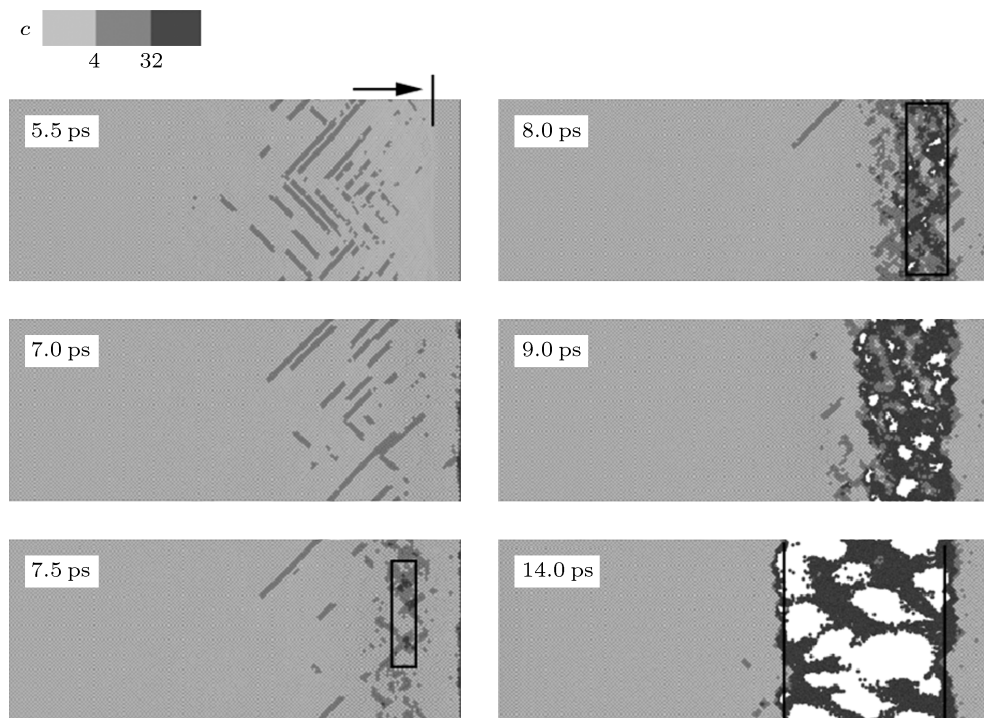


图3 碰撞速度为 1.5 km/s 时破坏的微观过程

基于上述微观过程统计了沿加载方向的压力和密度分布, 如图 4 所示. 图 4(a) 中压力波形显示, 三角波的冲击前沿从金属自由面反射左行稀疏波, 并与三角波稀疏段形成较强的动态拉伸区, 负压峰值达到约 9 GPa (8 ps), 这与图 3 中孔洞形核状态相对应. 随着动态拉伸的持续, 形成穿过破坏区的左

行稀疏波 (如图中箭头所示), 其尾部跟随一个冲击波 (孔洞的长大和贯通导致的负压松弛); 同时, 破碎区的压力逐渐衰减至零压. 图 4(b) 中温度 (T) 波形的演化表明, 破碎区 (两箭头之间的区域) 与其他区域存在显著的温差, 图中虚线表示本文势函数给出的金属铝在零压下的熔化温度 (约 800 K), 详见

参考文献 [23]. 显然, 在动态拉伸过程破坏区温度不断上升, 直至达到破碎状态; 而此时大部分物质温度已经超过熔点, 这就意味着破碎区应存在大量熔化颗粒, 见图 3 中破碎区 (14.0 ps) 的非晶态变形.

在较强三角波加载下, 冲击波后存在大量缺陷原子并在后续稀疏波段发生了熔化, 并未发生明显的层错或孪晶等塑性变形. 图 5 给出了碰撞速度为 5.0 km/s 时的破坏图像, 灰度表示势能 (U) 大小. 当三角波的冲击前沿从金属自由表面反射时, 可观察到表面出现逃逸粒子或团簇 (5.0 ps); 孔洞形核从金属近表面层开始出现 (6.0 ps), 随着卸载过程的继续, 孔洞开始长大 (7.0 ps, 实线矩形区域), 并且不断出现的孔洞形核 (7.0 ps, 虚线矩形区域); 这些孔洞最终导致了大面积的空穴化和液态破碎区域 (10.0 ps).

图 6 给出了上述过程压力和温度波形的演化. 图 6(a) 中结果显示, 三角波从金属自由面卸载过程中, 压力波形已看不出断裂面的信号特征, 只存在变化平缓的相对较弱的负压区 (最大拉应力约 3.5 GPa), 相对碰撞速度为 1.5 km/s 情况材料内部的最大拉应力已大大降低. 图 6(b) 中结果显示, 随着三角波从自由面的卸载, 对应于图 6(a) 中负压区内的温度波形逐渐趋于平缓 (约 1300 K), 显然材料

整体温度已明显高于熔点温度, 这意味着材料拉伸破坏过程在液态下进行, 由此导致了材料强度的降低和图 5 中大面积破碎区的形成.

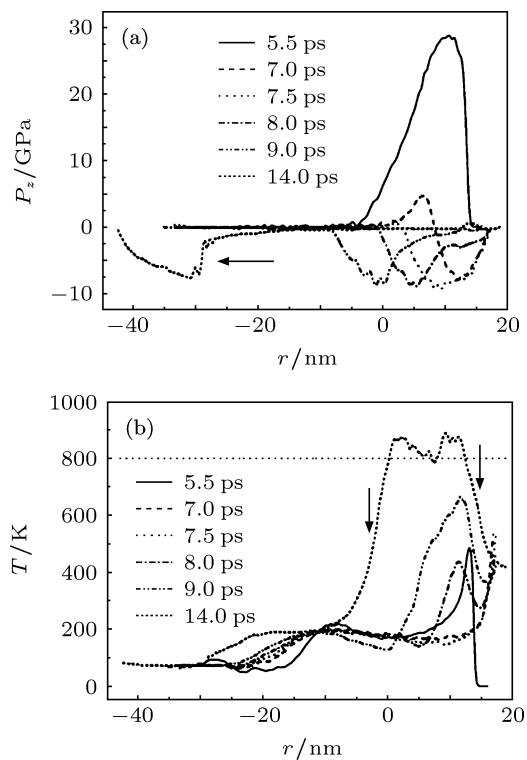


图 4 碰撞速度 1.5 km/s 的力学量波形演化 (a) 压力; (b) 温度

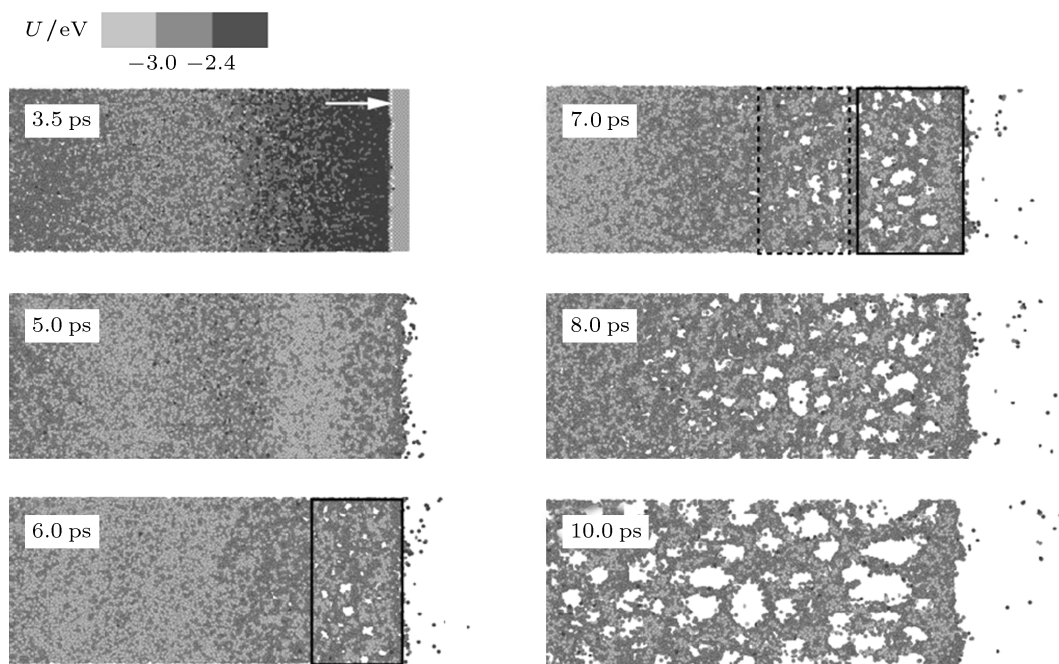


图 5 碰撞速度 5.0 km/s 时破坏的微观过程

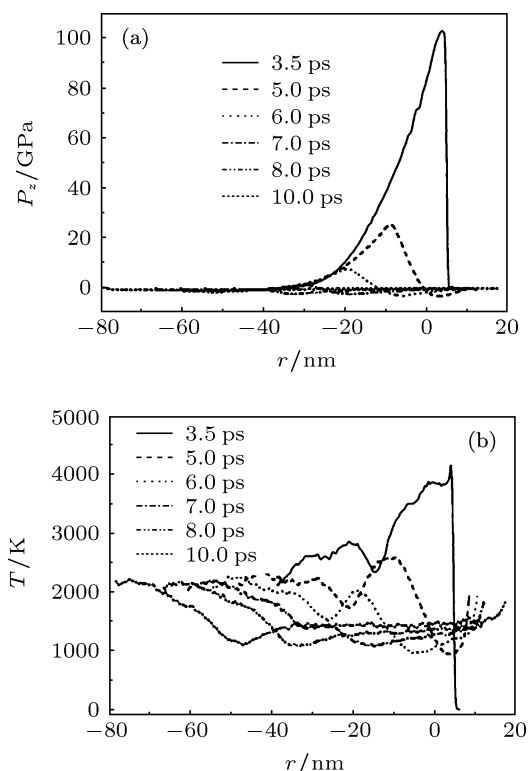


图6 碰撞速度 5.0 km/s 的力学量波形演化 (a) 压力; (b) 温度

3.3 破坏区域物质形态与密度分布

图 7 和图 8 分别为金属铝熔化前和熔化后表面破坏的三维破坏图像, 可以看到熔化前 (1.0—2.0 km/s) 产生了固态层裂片 (右侧浅灰色物质), 而熔化后 (3.5—6.0 km/s) 则产生了大面积的液态空穴化和破碎区, 并发生原子或原子团簇喷射现象. 这些图像变化特征与激光加载实验结果 [13] 一致. 对于图 7 中的低速碰撞情况, 卸载过程中材料仍具有较高强度, 自由面附近出现明显的拉应力状态;

随着拉伸区域的塑性和非晶变形, 导致孔洞的形核和长大并发展至断裂破碎, 如图 3 中结果所示. 其中, 碰撞速度 1.5 km/s 时, 断裂面之间仅有极少量的破碎物颗粒; 随着碰撞速度的增加, 断裂面间的破碎物逐渐增多, 反映了孔洞形核区域的扩展. 而对于图 8 结果, 金属内部孔洞形核及生长主要在液态下完成, 此时材料动态拉伸强度的大幅降低导致了大面积空穴化和破碎区域形成, 而不再出现固态层裂片. 当然, 由于自由表面总是区域零压, 使得近表面层的空穴化发展比负压区缓慢, 在模拟时间内仍可观察到片状液态颗粒 (3.5 km/s); 但随着加载强度增加已经观察到表面层形成的较大破碎颗粒 (5.0 km/s, 6.0 km/s). 由于碰撞速度为 3.5—6.0 km/s 时, 样品中已发生冲击或卸载熔化, 因此未破坏区域的中心对称参数值也已明显大于 32.

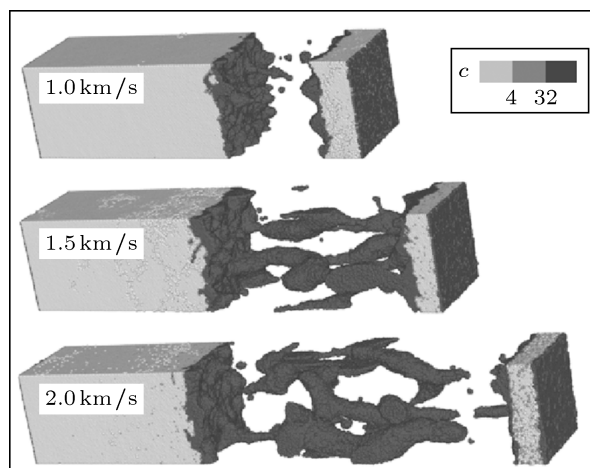


图7 熔化前破坏状态的三维图像

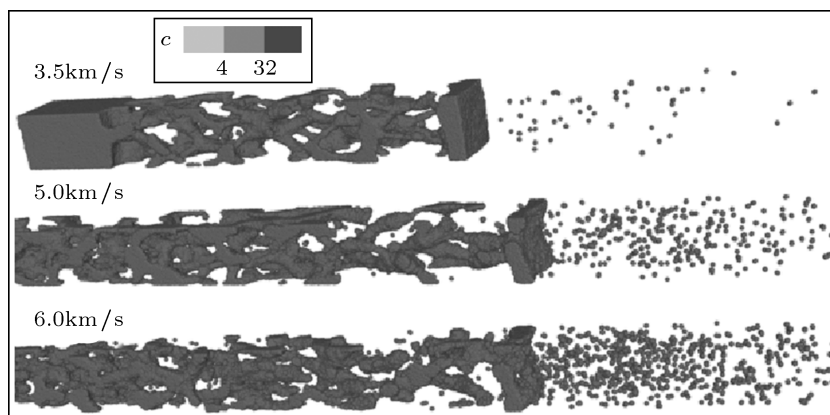


图8 熔化后破坏状态的三维图像

图 9 给出了上述不同破坏状态的密度波形统计结果, 其中, ρ 为某位置的物质密度, ρ_0 初始状态的物质密度. 可以看到, 碰撞速度为 1.0—2.0 km/s 时的密度波形均存在清晰的断裂面, 1.5 km/s 和 2.0 km/s 断裂区内的波形震荡对应着图 7 中的断裂破碎物分布. 碰撞速度为 3.5—6.0 km/s 时的密度波形存在较宽的低密度区 (低于初始密度 20%), 其中表面附近的峰值对应图 8 中的片状液态颗粒或较大破碎颗粒; 同时自由面发生了原子或原子团簇的喷射, 其最大喷射速度达到 1.7 倍自由面速度, 但空间质量密度仅为基体材料的千分之几. 与此同时, 我们进一步分析了破坏深度 d (即发生破碎的物质对应材料初始状态的厚度) 随三角波加载强度的变化. 本文模拟结果显示, 熔化前破坏深度随初始碰撞速度呈线性增加, 如图 10 中短线所示; 而当材料在卸载过程熔化后, 破坏深度的增加开始偏离线性关系 (3.5 km/s); 随着碰撞速度的继续增加, 材料破坏深度已表现出明显的非线性增长 (5.0 km/s, 6.0 km/s).

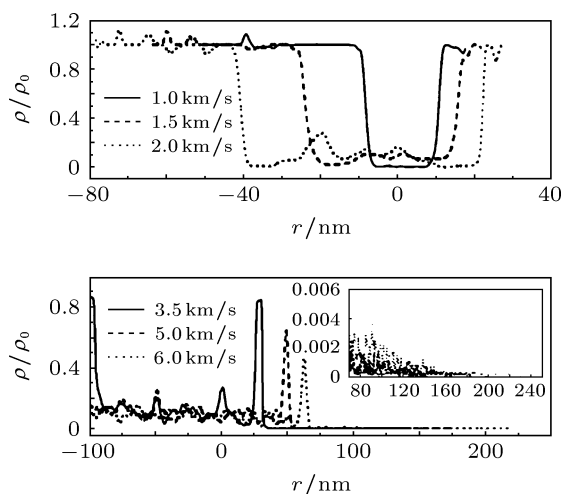


图 9 不同碰撞速度的破坏区密度波形

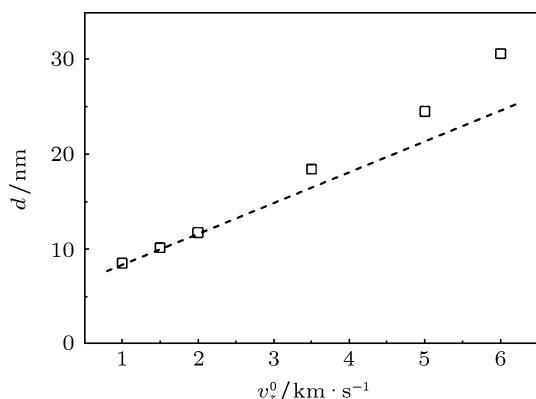


图 10 破坏深度随碰撞速度的变化

3.4 自由面速度分析

图 11(a) 和 (b) 给出了不同碰撞速度的自由面速度 (v_f) 随时间 (t) 的变化和基于自由面速度推测的材料层裂强度 (σ_s). 从图 11(a) 中结果可以发现, 碰撞速度为 1.0—2.0 km/s 时, 金属自由面速度出现明显的震荡信号, 与固态层裂片的产生相对应 [31]; 而当碰撞速度为 5.0—6.0 km/s 时, 只观察到自由面速度峰值的衰减, 不再有任何震荡信号.

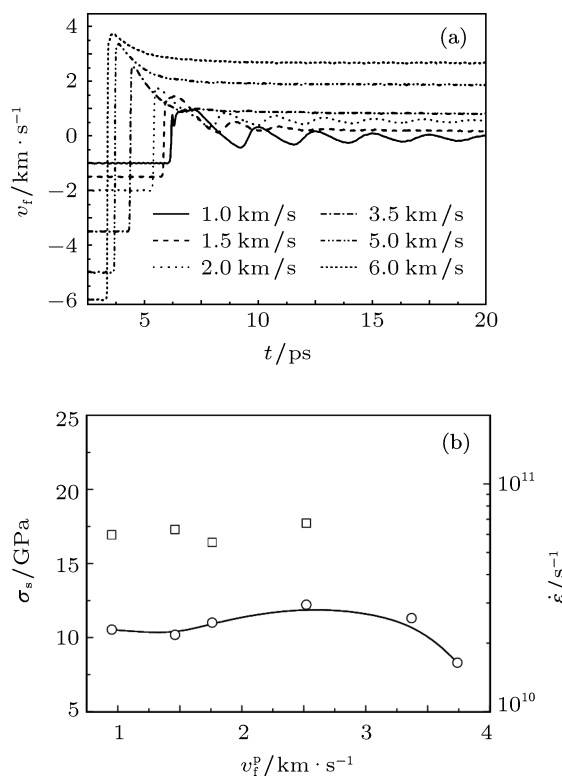


图 11 (a) 自由面速度历史; (b) 层裂强度变化

显然, 后者对应于材料卸载熔化后的大面积空穴化与破碎, 断裂面信号难以在这种物质状态下产生或传播. 根据自由面速度变化可采用声学近似 [32,33] 推算出层裂强度 ($\sigma_s = 0.5 \cdot \rho_0 \cdot c_0 \cdot \Delta u$) 和拉伸应变率 ($\dot{\epsilon} = (1/2c) \cdot (\Delta u / \Delta t)$). ρ_0 和 c_0 分别为材料初始密度和声速, Δu 为自由面速度峰值与第一次回跳点的差值, Δt 为相应的时间间隔. 图 11(b) 中横坐标为自由面速度峰值 (v_f^p), 图中圆圈表示层裂强度, 四边形表示应变率 ($\dot{\epsilon}$). 计算结果显示, 碰撞速度 1.5 km/s 时层裂强度在 10 GPa 左右, 这与材料内部应力的直接统计结果一致 (见图 4(a) 中压力波形); 由于应变率高达 10^{10-11} /s, 材料熔化后仍表现出一定的动态断裂强度; 但此时声学近似推算的层

裂强度仍超过 7 GPa (5.0 km/s, 6.0 km/s), 比内部应力直接统计结果 3.5 GPa (5.0 km/s) 高出 1 倍多.

4 结论

为探讨不同强度三角波加载下金属的动态破坏机理和形态特征, 尤其是熔化前后表面破坏形态的差异, 本文采用分子动力学方法模拟了三角波加载下金属铝动态破坏的微观过程和动力学性质. 数

值模拟结果显示: 低速碰撞下孔洞在层错交叉区域形核并最终导致了固态层裂片出现; 高速碰撞下(材料已熔化) 出现大面积的空穴化和破碎状态, 且在压力波形上已看不到任何断裂面的信号. 通过破坏深度的统计发现, 熔化前破坏深度随初始碰撞速度呈线性增加, 熔化后破坏深度的增加开始表现出非线性增长. 研究还发现, 熔化后材料的动态拉伸强度已显著降低, 而此时由声学近似推算的材料拉伸强度已明显高于内部应力直接计算结果.

- [1] Walsh J M, Shreffler R G, Willig F G 1953 *J. Appl. Phys.* **24** 349
- [2] Asay J R, Mix L P, Perry F C 1976 *Appl. Phys. Lett.* **29** 284
- [3] Asay J R 1976 *Material ejection from shock-loaded free surface of aluminum and lead*, Sandia Laboratories SAND76-0542
- [4] Asay J R 1978 *A model for estimating the effects of surface roughness on mass ejection from shocked materials* Sandia Laboratories SAND78-1256
- [5] Ogorodnikov V A, Ivanov A G, Mikhailov A L, Kryukov N I, Tolochko A P, Golubev V A 1998 *Combustion, Explosion and Shock Waves* **34** 696
- [6] Oró D M, Hammerberg J E, Buttler W T, Mariam F G, Morris C, Rousculp C, Stone J B 2012 *AIP Conf. Proc.* **1426** 1351
- [7] Zellner M B, Grover M, Hammerberg J E, Hixson R S, Iverson A J, Macrum G S, Morley K B, Obst A W, Olson R T, Payton J R, Rigg P A, Routley N, Stevens G D, Turley W D, Veaser L, Buttler W T 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 013522
- [8] Zellner M B, Dimonte G, Germann T C, Hammerberg J E, Rigg P A, Stevens G D, Turley W D, Buttler W T 2009 *AIP Conference Proceedings* **1195** 1047
- [9] Zellner M B, McNeil W V, Hammerberg J E, Hixson R S, Obst A W, Olson R T, Payton J R, Rigg P A, Routley N, Stevens G D, Turley W D, Veaser L, Buttler W T 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 123502
- [10] Wang P, Shao J L, Qin C S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1064 (in Chinese) [王裴, 邵建立, 秦承森 2009 物理学报 **58** 1064]
- [11] Wang P, Shao J L, Qin C S 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 234701 (in Chinese) [王裴, 邵建立, 秦承森 2012 物理学报 **61** 234701]
- [12] De Ressaiguier T, Signor L, Dragon A, Boustie M, Roy G, Llorca F 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 013506
- [13] Lescoute E, De Ressaiguier T, Chevalier J M, Loison D, Cuq-Lelandais J P, Boustie M, Breil J, Maire P H, Schurtz G 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 093510
- [14] Chen J, Jing F Q, Zhang J L, Chen D Q 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2386 (in Chinese) [陈军, 经福谦, 张景琳, 陈栋泉 2002 物理学报 **51** 2386]
- [15] Germann T C, Hammerberg J E, Holian B L 2004 *AIP Conference Proceedings* **706** 285
- [16] Chen Q F, Cao X L, Zhang Y, Cai L C, Chen D Q 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 3151
- [17] Shao J L, Wang P, He A M, Qin C S 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 184701 (in Chinese) [邵建立, 王裴, 何安民, 秦承森 2012 物理学报 **61** 184701]
- [18] Ma W, Zhu W J, Chen K G, Jing F Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016107 (in Chinese) [马文, 祝文军, 陈开果, 经福谦 2011 物理学报 **60** 016107]
- [19] Deng X L, Zhu W J, Song Z F, He H L, Jing F Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4778 (in Chinese) [邓小良, 祝文军, 宋振飞, 贺红亮, 经福谦 2009 物理学报 **58** 4778]
- [20] Luo S N, Germann T C, Tonks D L 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 056102
- [21] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [22] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Philos. Mag.* **A 50** 45
- [23] Mei J, Davenport J W 1992 *Phys. Rev. B* **46** 21
- [24] Hoffmann K H, Schreiber M 1996 *Computational Physics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) p268
- [25] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [26] Irving J H, Kirkwood J G 1950 *J. Chem. Phys.* **18** 817
- [27] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulations of Liquids* (Oxford: Oxford University Press) p46
- [28] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [29] Luo S N, Germann T C, Tonks D L 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 123518
- [30] Ashkenazy Y, Averbach R S 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 051907
- [31] Srinivasan S G, Baskes M I, Wagner G J 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 043504
- [32] Kanel G I, Fortov V E 1987 *Adv. Mech.* **10** 3
- [33] Eliezer S, Gilath I, Bar-Noy T 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 715

Microscopic simulation on the dynamic failure of metal Al under triangular wave loading*

Shao Jian-Li^{1)2)†} Wang Pei¹⁾²⁾ He An-Min¹⁾ Qin Cheng-Sen¹⁾
Xin Jian-Ting³⁾ Gu Yu-Qiu³⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

3) (*Research Center of Laser Fusion, CAEP, Mianyang 621900, China*)

(Received 1 October 2012; revised manuscript received 2 November 2012)

Abstract

Employing an embedded-atom-method potential and molecular dynamics simulations, we have simulated the microscopic process and dynamical properties of the dynamic failure of metal Al specimens under triangular wave loading. The microstructure evolution of the sample is analyzed using the central symmetry parameter, while the difference of morphology between non molten and molten states is also explained. The pressure profiles were calculated based on the virial theorem, and the results show that the tensile strength of the material is decreased considerably in its molten state. Using the simulation results for different impact velocities, we discuss the variation of morphology and density distribution, from which the change of damage depth in the process from non molten to molten states is obtained. Our simulations also suggest that: the tensile strength of material derived from acoustic approximation is distinctively higher than the peak of internal stress from virial theorem for the melted state.

Keywords: damage, molecular dynamics, shock

PACS: 62.20.mm, 47.11.Mn, 62.50.Ef

DOI: 10.7498/aps.62.076201

* Project Project Supported by the Foundation for Development of Science and Technology of China Academy of Engineering Physics, China (Grant Nos. 2009A0101007, 2012B0101013).

† Corresponding author. E-mail: