文章编号：1000-5773(2011)04-0321-06

准等熵压缩下金属钽的屈服强度分析*

张红平，王桂吉，李 牧，赵剑衡，孙承纬，谭福利，莫建军，祝文军

（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
国防科技重点实验室，四川绵阳 621900）

摘要：为分析固体材料的准等熵压缩实验数据，引入了率相关本构方程和流体弹塑性模型，建立了考虑材料强度效应的反积分数据处理方法。利用 CQ-1.5 磁压驱动装置中多晶钽的准等熵压缩实验数据，对钽的屈服强度和流应力进行了反积分数值模拟和分析，计算了钽的拉格朗日声速和应变率分布情况。得到了钽在准等熵压缩过程中样品内部及加载面上压力和速度的分布及演变规律，获得了 30 GPa 压力下钽的准等熵屈服强度约为 1.85 GPa，准等熵弹性屈服极限约为 2.9 GPa。此外，计算得到了与 Sandia 实验室数据高度吻合的应力-应变曲线和准等熵 p-V 参考线。

关键词：反积分方法；准等熵压缩；屈服强度；拉格朗日声速
中图分类号：O521.2 **文献标识码**：A

1 引 言

准等熵压缩实验对于研究材料物态方程、高能量密度物理以及武器物理等具有重要意义。国外已经公开发表了大量金属材料及含能材料的准等熵压缩实验结果[1-4]。以往的大多数工作都是基于流体近似模型，对准等熵压缩下不同厚度样品的表面速度历史进行分析后，得到样品的应力-应变关系。但是，直接得到的曲线包含了大量信息：准等熵压缩过程会产生熵增，导致实际温度高于等熵压缩温度，因此相同比容下流体静水压产生了一个由熵增引起的增量；另外，准等熵压缩过程的温升较低，一般不会出现冲击软化现象，且连续加载使应力-应变状态更易处于材料的上屈服面，材料的动态屈服强度和偏应力较冲击加载更高，偏应力与总应力的比值也更大。因此，要得到基于静水压的热力学状态方程参考线，就必须考虑流动应力和熵增问题。目前，磁驱动准等熵压缩过程的加载应变率约为 10^5 s^{-1} 量级，样品在压缩过程中的温升很小，等熵程度较高，因此应力-应变曲线偏离等熵线的主要因素是流应力。近年来，Asay[5]、Vogler[6-7] 和 Smith[8] 等人已经开始在准等熵压缩实验数据分析中考虑弹塑性的影响，但大多是基于拉格朗日分析法对实验数据进行处理，无法给出样品内部的参数分布。国内由于开展准等熵加载实验[9-10]的时间较短，还没有开展这方面的工作。

本研究利用 CQ-1.5 磁压驱动装置[10]对多晶钽样品进行准等熵加载实验，对实验数据进行反积分[11]处理，引入率相关 Steinberg 本构模型[12]描述准等熵压缩样品的屈服强度，通过对样品内部准等熵压缩过程的数值模拟，进一步分析钽样品的屈服强度、拉格朗日声速、准等熵参考线和应力-应变曲线等力学关系。

* **收稿日期**：2010-03-22；**修回日期**：2010-07-02
基金项目：国家自然科学基金(10927201)；中国博士后科学基金(20090451425)；中国工程物理研究院科学技术基金(2010A0201006，2011B0201003)
作者简介：张红平(1981－)，女，博士，助理研究员，主要从事无冲击加载实验的数据处理及分析研究.
E-mail：zhp_rachel@yahoo.cn

2 数学模型

准等熵压缩属于一维平面压缩,可用单轴应变条件下的力学性能进行描述。样品材料的压缩状态可用具有拉格朗日形式的质量方程和动量方程表示,即

$$\frac{\partial v}{\partial t}=\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}=-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial \sigma}{\partial x} \tag{2}$$

式中:σ、u、v 分别为轴向应力、速度和比容;$\rho_0=1/v_0$ 为初始密度,v_0 为初始比容。在单轴应变下,总应力为 $\sigma=p+4\tau/3$,其中 τ 为剪应力。

需要补充一个力学响应关系式才能使(1)式和(2)式封闭。在准等熵压缩实验中,可选取压缩到 ε_S 时的准等熵参考线[13]

$$p(v)=p_0+\rho_0 c_0^2 \mathrm{e}^{\Gamma_0\varepsilon}\int_0^{\varepsilon_S}\frac{1-(\Gamma_0-\lambda)\varepsilon}{(1-\lambda\varepsilon)^3}\mathrm{e}^{-\Gamma_0\varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon \tag{3}$$

式中:c_0 为零压下的材料体声速,λ 为材料常数,Γ_0 为 Grüneisen 系数,$\varepsilon=1-v/v_0$ 为体应变。

2.1 控制方程组

国外已公开发表的 Z 机器上的实验数据处理过程是:通过测量基板后界面速度剖面[5,14]得到基板的加载历史,以此为边界条件,向样品方向进行正积分计算,直至得到样品后界面/自由面速度,通过与后界面/自由面速度剖面的测量结果进行比较,验证积分方法的有效性。这种方法需要相同加载条件下至少 4 个不同厚度台阶样品的动态压缩实验数据,因此严重限制了其应用范围。为了建立合适的准等熵压缩实验数据处理技术,将实验测得的样品自由面速度历史作为"初始条件",用反积分方法向样品内部进行反向计算,对应的反积分控制方程为

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x}=-\rho_0\frac{\partial u}{\partial t} \tag{4}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}=\rho_0\frac{\partial v}{\partial t} \tag{5}$$

式中:$v=F(p)$,其中 $p=\sigma-4\tau/3$。样品材料屈服前,$\tau\leqslant Y/2$,满足本构关系[11]

$$\frac{\partial \tau}{\partial t}=\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)}\frac{\partial \sigma}{\partial t} \tag{6}$$

式中:ν 为泊松比,Y 为屈服强度。样品材料屈服后,$\tau=Y/2$,满足修正后的适用于一定应变率范围($10^{-4}\sim10^{6}\ \mathrm{s}^{-1}$)的 SCG 本构模型[12,15]

$$Y=\left[Y_T(\dot{\varepsilon}_\mathrm{p},T)+Y_\mathrm{A}(1+\beta\varepsilon_\mathrm{p})^n\right]\frac{G(p,T)}{G_0} \tag{7}$$

$$G(p,T)=G_0\left[1+\frac{G_p'}{G_0}\frac{p}{(v_0/v)^{1/3}}-\frac{G_T'}{G_0}(T-300)\right] \tag{8}$$

$$\dot{\varepsilon}_\mathrm{p}=\left\{\frac{1}{C_1}\exp\left[\frac{2U_\mathrm{k}}{kT}\left(1-\frac{Y_T}{Y_\mathrm{p}}\right)^2\right]+\frac{C_2}{Y_T}\right\}^{-1} \tag{9}$$

式中:$\dot{\varepsilon}_\mathrm{p}$ 为塑性应变率;初始屈服强度 $Y_0=0.77$ GPa;剪切模量 $G_0=69$ GPa;加工硬化函数 $(1+\beta\varepsilon_\mathrm{p})^n$ 中[16],$\beta=22$,$n=0.283$;$G_p'=1.0$;$G_T'=0.009$ GPa/K;$Y_\mathrm{A}=0.375$ GPa;Peierls 应力 $Y_\mathrm{p}=1.0$ GPa;$2U_\mathrm{k}=0.62$ eV,表示长度为 L 的位错形成一对位错结的能量;k 为 Boltzmann 常数;C_1、C_2 为常数,且 $C_1=0.71\times10^{6}\ \mathrm{s}^{-1}$,$C_2=0.012$ MPa/s[12]。需要指出的是,由于准等熵压缩实验中的温升较小,因此这里不考虑温度效应,温度 T 取常数 300 K。

在 $v=F(p)$ 中,可利用

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}p}=\frac{1}{\Gamma_0 p-G(\varepsilon)v_0} \tag{10}$$

$$G(\varepsilon)=\frac{\rho_0 c_0^2}{v_0}\frac{(\Gamma_0-\lambda)\varepsilon-1}{(1-\lambda\varepsilon)^3}+\frac{\Gamma_0 p_0}{v_0} \tag{11}$$

对于钽,$\Gamma_0=1.82$,$c_0=3.43$ km/s,$\lambda=1.19$,$\rho_0=16.754$ g/cm^3。以不同厚度样品的相同加载历史为判据,反积分方法可以不断调整(11)式中的参数,以获取数学上更准确的力学响应关系式。

2.2　差分格式

为保证求解结果的二阶精度,上述反积分控制方程组对应的差分格式为

$$\sigma(x-\mathrm{d}x,t)=\sigma(x,t)+\frac{1}{2}\rho_0[u(x,t+\mathrm{d}t)-u(x,t-\mathrm{d}t)]\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \tag{12}$$

$$v(x-\mathrm{d}x,t)=F(p(x-\mathrm{d}x,t)) \tag{13}$$

$$p(x-\mathrm{d}x,t)=\sigma(x-\mathrm{d}x,t)-\frac{4}{3}\tau(x-\mathrm{d}x,t) \tag{14}$$

$$u(x-\mathrm{d}x,t)=u(x,t)-\frac{1}{2\rho_0}[v(x-\mathrm{d}x,t+\mathrm{d}t)-v(x-\mathrm{d}x,t-\mathrm{d}t)]\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \tag{15}$$

根据(12)式,由样品后自由面速度历史可求出材料内部某节点 h 处的应力历史 $\sigma(t)$,利用剪应力 $\tau(t)$计算出该节点的压力历史 $p(t)$后,通过(13)式和(14)式即可求得比容历史 $v(t)$和速度历史 $u(t)$,其它物理量如应变率、屈服强度等也可计算求出。此时需要比较剪应力和屈服强度,以判断材料是否发生屈服:如仍在弹性阶段,则返回(12)式进行下一节点 $h-\mathrm{d}x$ 的计算;若已发生屈服,则根据屈服强度调整剪应力的数值,更新压力数据,返回(13)式进行该位置 h 数据的更新。为了保证计算精度,剪应力和屈服强度的比较采用多次迭代计算。重复上述步骤可逐步向内得到加载面的应力、比容和速度历史。计算比容历史时,采用二阶 Runge-Kutta 法(PEC 预估校正格式)对(10)式进行计算。

3　数值结果与分析

多晶钽的准等熵压缩实验是在 CQ-1.5 磁压驱动装置上进行的。利用 VISAR 测量了 2.00 mm 和 2.52 mm 厚钽样品的自由面速度剖面,如图 1 所示。从中可以清晰地看到,应力波在上升过程中表现为双波结构,即前 50 ns 表现为弹性前驱波,经过一个应力平台后转变为塑性波。

图 2 为反积分法计算得到的加载面速度剖面和压力历史。可见,具有相同加载历史的不同厚度钽样品的加载速度和压力重合得很好,差异不足 3%;在约 700 ns 的时间内,样品速度上升到 0.45 km/s,压力达到近 30 GPa。

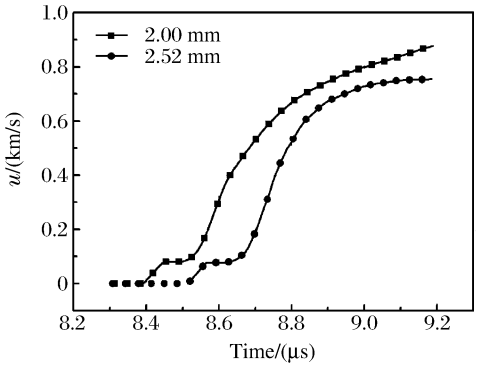


图 1　准等熵压缩下不同厚度钽样品的自由面速度剖面

Fig. 1　Free surface velocities of tantalum samples with different thickness in quasi-isentropic compression

相对于其它数据处理方法,反积分方法的优势在于可以根据需要获得样品内部任一位置处的力学参数。图 3 给出了通过反积分法得到的 2.00 mm 厚钽样品内部的应力分布情况。从图 3 中可以明显地看出,压缩波到达自由面后反射形成稀疏波,反射稀疏波与后来的压缩波相交,使特征线发生弯曲,即计算域上边界在稀疏波影响区内发生轻微上翘。样品中高压影响区的范围受控于样品厚度,样品中的最大压力取决于加载脉宽和应力波在样品中往复传播所需的时间,这为样品设计提供一定依据。

图 4 给出了 2.00 mm 厚钽样品内 4 个不同位置(距离加载面 0、0.5、1.0 和 1.5 mm)处的粒子速度和应变率随时间的变化关系。可以看出:在样品内部,即使在屈服前,应变率也达到了 10^5 s^{-1};发生塑性变形后,应变率先下降继而上升,最大值达到 4×10^5 s^{-1},应变率峰值对应于粒子速度曲线斜率的最大值处,当压缩达到峰值,即比容最小时,应变率接近零;在不同拉格朗日位置处,离加载面距离越远,峰值应变率越大;在自由面上,比容不发生变化,因此应变率为零。

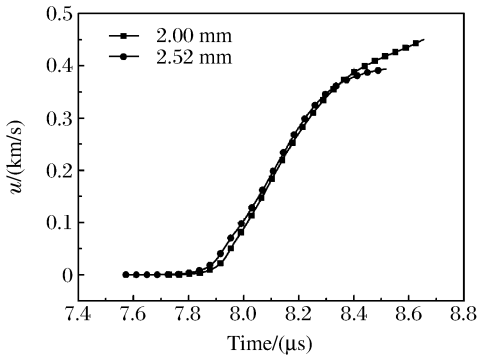


图 2(a) 不同厚度钽样品的加载面速度历史

Fig. 2(a) Loading velocities of tantalum samples with different thickness

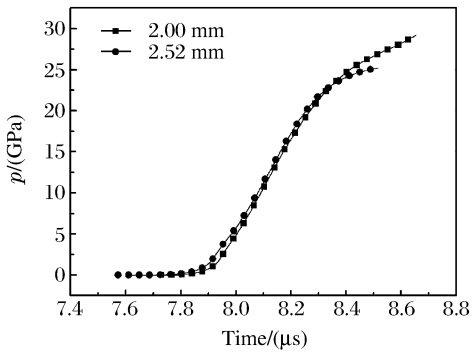


图 2(b) 不同厚度钽样品的加载面压力历史

Fig. 2(b) Loading pressures of tantalum samples with different thickness

计算得到的应力-应变曲线以及准等熵 p-V 参考线如图 5 所示。从中可以看出:计算得到的应力-应变曲线和准等熵 p-V 参考线与 Asay 等人[5]的实验结果吻合很好。对应于 Hugoniot 弹性极限,当剪应力达到弹性加载下的最大值,即发生屈服时,对应的准等熵加载正应力 σ_{IEL} 称为准等熵弹性屈服极限。本研究通过屈服强度((7)式)和剪应力((6)式)的迭代计算来判断屈服点,得到的准等熵弹性屈服极限 σ_{IEL} 约为 2.9 GPa,与 Asay 等人经过多次实验求得的平均值 3.2 GPa[5]非常接近。从图 5 还可以看出,应力-应变曲线在拐点 2.9 GPa 之前应力随应变线性变化,随后应力值依赖于屈服强度 Y。为此,本研究计算了静水压,即准等熵 p-V 参考线,并与 Asay 等人[5]的参考线进行比较,得到的最大差异也不足 1%。这说明,用反积分法计算得到的钽的应力-应变曲线和准等熵 p-V 参考线准确可靠。

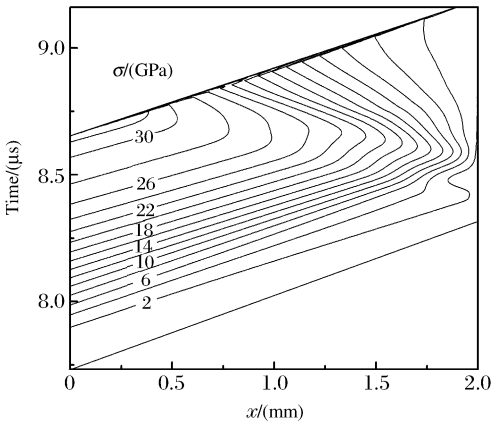


图 3 计算得到的 2.00 mm 厚钽样品内部的应力分布

Fig. 3 Calculated stress contours in the tantalum sample with 2.00 mm thickness

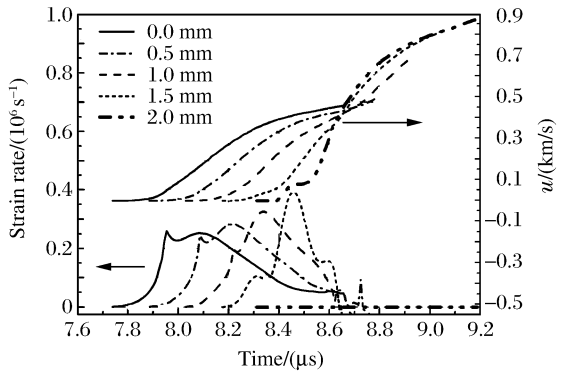


图 4 钽样品内部不同位置处的速度和应变率历史

Fig. 4 Particle velocity and strain rate histories at different Lagrange positions in the tantalum sample

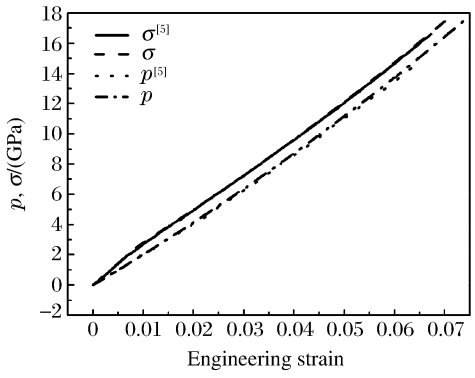


图 5 钽的准等熵 p-V 参考线和应力-应变曲线

Fig. 5 The pressure-volume and stress-strain curves of tantalum sample

为了进一步了解钽在准等熵压缩下的动态屈服强度,采用 Steinberg 本构模型,计算了动态屈服强

度 Y 和偏应力 $S=4\tau/3$ 随加载应力的变化关系,如图 6(a)所示。当应力达到 18 GPa 时,Y 约为 1.6 GPa,这与 Asay 等人[5]的实验结果 1.6 GPa 一致。本实验中,由于应力峰值达到了 30 GPa,因此 Y 的最大值近 1.85 GPa。从图 6(a)中还可以看出,偏应力 S 存在一个拐点(0.82 GPa),拐点两侧(弹性区和塑性区),偏应力-加载应力曲线的斜率不同,即在弹性区内偏应力与总应力的比值约为 31%,屈服后偏应力依赖于屈服强度 $2Y/3$,其中拐点 $S=0.82$ GPa 对应的横坐标即为准等熵弹性屈服极限 σ_{IEL} (2.9 GPa)。随着工程应变的不断增加,偏应力占总应力的比值逐渐下降,在总应力达到 $10\sigma_{\mathrm{IEL}}$ 时,比值降至 4%以下。

图 6(b)给出了拉格朗日纵波声速 c_{l}、横波声速 c_{t} 和体声速 c_{b} 随粒子速度的变化情况。可以看出:弹性前驱波中,初始时刻弹性波速 c_{l} 为 4.12 km/s,接近于实验值 4.14 km/s,c_{l} 缓慢增大;材料屈服后,c_{l} 迅速减小至 3.5 km/s,这说明准等熵压缩下钽的力学响应并非纯弹性响应,此时已伴随了部分塑性变形;完全屈服后,c_{l} 又开始增加,变化趋势接近于体声速 c_{b}。

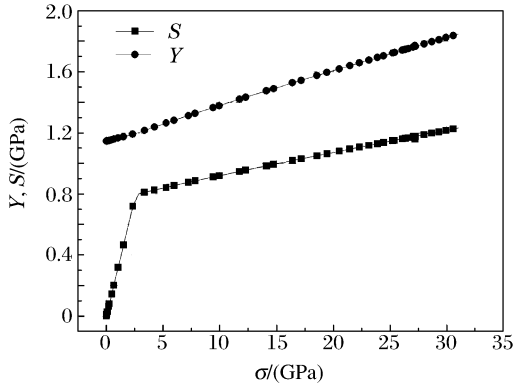


图 6(a)　准等熵压缩过程中钽的动态屈服强度和偏应力的变化规律

Fig. 6(a)　Yield strength and deviatonic stress of tantalum in quasi-isentropic compression

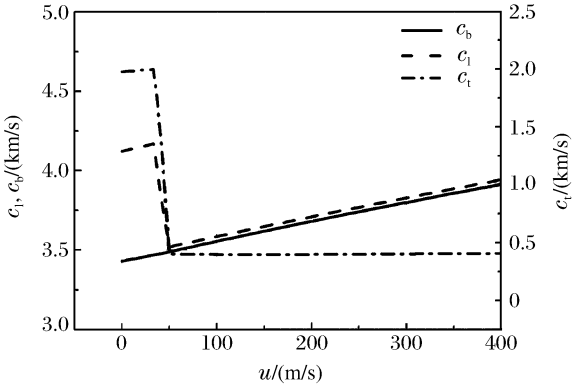


图 6(b)　准等熵压缩过程中钽的拉格朗日声速的变化规律

Fig. 6(b)　Lagrangian sound speed of tantalum in quasi-isentropic compression

4　结　论

采用反积分方法,对金属钽的准等熵压缩实验数据进行了数值分析,结合应变率($10^{-4}\sim10^{6}$ s^{-1})相关的 Steinberg 本构模型,对钽的屈服强度进行了计算,得到了钽的准等熵屈服强度、弹性屈服极限以及准等熵压缩应力-应变曲线,分析了拉格朗日声速的变化规律。计算结果表明:SCG 模型能够用于描述准等熵压缩过程中材料的弹塑性,所得结果与拉格朗日分析结果一致;在本实验的加载条件(应变率约为 10^{5} s^{-1})下,多晶钽的屈服强度为 2.9 GPa,屈服前后偏应力占总应力的比值较大(20%～30%),当总应力达到 10 倍弹性极限时,忽略固体强度效应的计算误差在 4%以内。

References:

[1] Davis J P. Experimental Measurement of the Principal Isentrope for Aluminum 6061-T6 to 240 GPa [J]. J Appl Phys,2006,99(10):103512.

[2] Hall C A. Isentropic Compression Experiments on the Sandia Z Accelerator [J]. Phys Plasmas,2000,7(5):2069-2075.

[3] Hereil P L,Lassalle F,Avrillaud G. GEPI:An Ice Generator for Dynamic Material Characterization and Hypervelocity Impact [J]. AIP Conference Proceedings,2004,706(1):1209-1212.

[4] Baer M R,Hall C A,Gustavsen R L,et al. Isentropic Loading Experiments of a Plastic Bonded Explosive and Constituents [J]. J Appl Phys,2007,101(3):034906.

[5] Asay J R,Ao T,Vogler T J,et al. Yield Strength of Tantalum for Shockless Compression to 18 GPa [J]. J Appl

Phys,2009,106(7):073515.
[6] Vogler T J. On Measuring the Strength of Metals at Ultrahigh Strain Rates [J]. J Appl Phys,2009,106(5):053530.
[7] Vogler T J,Ao T,Asay J R. High-Pressure Strength of Aluminum under Auasi-Isentropic Loading [J]. Int J Plast,2009,25(4):671-694.
[8] Smith R F,Eggert J H,Jankowski A,et al. Stiff Response of Aluminum under Ultrafast Shockless Compression to 110 GPa [J]. Phys Rev Lett,2007,98(6):065701.
[9] Cai J T,Wang G J,Zhao J H,et al. Magnetically Driven Quasi-Isentropic Compression Experiments of Solid Explosives [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2010,24(6):455-460. (in Chinese)
蔡进涛,王桂吉,赵剑衡,等. 固体炸药的磁驱动准等熵压缩实验研究 [J]. 高压物理学报,2010,24(6):455-460.
[10] Wang G J,Sun C W,Tan F L,et al. The Compact Capacitor Bank CQ-1.5 Employed in Magnetically Driven Isentropic Compression and High Velocity Flyer Plate Experiments [J]. Rev Sci Instrum,2008,79(5):053904.
[11] Hayes D B. Backward Integration of the Equations of Motion to Correct for Free Surface Perturbations,SAND2001-1440 [R]. USA:Sandia National Laboratories,2001.
[12] Steinberg D J,Lund C M. A Constitutive Model for Strain Rates from 10^{-4} to 10^{6} s^{-1} [J]. J Appl Phys,1989,65(4):1528-1533.
[13] Mo J J. Calculation of Metallic Compression Isentropes and Study on Isentropic Compression Experiments by Detonation Driving [D]. Mianyang:China Academy of Engineering Physics,2006:46-49. (in Chinese)
莫建军. 金属等熵压缩线计算及爆轰加载等熵压缩实验研究 [D]. 绵阳:中国工程物理研究院,2006:46-49.
[14] Baer M R,Hall C A,Gustavsen R L,et al. Isentropic Loading Experiments of a Plastic Bonded Explosive and Constituents [J]. J Appl Phys,2007,101(3):034906.
[15] Steinberg D J. A Rate-Dependent Constitutive Model for Molybdenum [J]. J Appl Phys,1993,74(6):3827-3831.
[16] Steinberg D J. Constitutive Model Used in Computer Simulation of Time-Resolved,Shock-Wave Data [J]. Int J Impact Eng,1987,5(1-4):603-611.
[17] Tan H. Introduction to Experimental Shock-Wave Physics [M]. Beijing:National Defence Industry Press,2007. (in Chinese)
谭 华. 实验冲击波物理导引 [M]. 北京:国防工业出版社,2007.

Yield Strength Analysis of Tantalum in Quasi-Isentropic Compression

ZHANG Hong-Ping,WANG Gui-Ji,LI Mu,ZHAO Jian-Heng,
SUN Cheng-Wei,TAN Fu-Li,MO Jian-Jun,ZHU Wen-Jun

(*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics,*
Institute of Fluid Physics,CAEP,Mianyang 621900,*China*)

Abstract: For analyzing the quasi-isentropic compression experimental data of solid materials, a backward integration method with strength effect is presented based on rate-dependent constitutive equation and fluid elastic-plastic model. From the quasi-isentropic compression data of tantalum on CQ-1.5 with a loading time of 700 ns, the yield strength, deviatoric stress and interior information of the tantalum sample are calculated. Moreover, the Lagrangian sound speed and strain rate are also analyzed. As a result, the driving history and stress distribution of the tantalum sample are obtained. It is found that the yield strength of 1.85 GPa corresponds to the peak stress (30 GPa) with strain rates of 10^{5} s^{-1}, and the isentropic elastic limit is about 2.9 GPa. Numerical results show that the calculated stress-strain and pressure-volume curves appear to be in good agreement with the experimental data from Sandia National Laboratory.

Key words: backward integration method; quasi-isentrope compression; yield strength; Lagrangian sound speed