第 49 卷 第 12 期 2000 年 12 月
1000-3290/2000/49(12)/2443-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 49, No. 12, December, 2000

一种获得剪切模量压强二阶偏导数 G''_P 的方法

华劲松 经福谦 谭 华
(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,绵阳 919 信箱 111 分箱,绵阳 621900)
(2000 年 3 月 15 日收到;2000 年 7 月 16 日收到修改稿)

从晶格材料的电子结构理论出发,推导了一个计算剪切模量 G 的压强二阶偏导数 G''_P 的方法. 针对 93 钨合金材料计算得到 $G''_P = -0.033\mathrm{GPa}^{-1}$,把这一结果用于 Birch-Murnaghan 有限应变理论的计算,并与 $G''_P = 0$ 的计算结果进行了比较. 结果表明,$G''_P = 0$ 的计算结果明显高于 $G''_P \neq 0$ 的计算结果,在压强较高时,二者结果相差较大. 因此,在高压下,必须考虑 G''_P 带来的影响.

关键词:剪切模量,压强二阶偏导数,钨合金,物态方程,有限应变理论
PACC:6220

1 引 言

物态方程是描述物质系统中各状态变量之间关系的一个函数表达式[1],用来表达在一定热力学条件下物质的形态,它对于研究材料在动高压下的动态特性是十分重要的. 物态方程的形式有多种,如 Birch-Murnaghan 物态方程、格临爱森物态方程、混合物物态方程和多孔材料物态方程等[2—4]. 其中,Birch-Murnaghan 物态方程是经常使用的一种物态方程,在使用这个物态方程时,要涉及到许多物理参量,其中就有一个是剪切模量的压强二阶偏导数 G''_P. 这个量是一个二阶小量,用实验测量是十分困难的. 因此,在通常的计算当中,一般把 G''_P 取为零值. 但这样做会对计算结果带来多大的误差?如果有误差,那么又怎样获得 G''_P 的值?对于这些问题,目前尚未见有关的系统分析讨论的报道.

本文针对以上这些问题,从晶格材料的电子结构理论出发,从剪切模量的一个理论计算式,推导出了一个从理论上计算剪切模量的压强二阶偏导数 G''_P 的方法,并针对钨合金材料进行了实际计算,并将这一计算结果与 G''_P 取为零值的计算结果进行了比较,发现在高压下,G''_P 是不能忽略的小量.

2 Birch-Murnaghan 物态方程

由 Birch[5] 得到的有限应变理论是较为广泛应用的表示压强、密度及弹性模量之间关系的方程. 它的具体形式是定义一个 Eulerian 应变 f,

$$f = \frac{1}{2}\left[(\rho/\rho_0)^{2/3} - 1\right],$$

则归一化的压强 F 为 $$F = \frac{P}{3f(1+2f)^{5/2}},$$
其中 P 为等熵压强.

在 F-f 坐标系中,利用级数开展的方法,可以得到四阶的 Birch-Murnaghan 方程为

$$F = a_0 + a_1 f + a_2 f^2,$$

其中的系数分别为

$$a_0 = K_{0s},\quad a_1 = \frac{3K_{0s}}{2}(K'_{0s} - 4),$$

$$a_2 = \frac{3K_{0s}}{2}\left[K_{0s}K''_{0s} + K'_{0s}(K'_{0s} - 7) + \frac{143}{9}\right],$$

其中 K_{0s},K'_{0s},K''_{0s} 分别表示零压下的绝热体积模量及其对压强的一阶和二阶偏导数. 这个公式对于拟合压力与体积数据是特别方便的,因为它把非线性的 Birch-Murnaghan 方程简化为应变的平方形式. 且 K'_{0s},K''_{0s} 有如下关系[6]:

$$K''_{0s} = \frac{K'_{0s}(7 - K'_{0s}) - \frac{143}{9}}{K_{0s}}.$$

以同样的方法,通过引入归一化的弹性模量,声速也可以表达成应变的多项式形式.

$$M_L = \frac{C_L}{(1+2f)^{5/2}} = \frac{\rho V_P^2}{(1+2f)^{5/2}},$$

$$M_K = \frac{K_S}{(1+2f)^{5/2}} = \frac{\rho V_B^2}{(1+2f)^{5/2}},$$

$$M_G = \frac{G}{(1+2f)^{5/2}} = \frac{\rho V_S^2}{(1+2f)^{5/2}},$$

其中 C_L，K_S，G 分别表示等熵条件下的纵向模量、体积模量及剪切模量. 且有

$$C_L = K_S + \frac{4}{3}G,$$

M_L，M_K，M_G 分别表示归一化的纵向模量、体积模量及剪切模量，V_P，V_B，V_S 分别表示纵波声速、体积声速及横波声速. 将归一化的这些模量展开至有限应变的四阶项有

$$M_L = a_{L_0} + a_{L_1}f + a_{L_2}f^2,$$

$$M_K = a_{K_0} + a_{K_1}f + a_{K_2}f^2,$$

$$M_G = a_{G_0} + a_{G_1}f + a_{G_2}f^2,$$

其中的各系数项的计算式分别为

$$a_{L0} = K_{0S} + \frac{4}{3}G_0,$$

$$a_{L1} = 3K_{0S}\left(K'_{0S} + \frac{4}{3}G'_0\right) - 5\left(K_{0S} + \frac{4}{3}G_0\right),$$

$$a_{L2} = \frac{9}{2}K_{0S}^2\left(K''_{0S} + \frac{4}{3}G''_0\right) + \frac{9}{2}K_{0S}(K'_{0S} - 4)\left(K'_{0S} + \frac{4}{3}G'_0\right) + \frac{35}{2}\left(K_{0S} + \frac{4}{3}G_0\right),$$

$$a_{K0} = K_{0S}, a_{K1} = 3K_{0S}K'_{0S} - 5K_{0S},$$

$$a_{K2} = \frac{9}{2}\left[K_{0S}^2\left(K''_{0S} + (K'_{0S} - 4)\frac{K'_{0S}}{K_{0S}}\right) + \frac{35K_{0S}}{9}\right],$$

$$a_{G0} = G_0, a_{G1} = 3K_{0S}G'_0 - 5G_0,$$

$$a_{G2} = \frac{9}{2}\left[K_{0S}^2\left(G''_0 + (K'_{0S} - 4)\frac{G'_0}{K_{0S}}\right) + \frac{35G_0}{9}\right].$$

由此可见，只要知道了一些相关系数值，从有限应变理论可以得到材料在等熵条件下的许多弹性力学参量. 从以上的这些公式我们发现，绝大多数参数是已知的或是从超声测量实验可以得到的，但唯有一个参数是未知的，即剪切模量对压强的二阶偏导数 G''_{0P}，为此需要找到一个计算 G''_{0P} 的方法.

3 剪切模量 G 的压强二阶偏导数 G''_{0P} 的计算

如何计算 G''_{0P} 是一件十分复杂的事，但我们发现 Straub[7] 曾提出了一个从电子结构理论出发的计算晶体材料剪切模量 G 的理论方法. 但他未讨论过如何计算 G''_{0P}. 为此，我们将利用这一理论方法来估算 G''_{0P}.

将剪切模量 G 看作晶格常量 a 的函数，可以得到一个计算剪切模量的理论计算式

$$G = G_0 + \frac{g_1(a - a_0)}{a^2}\mathrm{e}^{-g_2(a-a_0)},$$

其中 a_0，g_1，g_2 为拟合常数.

将上式对 a 分别求一阶和二阶偏导数有

$$\frac{\partial G}{\partial a} = \frac{g_1(a - a_0)}{a^2}e^{-g_2(a-a_0)}(-g_2) + g_1\mathrm{e}^{-g_2(a-a_0)}\frac{a^2 - 2a(a - a_0)}{a^4},$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial a^2} = -\frac{a^3[g_1g_2(2a - a_0) + g_1] - 3a^2[g_1g_2(a^2 - aa_0) + g_1(a - 2a_0)]}{a^6}\mathrm{e}^{-g_2(a-a_0)} - \frac{g_1g_2(a^2 - aa_0) + g_1(a - 2a_0)}{a^3}\mathrm{e}^{-g_2(a-a_0)}(-g_2).$$

当 $a = a_0$ 时有

$$\left.\frac{\partial G}{\partial a}\right|_{a_0} = \frac{g_1}{a_2^0},$$

$$\left.\frac{\partial^2 G}{\partial a^2}\right|_{a_0} = -\frac{2g_1}{a_0}\left(g_2 + \frac{2}{a_0}\right).$$

引入一个参量

$$X_0 = \left.\frac{\partial \log G}{\partial \log\rho}\right|_0 = \left.\frac{K_0}{G_0}\frac{\partial G}{\partial P}\right|_0,$$

其中 K_0 为零压体积模量，G 是剪切模量，ρ 为材料密度，G_0 为初始剪切模量，根据上式假设在 $a \approx a_0$ 时，有：$G \propto \rho X_0$，而 $\rho \propto a^{-3}$，则有 $G \propto a^{-3X_0}$，进而又有

$$\left.\frac{\partial G}{\partial a}\right|_{a_0} = -\frac{3X_0G_0}{a_0} = \frac{g_1}{a_0^2},$$

$$\left.\frac{\partial^2 G}{\partial a^2}\right|_{a_0} = \frac{3X_0G_0}{a_0^2}(1 + 3X_0) = -\frac{2g_1}{a_0^2}\left(g_2 + \frac{2}{a_0}\right).$$

联立解上述两个方程可以得到

$$g_1 = -3a_0G_0X_0, g_2 = \frac{3(X_0 - 1)}{2a_0}.$$

假设我们研究的材料为立方晶系，结构为体心

立方，则晶格常量 a 与密度 ρ 之间有如下关系：

$$\frac{\text{比容}}{\text{单位质量}} = V = \frac{1}{\rho} = \frac{a^3}{\xi \mathrm{Atw}/N_0},$$

其中 Atw 是原子量，对于 W 原子量为 184，ξ 是单位晶胞中的原子数，N_0 为阿佛加德罗常量，$N_0 = 6.023\times10^{23}/\mathrm{mol}$. 如果密度是以 $\mathrm{g/cm^2}$ 为单位，则

$$a^3 = a^2 11.21 \xi \mathrm{Atw}/\rho.$$

这里 α 为玻尔半径，$\alpha = 0.529167\times10^{-8}\mathrm{cm}$.

这样，可以利用上面这些参量来估算 G''_{0P}. 在估算 G''_{0P} 之前，还要首先估算 G'_{0P}，具体的计算方法如下：

$$\frac{\partial G}{\partial P} = \frac{\partial G}{\partial a}\frac{\partial a}{\partial P},$$

其中 $\frac{\partial G}{\partial a}$ 可直接从 G 与 a 的关系式求得，而 $\frac{\partial a}{\partial P}$ 可以从关系式 $a^3 = V\xi$ 出发，对 P 求导并利用关系式 $K = -V\frac{\partial P}{\partial V}$ 求得为

$$\frac{\partial a}{\partial P} = \frac{\xi}{3a^2}\left(-\frac{V}{K}\right),$$

$$\frac{\partial G}{\partial P} = \left(\frac{g_1(a-a_0)}{a^2}\mathrm{e}^{-g^2(a-a_0)}(-g_2) + g_1\mathrm{e}^{-g_2(a-a_0)}\frac{a^2-2a(a-a_0)}{a^4}\right)\left(\frac{\xi}{3a^2}\left(-\frac{V}{K}\right)\right).$$

当 $a = a_0$ 时有

$$\left.\frac{\partial G}{\partial P}\right|_0 = \frac{g_1}{a_0^2}\frac{2}{3a_0^2}\left(-\frac{a_0^3}{2K_0}\right) = -\frac{g_1}{3K_0}\frac{1}{a_0}.$$

这样可得到如下关系式：

$$\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} = \frac{\partial^2 G}{\partial a^2}\left(\frac{\partial a}{\partial P}\right)^2 + \frac{\partial G}{\partial a}\frac{\partial^2 a}{\partial P^2},$$

而

$$\frac{\partial^2 a}{\partial P^2} = -\frac{\partial}{\partial P}\left(\frac{V}{K}\right)\frac{\xi}{3a^2} - \frac{V}{3K}\xi\frac{\partial}{\partial P}\left(\frac{1}{a^2}\right)$$

$$= -\frac{\xi}{3a^2}\frac{V\frac{\partial K}{\partial P} - K\frac{\partial V}{\partial P}}{K^2} - \frac{V\xi}{3K}\frac{-2a\frac{\partial a}{\partial P}}{a^4}$$

$$= -\frac{\xi}{3a^2}\frac{V\left(1+\frac{\partial K}{\partial P}\right)}{K^2} - \frac{V^2\xi^2}{3K^2}\frac{2}{3a^5}.$$

将有关的式子一并代入 $\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}$ 的计算式中，并考虑到在 $a = a_0$ 时，则有

$$\left.\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right|_{a_0} = \frac{2g_1}{a_0}\left(g_2 + \frac{2}{a_0}\right)\left(\frac{V_0}{K_0}\right)\frac{\xi}{3a_0^2} - \frac{g_1}{a_0^2}\left[-\frac{\xi}{3a_0^2}\frac{V_0^2\left(1+\left.\frac{\partial K}{\partial P}\right|_0\right)}{K_0^2} + \frac{V_0^2\xi^2}{3K_0^2}\frac{1}{3a_0^5}\right].$$

这样我们就得到了一个计算剪切模量 G 的压强二阶偏导数 G''_P 的方法.

4　针对 93 钨合金的计算结果及与 $G''_P = 0$ 的计算结果的比较

以上我们得到了一个计算剪切模量 G 的压力二阶偏导数 G''_P 的方法，下面就这一方法的实际应用，我们选择 93 钨合金材料作为研究对象，对于 93 钨合金，它的一些材料参量为[8]

$$\rho_0 = 16.96\ \mathrm{g/cm^3},\quad K_0 = 270\ \mathrm{GPa},\quad \xi = 2,$$
$$G_0 = 132\ \mathrm{GPa},\ G'_P = 1.794,\ K'_P = 4.108,$$
$$C_0 = 4.01\ \mathrm{km/s},\ \lambda = 1.277,$$

其中 C_0，λ 为材料的 Hugoniot 击波速度关系式[9] $D = C_0 + \lambda u$ 中的两个系数. 代入以上有关公式得到的中间结果为

$$X_0 = 3.67,\ a_0 = 3.4\times10^{-8}\ \mathrm{cm},$$
$$g_1 = -93.02\times10^{11}\ \mathrm{Pa}-\alpha,\ g_2 = 0.6453(1/\alpha).$$

最后得到的针对 93 钨合金材料的剪切模量 G 的压强二阶偏导数 G''_P 的计算结果为

$$G''_P = -0.033\ \mathrm{GPa^{-1}}.$$

知道 G''_P 以后，就可以进行 Birch 有限应变理论的计算. 在这里限于篇幅，我们只计算三个参量，即纵波声速、横波声速和剪切模量. 计算结果分别示于图 1，

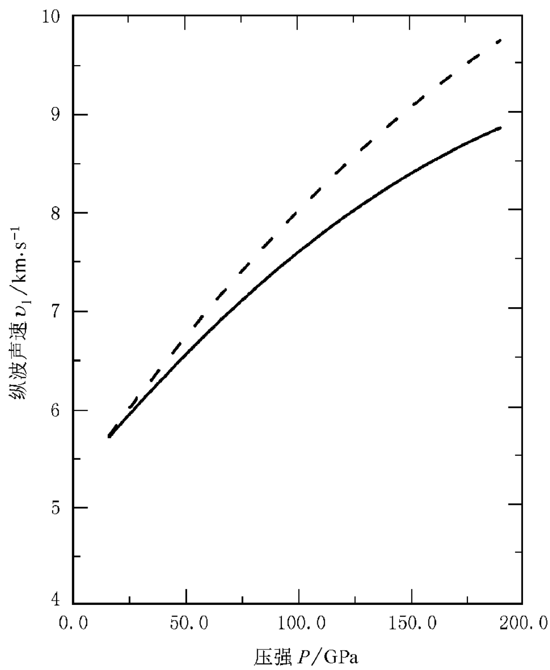

图 1　$G''_P = -0.033\ \mathrm{GPa^{-1}}$（实线）与 $G''_P = 0$（虚线）时的纵波声速 v_l 的计算结果比较

图 2 和图 3 中. 为了便于分析比较，也计算了当 $G_P''=0$ 时的情况，计算结果一并示于相应的图中.

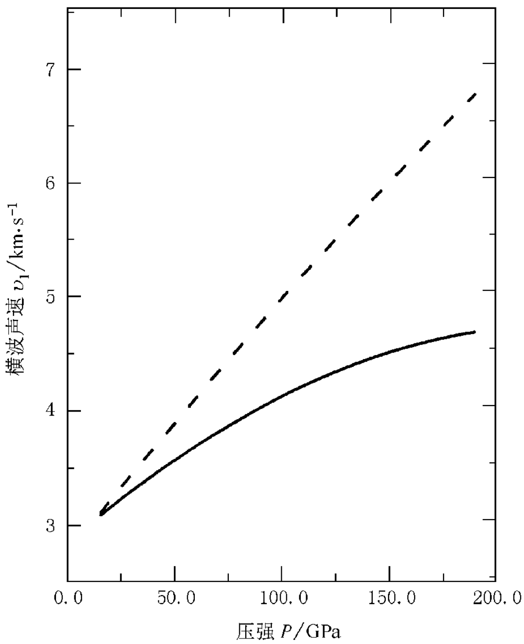

图 2 $G_P''=-0.033\ \mathrm{GPa}^{-1}$(实线)与 $G_P''=0$(虚线)时的横波声速 v_t 的计算结果比较

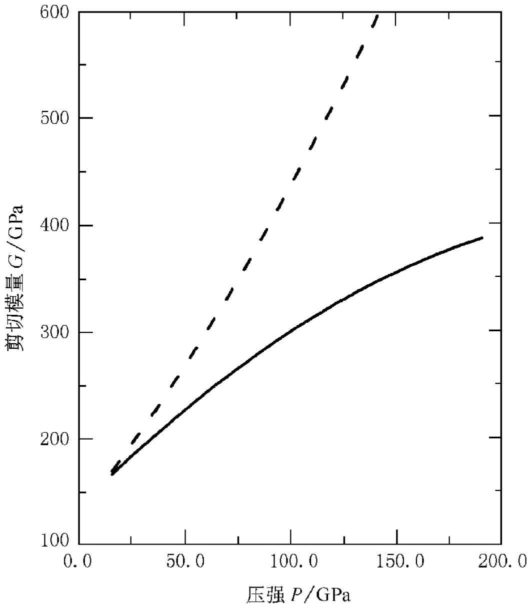

图 3 $G_P''=-0.033\ \mathrm{GPa}^{-1}$(实线)与 $G_P''=0$(虚线)时的剪切模量 G 的计算结果比较

5 结果分析与讨论

从以上三个图的计算结果的比较可以得到以下的两点认识：

1. 考虑 G_P'' 影响的计算结果明显低于不考虑 G_P'' 的计算结果. 特别是对横波声速和剪切模量的变化影响更大，对此结果，我们可做如下分析，假设不考虑 G_P'' 影响的剪切模量为 G_1，横波声速为 G_{t1} ;考虑 G_P'' 影响的剪切模量为 G_2，横波声速为 G_{t2}. 根据剪切模量 $G=\rho C_1^2$，并假设两种状态压缩到同一密度 ρ，则两种情况下的剪切模量之差有

$$G_1-G_2=\rho C_{t1}^2-\rho C_{t2}^2=\rho(C_{t1}-C_{t2})(C_{t1}+C_{t2}).$$

而横波声速[10] $C_t=\sqrt{\frac{3}{4}(C_L^2-C_B^2)}$，其中 C_L，C_B 分别为相应的纵波声速和体积声速. 由此可见，即使考虑 G''_P 影响与不考虑 G''_P 的影响计算的 C_L 结果相差不大，但影响剪切模量的主要参量是横波声速，经过以上的计算后，使得计算后的横波声速和剪切模量随压强的变化相差就明显增大，特别是剪切模量随压力的变化关系，两者的变化趋势都不一样.

2. 从计算结果的比较可以看到，考虑 G_P'' 影响的计算结果与不考虑 G_P'' 的计算结果的差别在低压下相差要小些，而在高压下却相差较大. 这说明，在低压下，不考虑 G_P'' 的影响是可以接受的，但在高压下，由于两者相差较大，因此，必须考虑 G_P'' 的影响，否则，将对计算结果带来较大误差，甚至是本质上的差别.

[1] T. Nicholas, A. M. Rajendran, in High Velocity Impact Dynamics, edited by J. A. Zukas (A Wiley-Interscience Publication, John Wiley&Sons Inc, 1990).

[2] A. Jones, Zukas *et al.*, Translator Z. Y. Zhang *et al.*, Dynamics of Impact (Beijing, 1987) (in Chinese) [A. 乔纳斯、朱卡斯等著，张志云等译，碰撞动力学(兵器工业出版社，北京，1987)].

[3] J. X. Gao, *Development of Mechanics*, **19**(1989), 336 (in Chinese) [高举贤，力学进展，**19**(1989), 336].

[4] W. H. Tang, R. Q. Zhang, An introduction to Equation of State and its Calculation (Changsha, 1999) (in Chinese) [汤文辉、张若棋，物态方程理论及计算概论，(国防科技大学出版社，长沙，1999)].

[5] F. Birch, *J. Geophys. Res.*, **83**(1987), 1257.

[6] T. S. Duffy, T. J. Ahrens., *J. Geophys. Res.*, **97** (1992), 4503.

[7] G. K. Straub, Extrapolation of the Shear Modulus to High Compressions, in Shock Compression of Condensed Matter-1991, eds. Schmidt S C, Dick R D, J W Forbes, and Tasker (Elsevier Science Publisher B. V., 1992), p. 391.

[8] J. G. Wang, W. F. Shi, *Chinese Journal of High Pressure Physcis*, **9** (1995), 195 (in Chinese) [王金贵、施卫丰，高压物理学报，**9** (1995), 195].

[9] D. J. Steinberg, *Int. J. Impact Engng.*, **5** (1987), 603.

[10] F. Q. Jing *et al.*, An Introduction to Experimental Equation of State (Science Press, Beijing, 1986) (in Chinese) [经福谦等著，实验物态方程导引（科学出版社，北京，1986）].

A THEORETICAL METHOD TO OBTAIN THE SECOND ORDER PARTIAL DERIVATIVE OF SHEAR MODULUS WITH RESPECT TO PRESSURE

HUA JING-SONG JIN FU-QIAN TAN HUA

(*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang* 621900, *China*)

(Received 15 March 2000; revised manuscript received 16 July 2000)

ABSTRACT

This article deduced a theoretical method to obtain the second order partial derivatice of shear modulus with respect to pressure G''_P from the theory of electron structure for crystal materials. We obtained $G''_P|_0 = -0.033\ \mathrm{GPa}^{-1}$ for 93 tungsten alloy, and applied this result in the finite strain theory of Birch-Murnaghan, when comparing the calculated results of $G''_P|_0 = -0.033\ \mathrm{GPa}^{-1}$ with the results of $G''_P = 0$, we find the results of $G''_P = 0$ are greater than that of the results of $G''_P \neq 0$. The difference between them becomes greater when the pressure increases. Therefore, we can conclude that G''_P cannot be neglected at high pressures.

Keywords: shear modulus, second partial derivative of shear modulus with respect to pressure, tungsten alloy, equation of state, finite strain theory

PACC: 6220