

一种计算剪切模量温度系数的方法

华劲松 经福谦 谭 华 周显明

(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重点实验室, 绵阳 621900)

(2003 年 8 月 22 日收到, 2004 年 7 月 19 日收到修改稿)

采用理论计算与动高压实验相结合的方法, 提出了一个计算剪切模量温度系数 G'_T 的新方法. 首先用理论方法计算一个中间数据 $G(P_s)$, 然后再与动高压实验数据 $G(P_H)$ 结合在一起计算出 G'_T , 并针对 93 钨合金材料进行了计算. 计算结果表明剪切模量温度系数 G'_T 开始是随温度和压力变化的, 但在高温高压下, 它趋近于一常数. 对于 93 钨合金, 这个常数约为 $-0.04\text{GPa}/^\circ\text{C}$. 同时, 这也是对 Steinberg 本构模型中的剪切模量温度系数为常数的一个证明. 并且, 当把这一常数代入剪切模量温度系数的计算式中, 将重新计算出的剪切模量与实验测得的剪切模量结果进行了比较, 结果表明二者符合得很好, 从而证明了本计算的剪切模量温度系数的正确性.

关键词: 有限应变物态方程, 剪切模量温度系数, Steinberg 本构模型, 动高压实验

PACC: 6220

1. 引 言

在进行材料动态加载下的数值模拟计算时, 通常要用到材料的本构关系模型, 所谓本构模型就是反映材料的应力与应变之间关系的表达式. 材料的本构关系模型有多种形式, 它随材料、加载应力等的不同而变化. 但在较高的温度及压强条件下, 有一个使用较为普遍的高温高压下的本构关系模型, 即 Steinberg 模型. 这个模型的表达式为^[1,2]

$$G = G_0 \left[1 + \frac{G'_p}{G_0} \frac{P}{\eta^{1/3}} + \frac{G'_T}{G_0} (T - 300) \right], \quad (1)$$

$$Y = Y_0 [1 + \beta(\epsilon + \epsilon_i)]^n \times \left[1 + \frac{Y'_p}{Y_0} \frac{P}{\eta^{1/3}} + \frac{G'_T}{G_0} (T - 300) \right], \quad (2)$$

其中 η 为压缩比, $\eta = \frac{V_0}{V}$, β, n 为加工硬化参数, ϵ 为应变, ϵ_i 为初始应变, 下标“0”表示初始状态, G'_p , Y'_p 及 G'_T 分别表示剪切模量 G 、屈服强度 Y 对压力 P 、温度 T 的一阶偏导数. 这个公式有一个假设条件是 Y/G 为常数, 且有 $Y'_p/Y_0 = G'_p/G_0$, 但对于其中的 G'_T 是否为常数及怎样获得却未提及, 但使用这个本构模型 G'_T 是必须的.

为此, 本文提出了一个计算剪切模量温度系数 G'_T 的方法, 首先从 Birch 的有限应变理论出发, 用理论方法计算一个中间数据 $G(P_s)$ (等熵压缩状态下

的剪切模量), 然后再与动高压实验数据 $G(P_H)$ (冲击压缩状态下的剪切模量) 结合在一起计算出 G'_T .

2. 等熵压缩下剪切模量的理论计算方法

高压下的应变不属微小应变, 是有限应变. 建立在有限应变理论基础上的 Birch-Murnaghan 物态方程可以用于描述等熵条件下压力和应变的关系. Birch 证明^[3], 定义一个欧拉应变 f ,

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

和归一化的压力 F ,

$$F = \frac{P_s}{3(1+2f)^{5/2}}, \quad (4)$$

式中 P_s 为等熵压力. 则在 F - f 坐标系中, 利用级数展开方法, 可以得到四阶的 Birch-Murnaghan 方程, 写为

$$F = a_0 + a_1 f + a_2 f^2, \quad (5)$$

式中

$$a_0 = K_{0s}, \quad (6)$$

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

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

其中 K_{0s} , K'_{0s} 和 K''_{0s} 分别表示零压下的等熵体积模量及其对压力的一阶和二阶偏导数.

类似地,通过引入归一化的弹性模量,也可以把等熵弹性模量表示成类似的形式.对于剪切模量,可以把归一化剪切模量 M_G 定义为^[4]

$$M_G = \frac{G}{(1 + 2f)^{5/2}}, \quad (8)$$

则有

$$M_G = a_{G0} + a_{G1}f + a_{G2}f^2, \quad (9)$$

式中的各系数项分别是

$$a_{G0} = G_0, \quad (10)$$

$$a_{G1} = 3K_{0S}G'_0 - 5G_0, \quad (11)$$

$$a_{G2} = \frac{9}{2} \left[K_{0S}^2 \left(G''_0 + (K'_{0S} - 4) \frac{G'_0}{K_{0S}} \right) + \frac{35G_0}{9} \right], \quad (12)$$

其中 G_0 , G'_0 和 G''_0 分别表示零压下等熵剪切模量及其对压力的一阶和二阶偏导数.只要知道了上述体积模量和剪切模量及其在零压下的一阶和二阶导数值,便可根据(8)–(12)式计算出 $\alpha(P_S)$ 关系.

Straub 等人^[5]根据电子结构的一种量子力学方法计算结果,提出了一个计算剪切模量 G 的解析式

$$G = G_0 + \frac{g_1(a - a_0)}{a^2} e^{-g_2(a - a_0)}, \quad (13)$$

式中有三个可调参数 g_1 , g_2 和 a ,且有关系式

$$V = \frac{1}{\rho} = \frac{a^3}{\xi A / N_0}, \quad (14)$$

其中 A 为原子量, N_0 为阿伏伽德罗常数, ρ 为密度.对于 fcc 结构晶体(例如 Cu), $\xi = 2$; 对于 bcc 结构晶体(例如 W), $\xi = 4$.如果密度是以 g/cm^3 为单位,则有关系式 $a^3 = \alpha^3 11.21 \xi A / \rho$, 这里 α 为玻尔半径($\alpha = 0.529167 \times 10^{-8} \text{ cm}$).

现在的问题是需计算 G''_p .根据文献[6]的推导, G''_p 的计算公式

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 G}{\partial P^2} \right|_{a_0} &= \frac{2g_1}{a_0} \left(g_2 + \frac{2}{a_0} \right) \left(\frac{V_0}{K_0} \right) \frac{\xi}{3a_0^2} - \frac{g_1}{a_0^2} \\ &\times \left[-\frac{\xi}{3a_0^2} \frac{V_0^2 \left(1 + \left. \frac{\partial K}{\partial P} \right|_0 \right)}{K_0^2} + \frac{V_0^2 \xi^2}{3K_0^2} \frac{2}{3a_0^5} \right], \end{aligned} \quad (15)$$

以 93W 合金材料为例,代入 93W 合金的有关实验参数^[7–10]

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 16.96 \text{ g/cm}^3, K_0 = 270 \text{ GPa}, \xi = 2, \\ G_0 &= 132 \text{ GPa}, G'_p = 1.794, K'_p = 4.108, \\ \gamma_0 &= 1.54, C_V = 0.1597 \text{ J/g} \cdot \text{K}, T_0 = 29 \text{ K}, \\ C_0 &= 4.008 \text{ km/s}, \lambda = 1.277, \end{aligned} \quad (16)$$

对于 93W 合金材料可以得到

$$G''_p = -0.033 \text{ GPa}^{-1}. \quad (17)$$

3. 冲击压缩下剪切模量的实验测量

$\alpha(P_H)$ 的获得是通过冲击压缩实验,即由 Asay 和 Chhabildas^[11]提出的冲击/再冲击和冲击/卸载实验方法.通过以上实验方法,采用 VISAR 测试技术,可以测得材料的拉氏声速 C_L ,即相对于粒子运动的声速,它与欧拉声速 C_E 之间的关系是

$$C_E = (\rho_0/\rho)C_L, \quad (18)$$

而根据声速定义^[12],剪切模量 G 与声速的关系是

$$G = (3/4)\rho(C_{L,E}^2 - C_{b,E}^2), \quad (19)$$

式中 $C_{L,E}$ 是拉氏纵波声速, $C_{b,E}$ 是体积声速,可由计算得到.

由此可以得到冲击压缩下材料的剪切模量.根据对 93W 合金材料进行的 7 发实验,实测拉氏声速及得到的冲击压缩下的剪切模量见表 1.

表 1 冲击压缩状态下 93W 合金的(欧拉坐标)的实验结果

压力 P_H/GPa	应变 ϵ	欧拉声速 $C_E/(\text{km/s})$	体积声速 $C_b/(\text{km/s})$	横波声速 $C_t/(\text{km/s})$	剪切模量 G/GPa
16*	0.05	5.19	4.32	2.74	139.7
32*	0.089	5.61	4.58	2.83	155.2
96*	0.193	6.08	5.35	3.32	241.9
104	0.210	6.21	5.43	3.35	248.3
113	0.213	6.23	5.51	3.40	258.7
130	0.236	6.45	5.66	3.45	272.3
161**	0.256	6.75	5.91	3.59	305.8

* 来源文献[8], **来源文献[9].

4. 剪切模量温度系数的计算

根据以上冲击压缩下剪切模量的实测结果,可以由最小二乘法拟合出剪切模量随冲击压力变化的关系,如图 1 中的虚线所示.

把 93W 合金材料的 K_{0S} , K'_{0S} 和 G_0 , G'_0 数据和(17)式的 G''_p 数据代入(10)–(12)式,便可得到对于 93W 合金材料的 $G(P_S)$ 数据,其结果见图 1 中的实线.

从图 1 看到,在同一压力下, $\alpha(P_S)$ 值比 $\alpha(P_H)$ 高,这是由于两者的热压贡献不一样造成的.由于

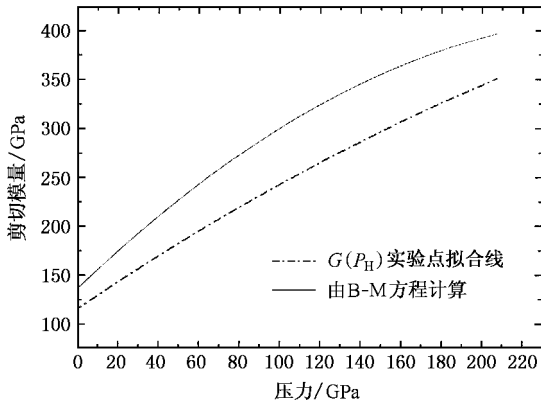


图 1 实测冲击压缩的剪切模量和等熵压缩下的计算剪切模量比较

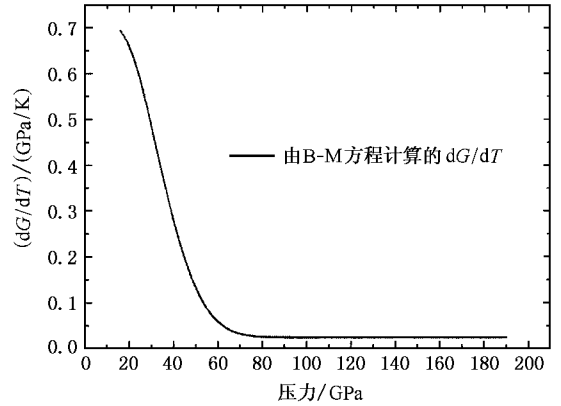


图 2 剪切模量的温度系数计算结果

P_H 中的热压高于 P_S 中的热压, 而 $G(P_H)$ 又小于 $G(P_S)$ 故定性地看 $\left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_p$ 应为负值. 从定量上考虑, 等熵线温度 T_S 和 Hugoniot 线温度 T_H 可分别用下式计算^[13]:

$$T_S = T_0 \exp(\gamma_0 \eta), \quad (20)$$

$$T_H = T_0 \exp(\gamma_0 \eta) + \frac{C_0^2}{C_V} \exp(\gamma_0 \eta) \times \int_0^\eta \frac{\lambda \eta^2}{(1 - \lambda \eta)^3} \exp(-\gamma_0 \eta) \lambda \eta, \quad (21)$$

式中 T_0 为室温, γ_0 为常态下 Gruneisen 系数, $\eta = 1 - (\rho_0/\rho)$. 注意, 这里计算得到的是 $T_S - \rho$ 和 $T_H - \rho$ 关系, 但希望得到的是 $T_S - P_S$ 和 $T_H - P_H$ 关系, 前一个换算可以直接通过(3)–(7)式进行, 后一个换算可以通过下式进行:

$$P_H = \rho_0 C_0^2 \frac{\eta}{(1 - \lambda \eta)^3}. \quad (22)$$

有了(20)(21)式和(3)–(7)式, 便可进行 $T_S - P_S$ 和 $T_H - P_H$ 关系的计算. 计算用到的有关参数见(16)式.

有了上面的结果, 就可以着手计算 G'_T , 在给定压力 P 下, 从图 1 可以查得 G_H 和 G_S (下标 H, S 分别代表冲击压缩和等熵压缩条件下的值), 再用(21)(22)式计算出对应于该压力点的温度 T_H , 用(20)和(3)–(7)式计算对应于该压力点的温度 T_S , 就可以通过

$$\left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_p \cong \frac{G_H - G_S}{T_H - T_S} \quad (23)$$

计算 $\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p$. 计算结果见图 2.

从图 2 的计算结果看到, 剪切模量温度系数在较低压力, 对 93W 合金, 约 80GPa 以下, 系数随压力的变化很明显, 当然, 不同的材料这个值是不一样的, 在较高压力下(80GPa 以上), 系数趋于一常数. 对此可以分析如下, 在较低压力时, 由于等熵线与冲击压缩线近似一致, T_H 与 T_S 相差不大, 即 ΔT 变化较小, 而剪切模量的变化却十分明显, 即 ΔG 变化较快, 这样 $\Delta G/\Delta T$ 变化较大; 在较高压力下, 等熵线与冲击压缩线差别较大, ΔT 变化较大, 虽然 ΔG 也在变化, 但增长速度不及 ΔT 快, 这样 $\Delta G/\Delta T$ 变化较小, 基本趋于一常数值. 这一系数变化规律, 实际上反映了材料内部的物理过程变化, 即在较低压力时, 在材料内部的温度和压力这两个因素中, 温度因素的作用较小, 压力因素作用较大; 当压力增加到一定值后, 温度与压力的作用相当, 这两个因素的作用达到一个平衡. 此时, 即表现为 $\Delta G/\Delta T$ 趋于一常数. 如果进一步增加压力, 则温度因素将起主要作用, 材料将出现软化效应.

5. 冲击压缩下剪切模量的反算

在理论上, $\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p$ 的值可以随压力而变化, 但实际的计算结果表明它在高压下基本上是一个常数, 对 93W 合金约等于 $-0.04 \text{ GPa}/^\circ\text{C}$. 为此, 我们把(23)式改写为对 G_S 的一个修正式, 将修正后的值用 G 表示, 故有

$$G = G_S - 0.04(T_H - T_S), \quad (24)$$

式中剪切模量单位 GPa, 温度单位 $^\circ\text{C}$. 这样在已知剪切模量温度系数后, 可以反算冲击压缩下的剪切模量. 反算结果示于图 3. 从图 3 中看出, 反算的 G 值

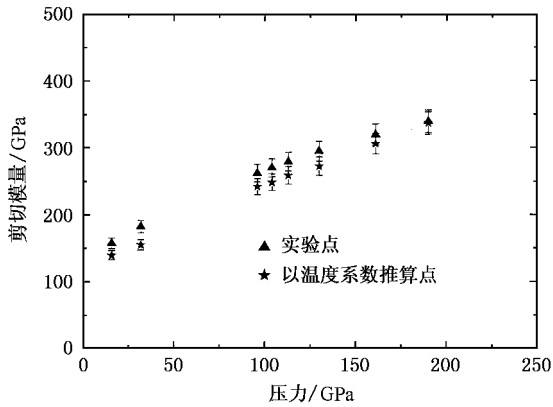


图3 以温度系数反算的冲击压缩下剪切模量与实测结果比较

基本上与 G_H 实验值相符合,说明高温高压下的 G_T 应该取为

$$G_T = -0.04 \text{ GPa}/^\circ\text{C}. \quad (25)$$

同时,从这个结论中可以得到以下两点基本认识,一是如果知道了某一材料的温度系数,就可以反算这种材料在冲击压缩下的剪切模量;二是间接证

明了 Steinberg 模型中剪切模量温度系数为一常数的假设.

6. 结 论

通过以上的分析可以看到,剪切模量的温度系数在材料的本构关系中是一个重要的参量.本文通过理论计算与动高压实验相结合的方法,提出了一种计算剪切模量温度系数的方法.经过以 93W 合金材料为例的计算分析,结果表明,材料的剪切模量温度系数开始是随压力变化的,但在较高压力下接近于一常数.对于 93W 合金而言,这一常数约为 $-0.04 \text{ GPa}/^\circ\text{C}$. 通过以温度系数反算冲击压缩下的剪切模量,计算结果与实测结果符合较好,从而说明了如果知道了某一材料的剪切模量温度系数,可以推算出该材料在任一冲击压力下的剪切模量.同时,温度系数为一常数的结论也证明了 Steinberg 模型中的基本假设,为该模型的适用性提供了依据.

- [1] Steinberg D J , Cochran S G and Guinan M W 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 1498
- [2] Steinberg D J 1987 *Int. J. Impact Engng.* **5** 603
- [3] Birch F 1978 *J. Geophys. Res.* **83** (B3) 1257
- [4] Dully T S and Ahrens T J 1992 *J. Geophys. Res.* **97** (B4) 4503
- [5] Straub G K 1992 *Shock Compression of Condensed Matter* Schmidt S C *et al* ed(New York : Elsevier Science Publisher) p391
- [6] Hua J S , Jing F Q and Tan H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2443(in Chinese) 华劲松、经福谦、谭 华 2000 *物理学报* **49** 2443
- [7] Wang J G and Si W F 1995 *Chinese Journal of High Pressure Physics* **9** 195(in Chinese) 王金贵、施卫丰 1995 *高压物理学报* **9** 195
- [8] Zhang J Y , Yu J L , Tan H 1997 *Chinese Journal of High Pressure Physics* **11** 254(in Chinese) 张江跃、虞吉林、谭 华 1997

高压物理学报 **11** 254]

- [9] Zhou X M , Jing F Q and Hu J B 1996 *Chin. Phys. Lett.* **13** 761
- [10] Zhang W J , Zhang Y S and Song C X 1995 *Chinese Journal of High Pressure Physics* **15** 44(in Chinese) 张万甲、张玉松、宋春香 1995 *高压物理学报* **15** 44]
- [11] Asay J R and Chhabildas L C 1981 *Shock Waves and High-Strain-Rate Phenomena in Metals* Meyers M A , Murr L E ed(New York : Plenum Press) p417
- [12] Chua J O and Ruoff A L 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 4659
- [13] Jing F Q *et al* 1986 *Introduction to Experimental Equation of State* (Beijing Science Press)(in Chinese) 经福谦等 1986 *实验物态方程导引*(北京 科学出版社)]

A method to estimate the temperature coefficient for shear modulus

Hua Jing-Song Jin Fu-Qian Tan Hua Zhuo Xian-Ming

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

(Received 22 August 2003; revised manuscript received 19 July 2004)

Abstract

This article put forward a method to calculate the temperature coefficient for shear modulus (G'_T) by means of theoretical calculation and dynamic experiments. Firstly, introduce a calculation data ($\alpha(P_S)$), then combine with dynamic experimental data ($\alpha(P_H)$) to obtain G'_T . Taking tungsten alloy as an example, the results show that G'_T varies with pressure and temperature at the beginning, but at high pressure and high temperature, it is almost a constant of $-0.04\text{Gpa}/^\circ\text{C}$ for tungsten alloy. This also verifies the assumption in Steinberg constitutive model that G'_T should be a constant. When we applied this constant to calculate the corrected shear modulus under shock compression, the calculated results are in accordance with the experimental data.

Keywords: finite strain equation of state, temperature coefficient for shear modulus, Steinberg constitutive model, dynamic loading experiment

PACC: 6220