文章编号:1000-5773(2008)04-0425-04

冲击熔化区材料强度的重整化解析*

冉宪文[1,2],汤文辉[1],谭 华[2],徐志宏[1]

(1. 国防科学技术大学理学院技术物理研究所,湖南长沙 410073;
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物理实验室,四川绵阳 621900)

摘要:采用重整化理论对材料在冲击熔化区的强度进行了分析,结果表明,在冲击熔化区内,材料的强度在熔化质量分数达到 0.300 798 时开始减小,与材料中纵波声速向体波声速的转变点相对应。

关键词:材料强度;重整化;冲击熔化区;熔化质量分数
中图分类号:O521.3 **文献标识码**:A

1 引 言

材料强度是描述材料抗剪切能力的物理参量,它是固体与液体的主要区别之一。固体由于其内部原子间具有较强的相互作用,使原子能够紧密地结合在一起,形成具有一定形状的块体,能够承受剪切,不会发生流动;而液体其内部原子间的相互作用相对较弱,且长程无序,难以使结合在一起的原子团保持固定的形状,当剪切力作用于液体时则会使液体发生流动。这也是原本描述晶格稳定性的 Born 判据[1]可以用作材料熔化判据的原因[2]。

在冲击压缩下,材料内部的原子会吸收冲击波能量,振动频率加快,振幅变大,使材料的温度升高;当碰撞速度较高,所产生的冲击波能量足以破坏材料的晶格结构时,其内部原子间的相互作用变弱呈现流体特征,使材料发生冲击熔化。由于在真实材料内部随机分布着各式各样的缺陷,这些缺陷的存在会大量的吸收冲击波的能量,使缺陷附近的原子具有比其它原子更高的动能,从而在材料内部形成一个个孤立的热点;当冲击熔化发生时,这些热点附近区域首先呈现出流体特征。若形成的热点较少,而且区域不大,则材料内部的固相区域仍然可以连通成一个整体,这时的材料仍然可以承受剪切作用;若形成的热点较多,而且区域较大,则会使材料内部的固相区域被一个个孤立地分割开来,难以连通在一起,显然此时材料失去了承受剪切作用的能力。

当发生冲击熔化时,物质处于固液混合相区,若不考虑固液相边界区域,可以将此时的物质简单地分为液相区域和固相区域两个部分。由于物质内部液相区域的大小和分布有很大的随机性,若有一个人站在物质内部观察周围环境的固液相分布情况,则用肉眼所观察的结果与采用放大镜观察到的结果是一样的。也就是说,处于固液混合相区内的物质,不同尺度上固相和液相的分布情况具有相似性,或称之为尺度关联性。重整化群方法(Renormalization Group Theory, RGT)是处理这种尺度关联性的最佳理论之一,有关重整化方法的具体细节可见文献[3-6]。在本工作中,我们采用重整化群方法对处于固液混合相区的物质的临界性进行研究,并将之与材料强度变化相联系。

2 理论基础

设重整化前格子的基元座占有率用 p 来表示,重整化后的格子座占有率用 p' 来表示。重整化后的

* **收稿日期**:2007-11-16;**修回日期**:2008-02-22
基金项目:国家自然科学基金(10276039)
作者简介:冉宪文(1978—),男,博士,讲师,主要从事高温高压物态方程和相变理论研究. E-mail:ranxianwen@163.com

格子称为超格子，它们之间的关系可写为

$$p' = \sum w_{\text{state}} f(p) = R(p) \tag{1}$$

式中：$R(p)$为重整化变换函数，$f(p)$为元胞中座的各种组态的概率；w_{state}为权重函数，其值为

$$w_{\text{state}} = \begin{cases} 1 & \text{Occupied} \\ 0 & \text{Unoccupied} \end{cases} \tag{2}$$

式中求和是对元胞内各种可能的组态进行的。

一般地，在参数空间下，p 在 R 变换下将变到 p'。如果在某一点 p^* 在 R 变换下不变，即

$$p^* = R(p^*) \tag{3}$$

则 p^* 称为 R 变换下的不动点，除去 0 和 1 两个稳定的吸引子以及大于 1 和小于 0 的奇异解和复数解，剩下的就是相变的临界点 p_c，(3)式称之为不动点方程。以简立方格子为例，通过 R 变换就可以将材料的微观组态与宏观性质有机地结合在一起，如图 1 所示。

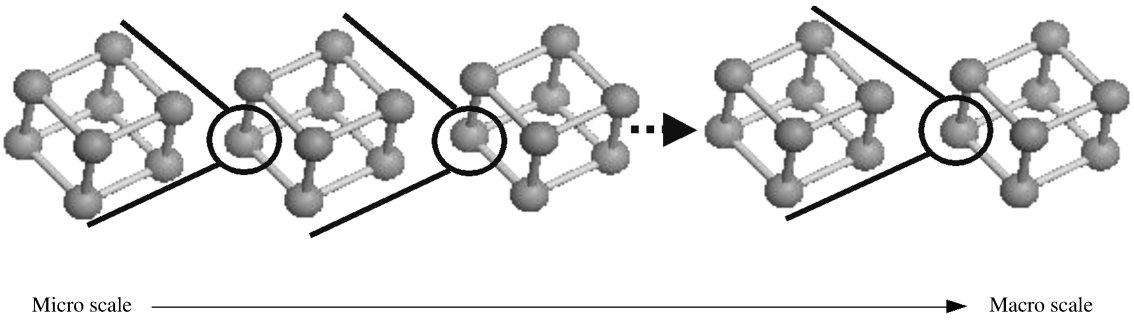


图 1 简立方格子 R 变换示意图

Fig. 1 Schematics of R transform for simple cubic lattice

3 简立方格子强度的计算

根据相变动力学理论，当材料发生熔化时，其内部首先出现液相胚芽，若所形成的胚芽尺寸很小，小于临界成核尺寸时，则胚芽将可能湮没在材料内部的热涨落中而消失。当胚芽的尺寸达到临界成核尺寸时，该胚芽将转变为液相点并且不再消失。若将临界液核的形状取为立方体，并将之作为最小单元将材料进行分割，则材料将变成由无数个这样的单元以简立方结构排列所组成的系统。在本文中，将最小单元大小的固相区域称为固相粒子，最小单元大小的液相区域称为液相粒子；它们不同于一般意义上的粒子，事实上它们实际上由许多个原子或分子组成，具有“宏观小微观大”的特征。材料发生熔化时，液体状态代表着晶格结构的瓦解，故我们假定当晶格中出现的液相粒子若同时出现在晶格两条棱上的两边时(姑且称两边都为液态粒子的棱为液态棱)，表示晶格已经瓦解，以这一假定为选择稳定晶格的原则，显然当晶格中液相粒子大于等于 5 时，晶格都失去了稳定性；当液相粒子小于 5 时得到如下 8 种稳定晶格结构(如图 2 所示)，其中白色球代表固相粒子，黑色球代表液相粒子，其中图 2(a)～图 2(f)的晶格结构没有出现液态棱，图 2(g)和图 2(h)两种晶格结构中出现一条液态棱。设固相粒子的质量分数为 p，即在系统中随便拿出一个粒子，它为固相粒子的概率为 p，图 2(a)所示为不包含液相粒子的简立方晶格，该晶格为固相晶格的概率为 p^8，而这样的晶格情况只存在图 2(a)一种可能，因此某一简立方晶格 8 个粒子均为固相粒子的概率为 p^8。依此类推，根据图 2 中所示的几种稳定晶格的情况，可以得到如下描述稳定晶格的不动点方程

$$p^* = p^{*8} = 8(1-p^*)p^{*7} + 28(1-p^*)^2 p^{*6} + 32(1-p^*)^3 p^{*5} + 2(1-p^*)^4 p^{*4} \tag{4}$$

求解该不动点方程，得到临界的固相粒子质量分数为 $p_c = 0.699\,202$，对应的熔化质量分数为 0.300 798。根据重整化群理论，这一结果给出当材料发生熔化时，材料中的液相粒子所占的熔化质量分数小于 0.300 798时，材料呈现固态特征；当熔化质量分数大于 0.300 798 时，材料呈现液态特征。

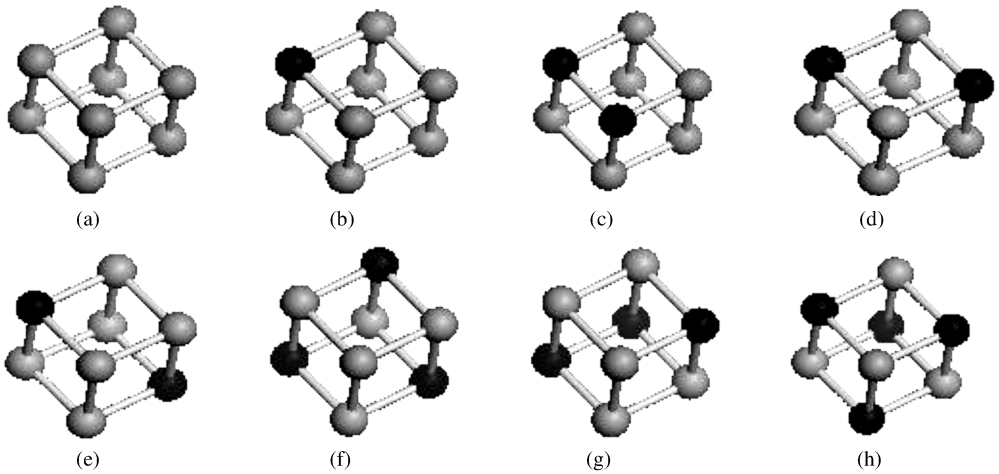


图 2　简立方晶格的稳定晶格结构

Fig. 2　Stable lattice structure for simple cubic lattice

4　讨　论

重整化群方法对于计算临界问题是比较有效的,它能够将微观状态与宏观性质统一到一个不动点方程中来,它说明系统的宏观性质由变换的不动点决定,与微观状态的具体细节无关,这是由其内部的不同尺度上的相似性所决定的。但是它所预测系统的变化是一种突变行为,除临界点外没有任何中间过程,与实际的渐变过程还有一定差距。从这方面来说重整化群方法的实际意义不大,虽然它可以预测临界点,但是对临界点附近的行为不能给出有价值的结果,但是可以以所预测的临界点为指导,在实验中对临界点附近的行为加以研究,当然也需要理论的进一步深化。根据前面的计算结果,当材料的熔化质量分数小于 0.300 798 时,材料主要呈现固态特征;当材料的熔化质量分数大于 0.300 798 时,材料开始表现出液态,熔化质量分数 0.300 798 为材料熔化过程中呈现固液态特征的临界点。这样根据"固体材料可以承受一定的剪切作用,而液体材料不能够承受剪切作用"这一物理常识特征,可以认为材料的抗剪强度在熔化质量分数达到 0.300 798 时开始减小,并与冲击压缩下材料发生熔化的纵波声速开始向体波声速转变的拐点相对应。

另外,本文的分析结果实际上仅对那些各向同性熔化的材料才适用。而对于非各向同性熔化的材料,如石英,由于熔化的方向性,在分析得到这种材料熔化的不动点方程时还要考虑加入能够反应熔化方向性的约束,这在目前来说还是十分困难的。本研究是以简立方结构晶格为对象进行重整化群分析的,但我们认为该结果也适用于其它晶格结构的材料,如 bcc 和 fcc 晶格结构的材料。这是因为虽然在原子层次上 bcc、fcc 和 sc 晶格结构的原子排列方式存在差异,但在元胞层次的排列上,这 3 种晶格结构的元胞排列方式是相同的,即简立方结构排列。并且相变动力学中的液核临界尺寸(或最小单元)实质上远大于这 3 种晶格结构的元胞尺寸。因此,我们认为这 3 种晶格结构的材料在材料强度随熔化质量分数变化的临界表现上一致。

References:

[1]　Born M, Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattice [M]. Clarendon: Oxford, 1954.

[2]　Jin Z H, Gumbsh P, Lu K, et al. Melting Mechanism at the Limit of Superheating [J]. Phys Rev Lett, 2001, 87(5): 055703.

[3]　Wilson K G. The Renormalization Group and Critical Phenomena [J]. Rev Mod Phys, 1983, 55(3): 583-600.

[4]　Cardy J. Scaling and Renormalization in Statistical Physics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.

[5]　Chowdhury D, Stauffer D. Principles of Equilibrium Statistical Mechanics [M]. Weiheim: Wiley-VCH, 2000.

[6]　Kadanoff L P. Statistical Physics, Statics, Dynamics and Renormalization [M]. Singapore: World Scientific, 2000.

Analyzing Material Strength in Shock-Induced Melting Region with Renormalization Group Theory

RAN Xian-Wen[1,2], TANG Wen-Hui[1], TAN Hua[2], XU Zhi-Hong[1]

(1. *Institute of Technological Physics, College of Science, National University of Defense Technology, Changsha* 410073, *China*;
2. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: The material strength in shock-induced melting region was analyzed with renormalization group theory, and it indicates that the material strength begin to decrease as soon as the melting mass fraction reaches 0.300798, corresponding to the point at which the longitudinal sound velocity initiates the transformation to bulk sound velocity.

Key words: material strength; renormalization group theory; shock-induced melting region; melting mass fraction

《高压物理学报》征稿简则

《高压物理学报》是我国高压物理领域唯一的专业性学术刊物，在国内外公开发行。力求及时报道高压物理学科基础理论和应用研究方面具有创新性、高水平、有重要意义的研究成果，读者对象为国内外科技工作者。征稿内容为动态及静态高压技术，人工合成新材料，高温高压下材料的力学、光、电、磁等特性以及物质微观结构的研究，动态及静态高压研究中的测试技术，高温高压下的相变，高温高压物态方程等。接受中、英文稿件。

1. 来稿应具有科学性、先进性和实用性，论点明确、论据可靠、数据准确、逻辑严谨、文字简练、图表清晰。每篇论文的篇幅应在6 000～8 000字以内，请使用中华人民共和国法定计量单位。论文格式请参考近期出版的《高压物理学报》。请使用电子邮件投稿(gaoya@caep.ac.cn)，也可提供软盘。

2. 所投稿件不得涉及国家及本单位机密，投稿时请附本单位保密审查意见，由审查者签名并加盖公章。

3. 文章标题字数应在20字以内。文中图、表应有自明性，所有图题、图注、表题、表注均为中、英文对照，图、表中的文字一律用英文。

4. 第一作者应确保全体作者同意文章署名，请提供第一作者、通讯作者简介(姓名、出生年、性别、职称、学位、研究方向等)，以及所有联系方式(通信地址、邮政编码、电话号码、传真、电子邮箱等)，以备联系。请注明论文(工作)的资助项目(资助项目名称和批准号)，简要介绍工作背景和论文意义。

5. 来稿应保证文章版权的独立性，严禁抄袭，文责自负，请勿一稿多投。

重点注意事项

▲ 中英文摘要 摘要用第三人称书写，语言要简练，应有具体内容。要求：(1) 拥有与论文同等量的主要信息，重点包括4个要素：即研究目的、方法、结果和结论。(2) 以提供论文梗概为目的，不得评论、解释论文内容。中文摘要应在200～400个字之间，英文摘要不少于120个实词。为便于Ei Compendex以及国外其它数据库收录，英文摘要中尽量避免特殊字符(各种数学符号、上下脚标及希腊字母)及由特殊字符组成的数学表达式；第一句不要与英文题名重复；尽量用短句子并避免句形单调；用过去时态叙述主要工作，用现在时态叙述结论，尽量用主动语态代替被动语态。

▲ 参考文献 参考文献应是公开出版物。请充分著录参考文献，引用条数不宜太少，并尽量引用近期国内外文献，采用“顺序编码制”著录。中文参考文献必须附英译文，著录项目应齐全。

▲ 版权与稿酬 《高压物理学报》已加入《中国学术期刊(光盘版)》、万方数据——数字化期刊群、中国核心期刊(遴选)数据库、中文科技期刊数据库、中国期刊网、台湾中文电子期刊服务——思博网(CEPS)等，并被Ei Compendex光盘收录。凡经本刊录用的稿件，其著作权(包括光盘版和网络版出版权)便自动转让给《高压物理学报》编辑部，编辑部不再另行通知。来稿一经发表，即付稿酬(包括光盘版和网络版稿酬)。

《高压物理学报》一贯秉承服务科学、服务读者、服务作者的办刊理念，慎重对待每一篇来稿，尊重作者劳动。优秀稿件享有快速发表通道，重大创新性成果可在3个月内刊出。

通信地址：四川绵阳919信箱110分箱《高压物理学报》编辑部，邮政编码：621900

电子邮件：gaoya@caep.ac.cn (投稿、征订、咨询)

电　　话：(0816)2490042；传真：(0816)2282695

《高压物理学报》编辑部