

# 铈低压冲击相变数值模拟研究\*

潘昊<sup>1)2)</sup> 胡晓棉<sup>1)2)†</sup> 吴子辉<sup>1)</sup> 戴诚达<sup>3)</sup> 吴强<sup>3)</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理国家重点实验室, 北京 100088)

3) (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 621900)

(2012年1月10日收到; 2012年4月26日收到修改稿)

对金属铈低压冲击  $\gamma \rightarrow \alpha$  相变进行了数值模拟研究. 冲击加载实验的速度剖面结果表明, 铈的低压相变过程中两相之间的转换较为光滑, 无明显间断, 其相变过程存在动态因素. 通过分析金属铈低压冲击加载和卸载下的典型物理过程, 对材料本构关系、Hugoniot 关系和相变与逆相变过程进行了理论研究. 获取了铈低压相变前后的本构关系及状态方程, 并建立了非平衡相变理论模型. 数值计算结果与平面冲击实验符合较好, 表明该相变动态模型能够较好地描述铈的低压冲击加载和卸载过程.

**关键词:** 相变, 冲击波, 本构关系, 铈

**PACS:** 64.70.Kd, 64.30.Ef, 62.50.Ef

## 1 引言

作为多形相变材料的一种, 金属铈 (Ce) 的电子态非常容易出现跃迁, 故其具有非常丰富的相变信息. 在常温准静态加载下, 当压力达到 0.7 GPa 时, Ce 材料会出现  $\gamma \rightarrow \alpha$  相的转变, 体积变化约 15%. 对于冲击加载和卸载, 材料相变将变得更加复杂, 并与塑性流动过程耦合, 其相变过程一般认为不再是平衡过程, 而与加载路径相关. 需要通过实验与数值模拟相互结合才能更好地解释材料的低压相变过程.

冲击加载下, 多形相变材料的动力学响应一直是冲击动力学及材料科学的重要内容. 对 Fe, Bi,  $\delta$ -Pu 等材料的冲击相变和熔化过程已经进行了很多理论及实验研究<sup>[1-8]</sup>, 在材料各单相的状态方程、相变过程的理论建模方面取得了很多成果, 特别是分子动力学的计算结果表明<sup>[9-11]</sup>, 卸载时的

逆相变过程往往与加载时的相变不同. El'kin 等<sup>[12]</sup>从静力学数据出发, 研究了金属 Ce 的低压相变及熔化过程, 得到了低压下 Ce 的完全形式状态方程 ( $0 < p < 5$  GPa,  $300$  K  $< T < 1000$  K), 但该方程的动态相变压力点偏低 (0.75 GPa, 实验 0.9 GPa), Hugoniot 关系与实验也有偏离.

上述研究多集中于较高压力的相变行为研究, 对低压相变过程或者研究较少, 或者采用的物理模型较为简单, 没有细致考虑材料弹塑性效应的影响, 只有郭扬波等<sup>[13]</sup>在建立 Fe-Ni 合金冲击相变本构时, 考虑了偏应力及静水压的共同影响. 对于 Ce 的低压相变, 其应力偏量与静水压相比不可忽略, 由塑性变形引起的熵增和温升可影响材料的相变过程, 反之, 材料相变前后晶体结构的变化也会改变材料的强度及声速, 因此在 Ce 的低压相变过程中需要考虑弹塑性的影响. 另外, Ce 的平面冲击实验表明, 其  $\gamma \rightarrow \alpha$  相的转变非常光滑, 与平衡相变的描述存在明显差异, 需要考虑相变的非平衡过程, 即

\* 爆炸科学与技术国家重点实验室开放基金 (批准号: KFJJ11-5M) 资助的课题.

† E-mail: hu\_xiaomian@iapcm.ac.cn

相变的动态效应。

本文通过平面冲击实验, 获取了两个更低压力点 (1.32 和 1.16 GPa) 的冲击加载实验数据, 通过分析冲击加载和卸载下 Ce 材料内波的结构及运动过程, 对 Ce 材料低压动态响应中的三个重要问题, 即材料本构关系、低压 Hugoniot 关系和相变与逆相变进行了深入的分析, 并且建立了相变的动态理论模型, 平面冲击正碰及反碰实验的数值计算结果表明, 该物理模型可以较为合理地描述 Ce 的冲击  $\gamma \rightarrow \alpha$  相变和卸载逆相变过程。

## 2 Ce 材料冲击相变理论模型

Ce 在低压冲击加载和卸载下会发生  $\gamma \rightarrow \alpha$  相的转变及逆相变。一个典型的 Ce 平面冲击压力剖面如图 1 所示。

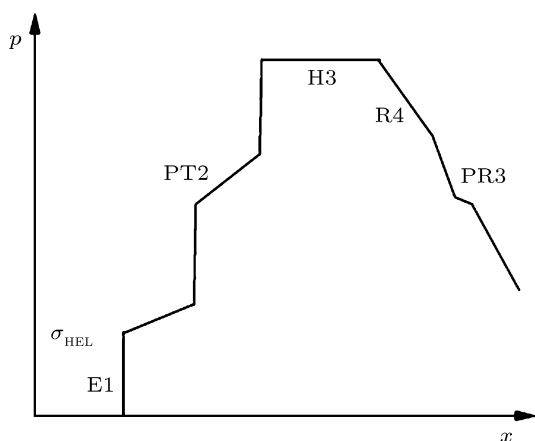


图 1 Ce 材料冲击加载和卸载的压力剖面

由图 1 可见, 一个典型的低压相变材料压力剖面包含了以下三个重要过程。

1) 弹性波 E1 和准弹性卸载波 R4. E1 反映了材料加载时的本构关系特征, 其平台值表示材料的弹性 Hugoniot 极限  $\sigma_{\text{HEL}}$ , 从中可以提取弹性声速、杨氏模量、初始屈服强度等信息. R4 反映了材料发生相变后卸载时本构关系的变化, 包含了纵波声速、剪切模量等信息。

2) 平台 H3 是材料的 Hugoniot 压力平台, 反映了材料的冲击 Hugoniot 关系, 包含了冲击波的速度和压力等信息。

3) 相变波 PT2 和 PR3 反映了材料相变及逆相变过程, 包含了相变体积、相变压力和相变路径

等信息。

以上三个重要过程分别代表了材料的本构关系、低压 Hugoniot 关系和相变与逆相变过程, 这三个关系是相变材料低压动态响应的重要问题, 合理描述这三个问题是物理建模的关键。

### 2.1 低压下 Ce 材料的本构关系

通常认为材料发生相变时, 其混合相的屈服强度和剪切模量由各单相所占份额的平均所得, 本文采用多相 SCG (Steinberg-Cochran-Guinan) 本构模型<sup>[14-16]</sup> 述相变材料的本构关系:

$$\mu = \sum_i \theta_i \mu_{0i} \left[ 1 + b_i \frac{(p - p_{0i})}{(v_{0i} \rho_i)^{1/3}} + h_i (T - T_{0i}) \right], \quad (1)$$

$$Y = \min[Y_0(1 + \beta(\varepsilon + \varepsilon_i))^{n_2}, Y_{\max}] \times \sum_i \chi_i \theta_i \mu_{0i} \left[ 1 + b_i \frac{(p - p_{0i})}{(v_{0i} \rho_i)^{1/3}} + h_i (T - T_{0i}) \right], \quad (2)$$

其中下标  $i$  表示各单相,  $\theta$  表示质量份额,  $Y$  表示材料的屈服强度,  $\mu$  表示剪切模量,  $p$  表示静水压,  $v$  表示比容,  $\rho$  表示密度,  $T$  为温度,  $Y_0$  和  $\mu_0$  表示初始屈服强度和剪切模量,  $Y_{\max}$  表示最大屈服强度,  $\beta$ ,  $n_2$  为材料的加工硬化系数,  $\chi$ ,  $b$ ,  $h$  为材料常数,  $v_0$  表示初始体积,  $T_0$  为初始温度,  $p_0$  为初始压力。

由平面加载实验可得  $\sigma_{\text{HEL}} = 0.15$  GPa, 又  $Y_0 = \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \sigma_{\text{HEL}}$ ,  $\nu$  是泊松比, 取  $\nu = 0.23$ , 可得  $Y_0 = 0.1$  GPa. 加工硬化参数  $\beta$ ,  $n_2$  可由 Ce 的分离式霍普森压杆 (SHPB) 实验得到, 这里取  $\beta = 142$ ,  $n_2 = 0.2519$ . 当 Ce 发生  $\gamma \rightarrow \alpha$  相变时, 相变前后材料晶体结构基本相同<sup>[17]</sup>, 这里假设相变前后材料强度不发生变化, 即  $\chi_i = 1$ . 由数值模拟平面冲击实验可给出各单相的剪切模量,  $\gamma$  相  $\mu_{0\gamma} = 10$  GPa,  $\alpha$  相  $\mu_{0\alpha} = 16$  GPa, 静态实验给出的  $\mu_{0\gamma} = 12$  GPa,  $\mu_{0\alpha} = 16$  GPa<sup>[18]</sup>, 两者结果较为接近。

由 (1) 和 (2) 式可以描述 Ce 材料发生加载时的本构关系, 而当材料发生卸载时, 其弹塑性效应与加载时并不相同, 平面实验中会产生准弹性卸载波, 其中的塑性流动机理尚不十分清楚<sup>[19-21]</sup>. Steinberg 等<sup>[14]</sup> 引入材料的 Baushinger 效应解释这一现象<sup>[22]</sup>, 即材料的剪切模量会随着卸载深度的

改变发生变化, 见 (3) 和 (4) 式:

$$\mu_{\text{eff}} = \phi \mu_{\text{SG}}, \quad (3)$$

$$\phi = \begin{cases} f_1 + \frac{s_1}{s_{1\text{max}}} (1 - f_1) & 0 \leq s_1 \leq s_{1\text{max}}, \\ f_1 - \frac{s_1}{s_{1\text{max}}} (f_2 - f_1) & -s_{1\text{max}} \leq s_1 < 0, \end{cases} \quad (4)$$

其中,  $\mu_{\text{SG}}$  由 (1) 式计算得到;  $\mu_{\text{eff}}$  表示卸载时的有效剪切模量;  $s_1$  表示加载方向的应力偏量,  $s_{1\text{max}}$  表示最大应力偏量;  $f_1, f_2$  为可调系数, 通过数值计算 Ce 的平面实验后发现,  $f_1 = 0.9, f_2 = 0.02$  适合大多数的情况.

## 2.2 低压 Hugoniot 关系

通过以上论述可知, 低压下的冲击 Hugoniot 关系考虑偏应力的影响, 其冲击波前后关系见 (5)—(8) 式:

$$[u] = \rho_0 D [v], \quad (5)$$

$$[\sigma_x] = -\rho_0 D [u], \quad (6)$$

$$[E] = -\frac{1}{2} (\sigma_x + \sigma_{x0}) [v], \quad (7)$$

$$\sigma_x = -p + s_{xx}, \quad (8)$$

其中  $[ ]$  表示冲击波前后物理之差,  $\sigma$  表示应力,  $p$  表示静水压,  $s$  表示应力偏量,  $v$  表示体积,  $u$  表示当地速度,  $D$  表示冲击波速度,  $E$  表示单位质量内能. 求解 (5)—(8) 式需要知道材料的状态方程和本构关系.

Duval 和 Graham<sup>[5]</sup> 提出了一种经验多相状态方程的形式, 各单相的状态方程如 (9)—(12) 式:

$$p = p_{c_i} + \left(\frac{\gamma}{v}\right)_i C_{v_i} (T - T_{0i}), \quad (9)$$

$$E = E_{c_i} + E_{0i} + \left(\frac{\gamma}{v}\right)_i C_{v_i} T_{0i} (v - v_{0i}) + C_{v_i} (T - T_{0i}), \quad (10)$$

$$S = S_{0i} + C_{v_i} \ln(T/T_{0i}) + C_{v_i} \left(\frac{\gamma}{v}\right)_i (v - v_{0i}), \quad (11)$$

$$G = E + pv - TS, \quad (12)$$

其中  $p_c$  表示冷压,  $E_c$  表示冷能,  $C_v$  表示比热,  $\gamma$  表示 Grüneisen 系数,  $S$  表示熵,  $G$  表示吉布斯自由能. 在较低压力下  $E_c$  起主要作用, 这里冷能  $E_c$

取 Vinet 形式<sup>[23]</sup>, 见 (13) 式:

$$E_c = \frac{9B_0 v_{0k}}{\eta^2} \left\{ e^{\eta(1-\varphi^{1/3})} \left[ \eta \left( 1 - \varphi^{1/3} \right) - 1 \right] + 1 \right\}, \quad (13)$$

其中  $\varphi = v/v_{0i}$ ,  $v_{0i}$  表示  $T = T_0, p = 0$  时的体积,  $B_0$  表示  $T = T_0, p = 0$  体积模量,  $\eta = 1.5(n - 1)$ ,  $n = dB/dp$ , 表示体积模量随压力的导数.

两相之间在相界上需满足<sup>[5]</sup>(14), (15) 式:

$$S_2^T - S_1^T = (v_2^T - v_1^T) \frac{dp}{dT}, \quad (14)$$

$$E_2^T - E_1^T = -p^T (v_2^T - v_1^T) + T^T (s_2^T - s_1^T). \quad (15)$$

Ce 材料状态方程 (EOS) 参数选取的基本方法是,  $\gamma$  相可由静高压实验<sup>[22]</sup> 给出,  $\alpha$  相可由高压 Hugoniot 关系<sup>[24]</sup> 给出. 起始相变点和相边界  $dp/dT$ , 可结合平面冲击实验给定, 具体的参数见表 1.

表 1 Ce 材料状态方程参数

	$\gamma$ 相	$\alpha$ 相
$B_0$ /GPa	19.1 <sup>[22]</sup>	44.6
$n$	-10.0 <sup>[22]</sup>	3.60
$v_0$ /cm <sup>3</sup> ·g <sup>-1</sup>	0.14954	0.12048
$T_0$ /K	300.0	300.0
$S_0$ /J·g <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	0.0	-0.094
$E_0$ /J·g <sup>-1</sup>	0.0	-8.0
$\gamma/v$ /g·cm <sup>-3</sup>	3.27	7.1
$Cv$ /J·g <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	0.177	0.2
$p^T$ /GPa	0.8	0.8
$T^T$ /K	307	307
$dp/dT$ /GPa·K <sup>-1</sup>	0.004	0.004

值得注意的是, Hugoniot 关系的建立需根据冲击加载下材料内的波系结构确定. 已知 Ce 材料随着压力升高, 除去弹性波外, 塑性波会发生从单波到双波再单波的转变, 在构造 Hugoniot 关系时, 必须考虑这一变化. 当为双波结构时, 应取相变起始点为初始状态点, 如果是单波结构, 则取弹性波后状态为起点. 综上所述, 采用自行构造的多相状态方程及本构关系, 计算得到了 Ce 的 Hugoniot 关系, 见图 2.

由图 2 可见, 当在 Hugoniot 关系中考虑了偏应力的影响后, 计算结果与实验更加相符. 在一维应

变下,由塑性畸变引起的熵增可以表示为<sup>[25]</sup>

$$TdS_p = S_{xx}v_0 \left( d\varepsilon_x - \frac{d\tau}{\mu} \right) = \frac{4}{3}v_0\tau \left( d\varepsilon_x - \frac{d\tau}{\mu} \right), \quad (16)$$

其中  $S_p$  表示由剪切变形引起的熵增,  $\tau$  表示剪切应力,  $\varepsilon_x$  表示应变. 经分析可得, 材料的剪切应力可使相变部分的温度提高 4%—6%, 当压力 < 2 GPa 时, 剪切应力引起的熵增占总的熵增份额较大, 对于 Hugoniot 关系的影响较为明显.

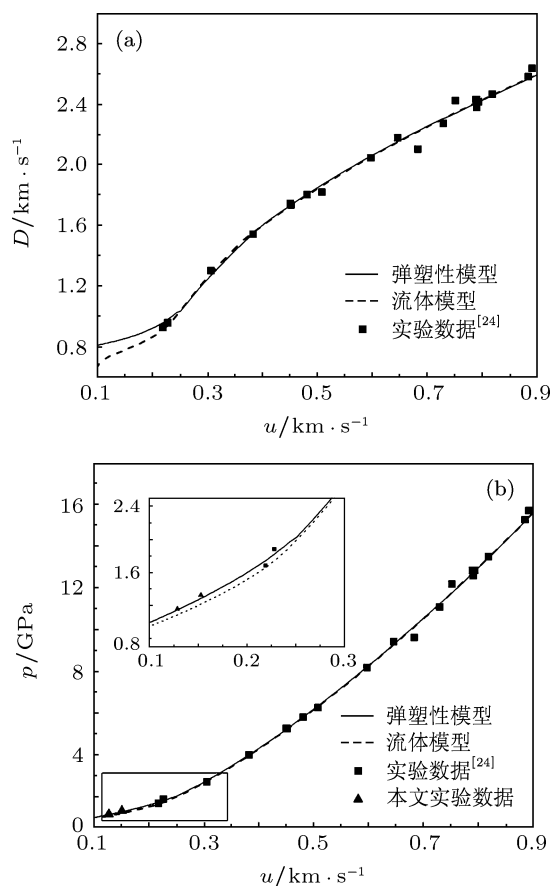


图2 流体和弹塑性模型分别计算获取的 Ce 的 Hugoniot 关系 (a)  $D-u$ ; (b)  $p-u$

### 2.3 相变与逆相变

通常假设材料的相变过程为平衡相变, 即材料相变过程中, 两相的吉布斯自由能相等. 当加载速度比较缓慢时, 两相可以形成平衡状态, 而当加载速度较快时, 相变过程来不及形成平衡状态, 特别是对于冲击相变而言, 加载时应变率可以达到  $10^5 \text{ s}^{-1}$ , 相变的动态过程特别明显, 平面冲击实验结果已表明 Ce 材料的相变可能存在非平衡过程.

当相变为非平衡相变时, 吉布斯自由能不再相等, 相变过程由两相的吉布斯自由能差推动<sup>[3,6]</sup>:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{k}{T} (G_\gamma - G_\alpha) \quad (0 \leq x \leq 1, p \geq p^T), \quad (17)$$

其中  $t$  为时间,  $x$  为  $\alpha$  相质量份额,  $k$  为常数, 这里  $k = 0.0014 \text{ g}\cdot\text{J}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ,  $p^T$  是相变起始压力.

以上对相变动力学中本构关系、低压 Hugoniot 关系和相变与逆相变的三个关键问题进行了分析和理论建模, 试图更为合理地描述 Ce 材料的动态相变过程, 模型的合理与否需要通过实验予以检验.

### 3 实验

冲击加载是研究材料动态相变的典型加载方式. 通常平面冲击实验的速度曲线可以获取冲击加载下 Ce 的相变和本构关系的耦合信息. 本文通过平面冲击加载实验正碰技术获取了

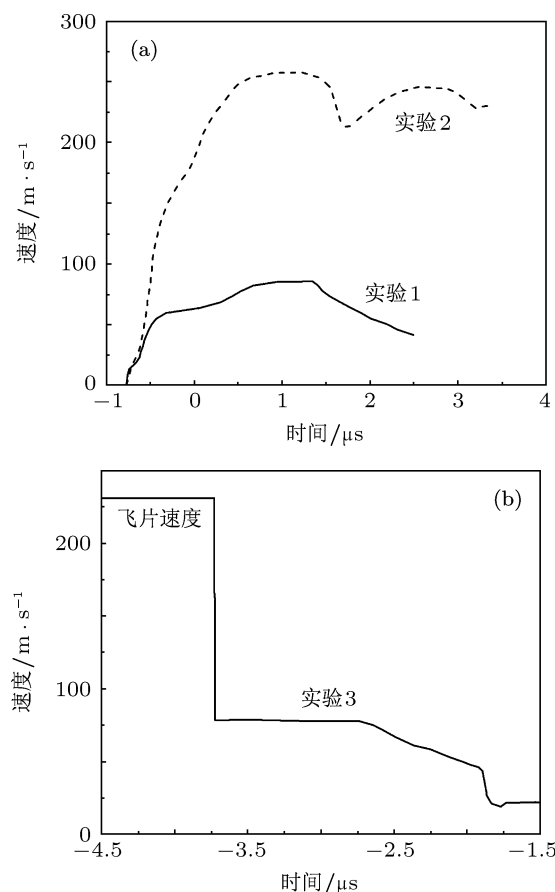


图3 Ce 材料低压平面冲击实验速度曲线 (a) 正碰; (b) 反碰

Ce 材料 (1.32 GPa) 的自由面速度以及 Ce/Z-切石英窗口速度, 并通过反碰技术获取了 Ce 材料 (1.16 GPa) 的卸载速度, 实验结果和参数见图 3 和表 2.

表 2 Ce 材料低压平面冲击实验参数

实验号	飞片	靶板	飞片速度/m·s <sup>-1</sup>	压力/GPa
1	Z-切石英	Ce/Z-切石英	197.3	1.32
2	Z-切石英	Ce	197.3	1.32
3	Ce	Z-切石英	230.3	1.16

由图 3 可见, 由于 Ce 材料  $\gamma$  相的  $(\partial^2 v / \partial p^2)_s < 0$ , 因此无法形成冲击波, 只能形成等熵压缩波, 正碰实验的速度曲线观察到了这一现象. Ce 材料的相变起始应力大约是 0.9 GPa. 无论加载还是卸载过程, 相变的转换比较光滑, 两个塑性波之间不存在明显的间断过程, 这表明 Ce 材料的  $\gamma \leftrightarrow \alpha$  相变存在非平衡过程. 从以上实验可以获取 Ce 材料  $\gamma \leftrightarrow \alpha$  动态相变的众多信息, 为动态相变的理论模型提供参数以更好地解释 Ce 材料低压动

态响应过程.

## 4 计算结果

采用以上构造的相变动态模型对平面冲击实验 1, 2, 3 和 56-04-15 实验 [22] 进行了计算, 并与平衡相变所得计算结果进行比较. 这里 Z-切石英的状态方程采用 Mie-Grüneisen 形式, 其中  $c_0 = 6296$  m/s,  $s = 1.61$  [26],  $\gamma_0 = 1.0$ . 具体计算结果见图 4.

由图 4 可见, 考虑相变的动态效应后, 计算所得加卸载波的速度以及冲击波平台均与实验相符. 相比平衡相变计算结果, 加载过程中, 相变动态模型计算的相变转换曲线更加光滑, 与实验结果相符. 卸载过程中, Bauschinger 效应和非平衡相变的联合使用, 使得材料准弹性卸载波的计算更加合理, 材料卸载曲线也与实验更加相符. 采用相变动态模型计算平面实验 1, Ce 样品内某一单元压力、温度和各相份额的变化结果见图 5.

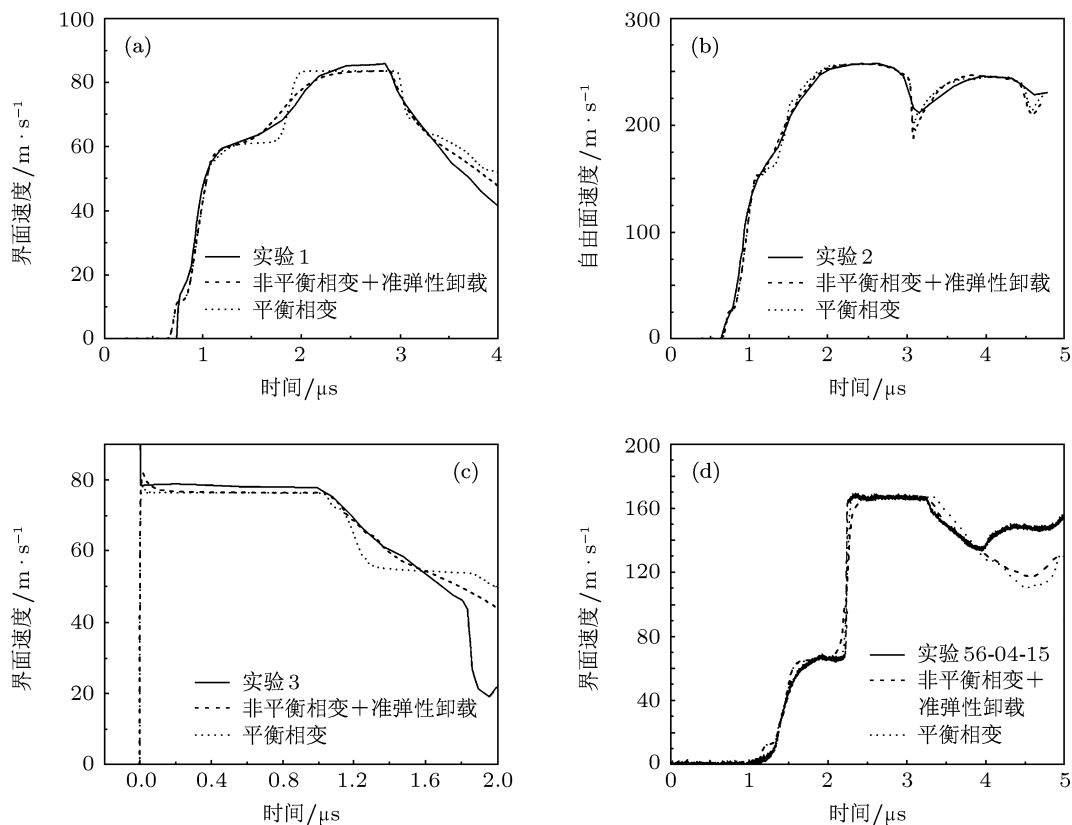


图 4 考虑准弹性卸载和非平衡效应计算平面冲击实验 (a) 实验 1; (b) 实验 2; (c) 实验 3; (d) 实验 56-04-15

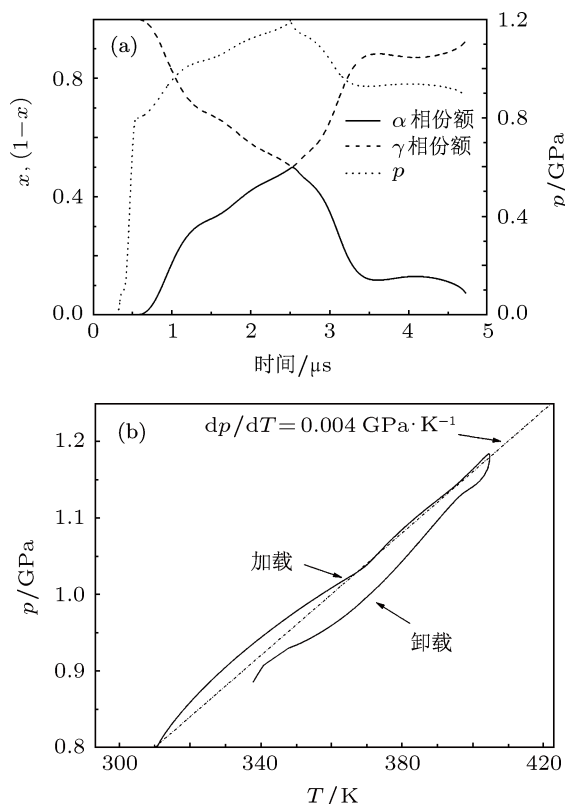


图5 Ce 样品内物理量变化 (a)  $p-t$ ,  $x-t$ ; (b)  $p-T$

由图 5(a) 可见, 压力在 0.8 GPa 时,  $\gamma \rightarrow \alpha$  相变开始, 当压力达到 1.17 GPa 时, 相变份额达到 50%, 随后压力降低, 进入卸载和逆相变过程. 由图 5(b) 可见, 由于采用的是非平衡相变模型, 其加载和卸

载过程并不重合, 相比加载过程, 卸载过程中发生的逆相变偏离给定的相界更远. 计算中也表明, 卸载过程本构关系的描述对于逆相变过程影响较大.

## 5 结论

1) 在较低压力下, Ce 材料的弹塑性行为不可忽略, 剪切变形引起的熵增对温度及 Hugoniot 关系均有一定影响. 利用 Ce 材料低压条件下的 Hugoniot 数据点, 考虑应力偏量的影响, 重新构造了低压下 Ce 材料的  $\gamma$  和  $\alpha$  相状态方程. Ce 材料的冲击加载实验的计算结果表明, 该状态方程模型可较好地再现冲击加载实验中的波系结构及冲击波压力.

2) 无论是冲击加载还是卸载, Ce 的  $\gamma \leftrightarrow \alpha$  相变转换过程均比较光滑, 其卸载过程中相变体积与加载存在明显差异. 采用相变动态模型可以较好地描述 Ce 材料低压动态加载下的相变特性, 特别是当考虑了材料的 Bauschinger 效应后, 材料卸载速度剖面的描述更加合理, 其卸载路径与加载路径存在一定差异.

感谢李雪梅、李英雷、魏兰和杨堃对本项工作的支持和讨论.

[1] Andrews D J 1971 *J. Comp. Phys.* **7** 310  
 [2] Andrews D J 1973 *J. Phys. Chem. Solids* **34** 85  
 [3] Hayes D B 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 3438  
 [4] Boettger J C 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2840  
 [5] Duvall G E, Graham R A 1977 *Rev. Mod. Phys.* **49** 523  
 [6] Kamegai M 1975 *J. Appl. Phys.* **46** 1618  
 [7] Chen Y T, Tang X J, Li Q Z 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 046401 (in Chinese) [陈永涛, 唐小军, 李庆忠 2011 物理学报 **60** 046401]  
 [8] Tan Y, Yu Y Y, Dai C D, Tan H, Wang Q S, Wang X 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 106401 (in Chinese) [谭叶, 俞宇颖, 戴诚达, 谭华, 王青松, 王翔 2011 物理学报 **60** 106401]  
 [9] Shao J L, Wang P, Qin C S, Zhou H Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5389 (in Chinese) [邵建立, 王裴, 秦承森, 周洪强 2007 物理学报 **56** 5389]  
 [10] Shao J L, Duan S Q, He A M, Qin C S, Wang P 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 245703  
 [11] Shao J L, Duan S Q, He A M, Wang P, Qin C S 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 355403  
 [12] El'kin V M, Kozlov E A, Kakshina E V, Moreva Yu S 2006 *Phys. Met. Metallogr.* **101** 208  
 [13] Guo Y B, Tang Z P, Xu S L 2004 *Acta Mech. Solida Sin.* **25** 417 (in Chinese) [郭扬波, 唐志平, 徐松林 2004 固体力学学报 **25** 417]  
 [14] Steinberg D J, Cochran S G, Guinan W W 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 1948  
 [15] Cox G A 2006 *AIP Conf. Proc. Baltimore USA*, July 31–August 5, 2005 p208  
 [16] Song H F, Liu H F, Zhang G C, Zhao Y H 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 066401  
 [17] Decremps F, Belhadi L, Farber D L, Moore K T, Occelli F, Gauthier M, Polian A, Antonangeli D, Aracne-Ruddle C M, Amadon B 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 065701  
 [18] Voronov F F, Goncharova V A, Stalgorova O V 1979 *J. Exp. Tech. Phys.* **76** 1351  
 [19] Fowles G R 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 1475  
 [20] Barker L M, Lundergan C D 1964 *J. Appl. Phys.* **35** 1203  
 [21] Dwivedi S K, Asay J R, Gupta Y M 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 083509

- [22] Singh A K 1980 *High Temp. High Press.* **12** 47  
[23] Vinet P, Rose J H, Ferrante J, Smith J R 1989 *J. Phys.: Condens. Matter* **1** 1941  
[24] Jensen B J, Cherne F J, Cooley J C, Zhernokletov M V, Kovalev A E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 214109  
[25] Lee E H, Liu D T 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 19  
[26] Li X M, Yu Y Y, Li Y H, Zhang L, Ma Y, Wang X S, Fu Q W 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2691 (in Chinese) [李雪梅, 俞宇颖, 李英华, 张林, 马云, 汪小松, 付秋卫 2010 物理学报 **59** 2691]

## Numerical study of shock-induced phase transformation of cerium under low pressure\*

Pan Hao<sup>1)2)</sup> Hu Xiao-Mian<sup>1)2)†</sup> Wu Zi-Hui<sup>1)</sup> Dai Cheng-Da<sup>3)</sup> Wu Qiang<sup>3)</sup>

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

2) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

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

(Received 10 January 2012; revised manuscript received 26 April 2012)

### Abstract

The dynamic responses of cerium under low pressure, including  $\gamma \rightarrow \alpha$  phase transition, are numerically studied in this paper. The velocity profiles of shock experiments show that the transition process between the two phases is smooth and there is no obvious disconnection between the two plastic waves of the particle velocity profiles. Three important problems in the dynamic response, including constitutive model, Hugoniot relation and phase transition/reversal, are discussed. A multi-phase equation of state and constitutive model of Ce are presented in this paper after analyzing the typical wave configuration of cerium under the shock loading and releasing. The dynamic phase transition model is built for the non-equilibrium course in the phase  $\gamma \rightarrow \alpha$  transition induced by shock wave. The numerical results accord with the experimental data of the plane impact tests, indicating that the dynamic phase transition model can describe the dynamic response under low pressure of cerium more reasonably.

**Keywords:** phase transformation, shock wave, constitutive equation, cerium

**PACS:** 64.70.Kd, 64.30.Ef, 62.50.Ef

\* Project supported by the Opening Foundation of State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, China (Grant No. KFJJ11-5M).

† E-mail: hu\_xiaomian@iapcm.ac.cn