

一种计算金属剪切模量的本构模型 :以 Al 为例^{*}

侯日立^{1) 2) 3)} 彭建祥^{2) †} 经福谦²⁾

1) 武汉理工大学理学院, 武汉 430070)

2) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰波物理国家重点实验室, 绵阳 621900)

3) 空军第一航空学院, 信阳 464000)

(2008 年 9 月 27 日收到, 2009 年 3 月 16 日收到修改稿)

用两步法构建了一个与温度和压力相关的适用于金属材料的剪切模量本构模型, 其中的第一步任务是求得沿 0 K 等温线上剪切模量随压力的变化规律, 即求得 $G_1 = G_1(P, 0 \text{ K})$ 的函数式. 第二步是从 0 K 等温线上某一给定 P 的 G 值出发, 求出沿等压线上剪切模量随温度 T 变化的规律, 从而最终求得剪切模量本构模型 $G = G(P, T)$ 的具体表达式. 在这两个阶段的研究中都利用了超声波测量和第一性原理计算方法的研究结果. 用铝为模型材料, 对本模型的合理性进行了检验. 结果表明, G 的模型预测数据与试验测量及理论计算数据相比较, 无论 G 的演化是沿冲击压缩轨迹、等熵压缩轨迹、等温压缩轨迹还是等压线轨迹, 都能达到令人满意的程度, 故可认为本模型具有良好的普适性和合理性.

关键词: 铝, 本构模型, 剪切模量, 冲击波压缩

PACC: 6220D, 6250D

1. 引言

为了正确描述材料在复杂加载条件下的弹塑性响应特性和应力波的传播规律, 需要研究具有普适性的材料本构关系. 目前, 在高温高压极端条件下比较广泛采用的材料本构模型是 Steinberg 等人^[1]提出的本构关系, 以下简称 SCG 模型. 其中, 关于剪切模量的本构关系是

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

式中, G_0 为材料在零压和 300 K 下的剪切模量, G'_P , G'_T 分别为该剪切模量对压力和温度的一阶导数值, η 为压缩比.

SCG 模型虽然目前得到了比较广泛的应用, 但人们也曾发现了其中的局限性. 例如, 俞宇颖等^[2, 3]在 LY12 铝的冲击压缩实验研究中发现, 高温高压下的 SCG 模型与实验结果有明显偏离. Burakovsky 等人^[4]的研究发现, SCG 模型预测值与 0 K 等温压缩线的第一性原理计算结果不符合. 文献 [2] 提出用去掉 SCG 表达式中 $\eta^{1/3}$ 项的办法对 SCG 模型进行修

正, 修正后的模型计算结果虽然与在冲击压力为 20—120 GPa 范围内的实验结果比较接近, 但与 0 K 下的理论计算结果比较, 其结果反而比原始的 SCG 模型计算结果的偏差更大, 如图 1 所示. 此外, 彭建祥^[5, 6]、胡建波^[7]等也针对 LY12 铝在冲击状态的剪切模量计算进行了研究.

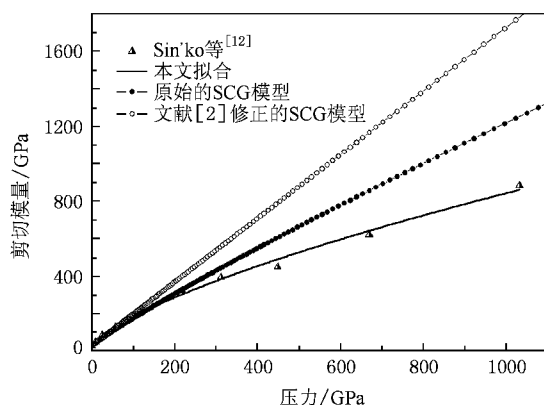


图 1 0 K 温度下 SCG 模型与理论计算结果的比较

除 SCG 模型外, Preston 等人^[8]提出的以密度和温度为变量的计算模型也可用于对材料剪切模量的

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10632080)资助的课题.

[†] E-mail: pengjx@caep.ac.cn

计算,其表达式为

$$\alpha_{\rho}(T) = \alpha_{\rho 0} \left(1 - \beta \frac{T}{T_m(\rho)} \right), \quad (2)$$

式中, ρ 为材料的密度, $T_m(\rho)$ 为相应密度下材料的熔化温度, β 为材料常数但与密度有关. 其后, Burakovsky 等人^[9]利用 Gruneisen 常数计算公式和 Lindemann 熔化定律对该模型进行了改造. 但改造后模型中需用的待定参数比较多, 特别是其中还需要计算材料在不同压力下的熔化温度, 而高压下材料熔化温度的精确计算本身又是件比较困难和复杂的事, 因此应用起来不是很方便.

基于以上的原因, 本文提出了一个新的剪切模量计算模型. 该模型的构建基于如下两步走的思路. 1) 用第一性原理计算或超声波测量方法研究 0 K 下不同压力处材料的剪切模量, 即获得 0 K 等温线上剪切模量随压力变化的规律. 2) 研究从 0 K 等温线上某一点出发的等压线上的剪切模量随温度变化的关系, 其温度变化范围的上限到材料发生熔化相变为止. 以下将以 Al 材料为例, 构制出具体的材料本构模型, 并通过实例考查其实用性和合理性.

2. 模型的构建

2.1. 0 K 等温压缩线上剪切模量随压力的变化

关于压力对剪切模量的影响, SCG 模型是以线性变化假设为基础的(见(1)式), 然后顾及到 Thomas-Fermi 模型的高压极限关系人为添加了一个 $\eta^{1/3}$ 项, 从而导致了模型预测值与 0 K 等温线上剪切模量的理论计算或试验测量结果不符合. Burakovsky 等人^[4]对 SCG 模型的压力作用项的不足作了专门分析, 并以他们提出的基于密度和温度的剪切模量计算模型为依据, 对 Al, Au 和 MgO 在 0 K 或 300 K 等温条件下的剪切模量进行了计算, 得出其剪切模量都能用如下幂函数表示:

$$\alpha(P) = G_0(1 + K_P P)^a, \quad (3)$$

式中, G_0 为材料在 0 K 或 300 K 以及零压下的剪切模量, K_P 和 a 为材料常数, 具体数值随材料而异.

2.2. 不变压力下剪切模量随温度的变化

Preston 等人^[8]指出, 在不变密度的情况下, 材料的剪切模量与温度服从线性关系(如(2)式所示). Preston 等人^[10]的研究表明, 如果把(2)式中的密度

换成压力, 线性关系依然成立, 即

$$\alpha(P, T) = \alpha_{P 0} \left(1 - \beta \frac{T}{T_m(P)} \right). \quad (4)$$

此外, Nadal 等人^[11]利用超声波实验测量技术, 在常压条件下对多种材料从室温到熔点的温度范围内的剪切模量进行了比较系统的研究. 研究表明: 在材料进入熔化温度以前, 剪切模量与温度之间有很好的线性关系. 值得着重说明的是, 这种线性关系的温度影响系数 β 是压力相关的.

2.3. 温度和压力相关的剪切模量计算模型

根据以上的讨论, 任意压力 P 和温度 T 下的剪切模量可以通过下式计算:

$$\alpha(P, T) = \alpha_{P 0} + G'_T(P)T, \quad (5)$$

式中等号右端第一项为 0 K 等温线上剪切模量随压力的改变, 第二项代表从该等温线上某一压力点 P 出发, 保持压力不变条件下, 当温度由 0 K 增高到 T 时剪切模量的变化. 把(3)式代入(5)式后得到本文提出的高温高压下材料的剪切模量计算模型:

$$\alpha(P, T) = G_0(1 + K_P P)^a + G'_T(P)T. \quad (6)$$

3. 模型相关参数的确定

3.1. a, K_P, G_0 的确定

原则上, a, K_P 可根据等温压缩线上声速测量结果或第一性原理计算结果得到. 下面以 Al 材料的理论计算结果为例来介绍.

Sin'ko 等人^[12]采用电子结构理论计算了 0 K 下 0—1000 GPa 压力范围内 Al 的剪切模量. 拟合后得到如下幂函数表示式(见图 1):

$$\alpha(P) = 35.1(1 + 0.102P)^{0.69}, \quad (7)$$

从中可得到 $K_P = 0.102 \text{ GPa}^{-1}$, $a = 0.69$.

关于零温、零压下 G_0 的确定本文做了如下考虑. 模型中的 $\alpha(T)$ 线性关系实际上忽略了材料在零温附近的非线性本质, 因此, 用于模型计算的 G_0 采取了根据零压室温剪切模量外推的方法得到. 文献[1]给出了铝在室温的剪切模量为 27.6 GPa, 根据 Nadal 实验测量的零压下 Al 的剪切模量随温度的变化系数 $G'_{T0} = 0.0154 \text{ GPaK}^{-1}$ 可得到 G_0 为 32.2 GPa.

3.2. $G'_T(P)$ 的确定

原则上, 该系数也可根据任意高温条件下等压

线上的声速测量结果或第一性原理计算数据确定. Xiang 等人^[13]利用第一性原理计算了 Al 在 10—115 GPa 压力、100—3000 K 温度交互作用下的剪切模量. 根据其计算结果可得到不同压力下的 G - T 关系如图 2 所示. 不同压力下 G'_T 随压力的变化关系如图 3 所示.

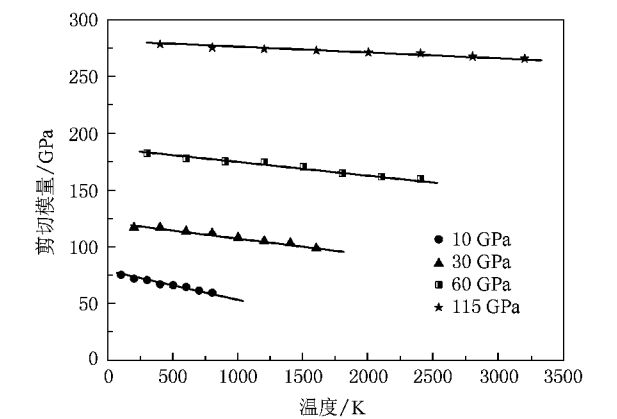


图2 根据文献 [13] 得到的不同压力下的 G - T 关系

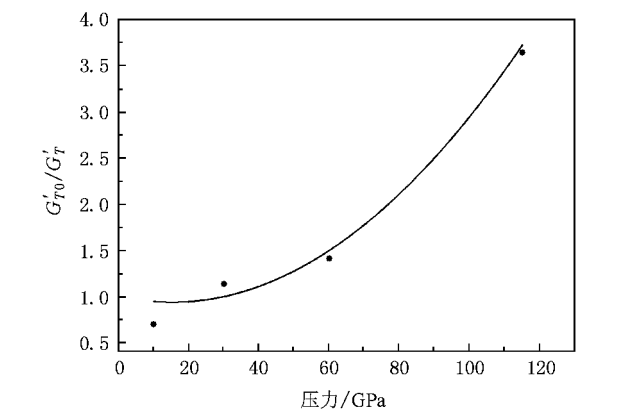


图3 根据 [13] 得到的不同压力下的 G'_T

对 G'_T - P 关系进行拟合, 得到如下表达式:

$$G'_T = \frac{G'_{70}}{1 - 0.00796P + 0.0028P^2}. \tag{8}$$

考虑到目前含温度的第一性原理计算结果的精度还不够高, 本文将采用室温条件下的静高压实验进行了测定. 将 (8) 式写成通式为

$$G'_T = \frac{G'_{70}}{1 + bP + cP^2}, \tag{9}$$

式中 b, c 为常数. 综合 (6) (9) 式, 选择零温、零压为参考点, 得到

$$G = G_0 \left[(1 + K_P P)^a + \frac{G'_{70}}{G_0} \frac{T}{(1 + bP + cP^2)} \right], \tag{10}$$

式中 G_0 为 Al 在零温、零压下的剪切模量.

将 (10) 式变形得到

$$1 + bP + cP^2 = \frac{G'_{70} T}{G - G_0 (1 + K_P P)^a}. \tag{11}$$

因此, 测得等温线上的剪切模量后, 拟合即可确定参数 b, c . 本文实验在中国工程物理研究院流体物理研究所完成. 实验装置如图 4 所示. 声速测量采用超声波脉冲反射法. 超声波探头频率为 10 MHz, 传压介质为 1:3 的甲醇和乙醇, 缓冲杆材料为不锈钢. 样品腔的材料为紫铜. 样品尺寸为 $\Phi 6 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$.

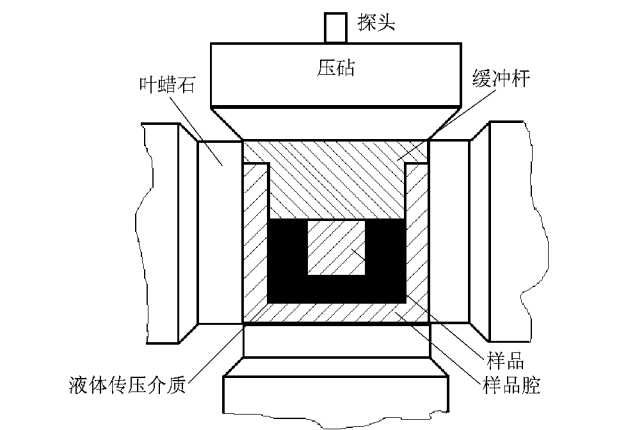


图4 静高压实验装置

实验中同时记录了不同压力下横波和纵波在样品中的传播时间. 样品密度随压力的变化利用 Murnaghan 状态方程进行了计算:

$$P = \frac{K_0}{K'_0} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{K_0} - 1 \right], \tag{12}$$

式中 ρ_0, ρ 分别为材料在常温零压和相应压力下的密度, $K_0 = 76 \text{ GPa}$, $K'_0 = 5.36$ ^[14]. 样品长度随压力的变化采用如下公式进行修正^[15]:

$$\frac{l_0}{l} = 1 + \frac{P}{3K_0}, \tag{13}$$

式中 l_0, l 分别为零压状态以及受压状态下样品的长度. 利用修正后的样品长度计算材料在不同压力下的横波声速 C_t . 剪切模量采用如下公式计算:

$$G = \rho C_t^2. \tag{14}$$

表1 静高压实验结果					
静水压力/GPa	1.59	1.79	1.98	2.18	2.36
横波速度/km·s ⁻¹	3.33	3.40	3.36	3.37	3.39
剪切模量/GPa	31.49	31.85	32.21	32.70	32.98

静高压实验结果如表 1 所示.另外,本文还参考了文献 16 的静高压实验数据.两组数据拟合得到 $b = -0.00635 \text{ GPa}^{-1}$, $c = 0.000267 \text{ GPa}^{-2}$.拟合结果如图 5 所示.至此可得到金属铝的剪切模量本构关系式:

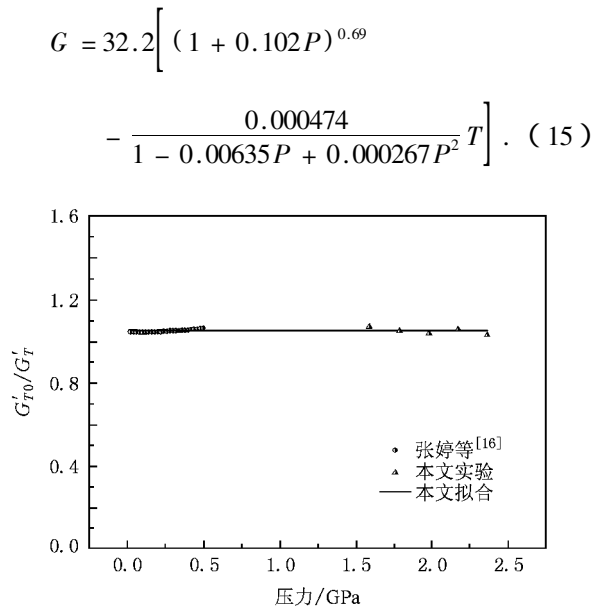


图 5 静高压实验数据拟合 b, c 参数

4. 模型有效性的验证

4.1. 等温压缩状态

为了验证模型在等温状态的适应性,以 Al 为例,将模型计算结果与 SCG 模型和 Sin'ko 等人^[12]在 0 K 温度下的理论计算结果进行了比较,如图 6 所示.其中,SCG 模型分别用其原来的参数和本文(15)

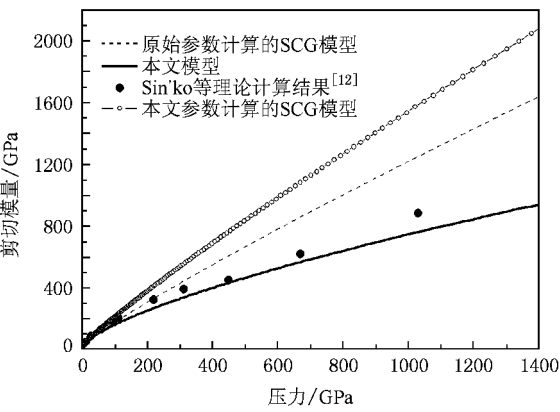


图 6 计算模型在 0 K 等温状态的比较

式求得得到的参数进行了计算.模型中 η 的计算采用了(12)式的状态方程.其中,零温、零压下的计算参数为 $K_0 = 79.4 \text{ GPa}$, $K'_0 = 4.4$ ^[17].

4.2. 冲击压缩状态

为了验证本文模型在预测冲击压缩状态下材料剪切模量的实用性,将本模型计算结果与 Asay^[18], McQueen^[19],俞宇颖^[2]等人的冲击实验结果以及 SCG 模型进行了比较,如图 7 所示.

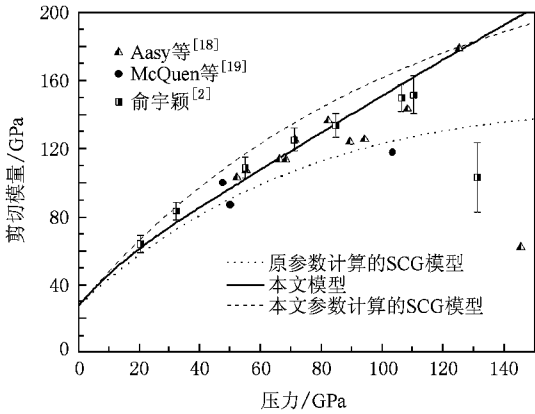


图 7 本文模型计算结果与冲击压缩实验测量结果的比较

计算中,冲击温度采用如下公式^[20]:

$$T_H = T_0 e^{\gamma_0(1-\frac{V}{V_0})} + e^{\gamma_0(1-\frac{V}{V_0})} \frac{C_0^2}{C_V} \times \int_0^{1-\frac{V}{V_0}} \frac{\lambda x^2}{1-\lambda x} e^{-\gamma_0 x} dx \quad (16)$$

式中, V 为冲击压缩状态下的比容, T_0 为初始温度, V_0 为初始状态的比容, γ_0 为室温零压下的格林爱森系数, C_V 为定容比热, C_0 和 λ 为冲击波关系中的常数.模型中用到的参数如表 2 所示.

表 2 冲击压缩计算中用到的常数

γ_0	$C_0/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	$C_V/\text{J}\cdot\text{kg}\cdot\text{K}^{-1}$	λ	$G_0^{[1]}$	G_0^*	$G_0^{[1]}/\text{GPa}$
2.18	5.328	850	1.338	1.8	2.24	27.6

* 根据(15)式计算得到,其他未标注来源的参数取自文献[20].

不难看出,本文模型计算结果与实验结果的符合程度是令人满意的.还应该说明的是,在 ~125 GPa 区计算结果与实验结果之后的差异是与 Al 进入液相的过程有关,但这已不属于本构模型的研究范畴了.

4.3. 等熵压缩状态

为了进一步验证模型的普适性,下面再把本文

模型计算值与理想等熵压缩状态下剪切模量变化的有限应变模型计算值进行了比较.

等熵压缩条件下剪切模量 G 的有限应变模型计算公式如下^[21]：

$$G = M_c(1 + 2f)^{5/2}, \tag{17}$$

$$f = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right], \tag{18}$$

$$M_c = G_0 + (3K_0 G'_0 - 5G_0)f + \frac{9}{2} \times \left[K_0^2 \left(G''_0 + (K'_0 - 4) \frac{G'_0}{K_0} \right) + \frac{35G_0}{9} \right] f^2. \tag{19}$$

等熵压缩状态的温度和等熵压力分别由以下两式计算：

$$T_s = T_0 \cdot \exp \left(- \int_{V_0}^V \frac{\gamma}{V} dV \right), \tag{20}$$

$$P_s = \frac{3}{2} K_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{4/3} \right] \times \left\{ 1 - \frac{3}{4} (K'_0 - 4) \left[1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\}. \tag{21}$$

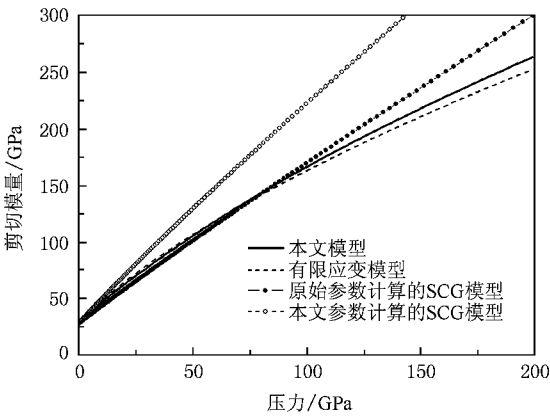


图 8 计算模型在等熵状态的比较

计算中的 $G'_0 = 2.26 \text{ GPa}^{-1}$ 和 $G''_0 = -0.07$ 均由本文提出的公式确定,比较结果如图 8 所示.

5. 结 论

通过本文的分析,主要得到如下认识和结论：

1. 通过对等温压缩线上剪切模量随压力变化、等压线上剪切模量随温度的变化的实验及第一性原理计算结果的综合分析,本文提出了一个新的适用于高温高压条件下的金属材料剪切模量本构模型.模型构建时涉及的近似假设少,参数不多且易于确定.

2. 以金属铝为例,文中给出了其剪切模量本构关系的具体函数表达式.对于 Al 而言,模型计算的剪切模量数据与冲击压缩条件下的实验结果有良好的符合程度,与等熵条件下广泛使用的有限应变模型计算结果(因为目前人们还无法对理想等熵压缩条件下的剪切模量进行直接测量)也有良好的一致性.再考虑到本文模型中的参数大都基于等温过程或等压过程的实验测量或第一性原理计算结果确定的,因而应该认为本模型也适用于等压变化过程中剪切模量变化规律的预测.总之,可以认为,本文模型对描述沿任一特定热力学状态变化(等温、等压、等熵以及冲击压缩)路径上剪切模量的变化,表现具有良好的普适性和合理性.我们认为,原则上本模型也适用于其他金属材料,这个问题值得进一步研究.

3. 应该说明,根据 Born 判据,本构关系不能用于对材料液相区力学行为的描述.对于各种材料液相区的划定,考虑到目前在理论和实验研究两个方面都有具体的困难,这个问题应该通过专项的研究课题解决,文献[1]中亦有过明确的说明.

[1] Steinberg D J ,Cochran S G ,Guinan M W 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 1498

[2] Yu Y Y 2006 *Ph. D. Thesis* (Mianyang ,CAEP)(in Chinese)[俞宇颖 2006 博士论文(绵阳 国工程物理研究院研究生部)]

[3] Yu Y Y ,Tan H ,Dai C D ,Chen D N ,Wang H R 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2352 (in Chinese)[俞宇颖、谭 华、戴成达、陈大年、王焕然 2008 物理学报 **57** 2352]

[4] Burakovsky L ,Dean L P 2005 *Phys. Rev. B* **71** 184118

[5] Peng J X ,Hu C M ,Li Y L ,Zhang L ,Jing F Q 2008 *International Journal of Modern Physics B* **22** 1111

[6] Peng J X ,Jing F Q ,Wang L L ,Li D H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2194 (in Chinese)[彭建祥、经福谦、王礼立、李大红 2005 物理学报 **54** 2194]

[7] Hu J B ,Yu Y Y ,Dai C D ,Tan H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5750 (in Chinese)[胡建波、俞宇颖、戴诚达、谭 华 2005 物理学报 **54** 5751]

[8] Preston D L ,Wallace D C 1992 *Solid State Commun.* **81** 277

[9] Burakovsky L ,Greeff C W ,Preston D L 2003 *Phys. Rev. B* **67** 094107

[10] Preston D L ,Tonks D L 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 211

- [11] Nadal M H ,Poac P L 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 2472
- [12] Sin'ko G V ,Smirnov N A 2002 *J. Phys. : Condens. Matter* **14** 6989
- [13] Xiang S K ,Cai L C ,Jing F Q 2004 *Phys. Rev. B* **70** 174102
- [14] Jing F Q 1999 *Introduction of experimental equation of state* (Beijing : Science Press) p193 (in Chinese) [经福谦 1999 实验物态方程导引(北京 科学出版社)第 193 页]
- [15] Xie H S 1997 *Introduction to material science in the earth's interior* (Beijing : science Press) p60 (in Chinese) [谢鸿森 1997 地球深部物质科学导论(北京 科学出版社)第 60 页]
- [16] Zhang T ,Bi Y ,Zhao M G 2005 *Chin. J. High Pres. Phys.* **19** 35 (in Chinese) [张 婷、毕 延、赵敏光 2005 高压物理学报 **19** 35]
- [17] Wu Q ,Jing F Q ,Li X Z 2005 *Chin. J. High Pres. Phys.* **19** 97 (in Chinese) [吴 强、经福谦、李欣竹 2005 高压物理学报 **19** 97]
- [18] Asay J R ,Chhabildas L C ,Kerley G I *et al* 1986 *Shock Waves in Condensed Matter*-1985 (New York : Plenum Press) p145
- [19] McQueen R G ,Fritz J N ,Morris C E 1984 *Shock waves in condensed matter*-1983 (Amsterdam Elsevier Science Press) p95
- [20] Tang W H ,Zhang R Q 1999 *Introduction to Equation of State and Calculation* (Changsha : National Defence industry Press) p114 (in Chinese) [汤文辉、张若棋 1999 物态方程理论及计算概论(长沙 国防科技大学出版社)第 273 页]
- [21] Duffy T S ,Ahrens T J 1992 *Journal of Geophysical Research* **97** 1503

A constitutive model for predicting shear modulus of metals using aluminum as the prototype^{*}

Hou Ri-Li^{1 2 3)} Peng Jian-Xiang²⁾ Jing Fu-Qian²⁾

1) School of sciences ,Wuhan University of Technology ,Wuhan 430070 ,China)

2) National key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics ,Institute of Fluid Physics ,China Academy of Engineering Physics ,Mianyang 621900 ,China)

3) The First aeronautic Institute of the Air Force ,Xinyang 464000 ,China)

(Received 27 September 2008 ; revised manuscript received 16 March 2009)

Abstract

With a two-step approach a pressure P and temperature T dependent constitutive model of shear modulus G applicable to metals was developed in this work. The goal of the first step is to find the relation of G with P along 0 K isotherm i.e. the functional form of $G_1 = G_1(P, 0 K)$ and the second one is to find the relation of G starting from a given state of $(P, 0 K)$ with a value that was already determined in the first step with T along the isobar of P i.e. the functional form of $G = G(P, T)$ or the constitutive model proposed by us. In both steps, results of supersonic measurement and first principles calculation were used. Aluminum as a model material was utilized to validate the rationality of this model. It is demonstrated that the predicted results of this model are in satisfactory agreement with the measured and numerically simulated G despite whether it evolves along shock compressed, isentropic, isothermal, or isobaric loci, thereby displaying the rationality and the universal nature of this constitutive model.

Keywords : aluminum , constitutive model , shear modulus , shock compression

PACC : 6220D , 6250D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10632080).

[†] E-mail : pengjx@caep.ac.cn