

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ УПРУГОЙ ЭНЕРГИИ МЕТАЛЛОВ ПРИ НЕШАРОВОМ ТЕНЗОРЕ ДЕФОРМАЦИИ

С. К. Годунов, Н. С. Козин, Е. И. Роменский

(Новосибирск)

Приведены интерполяционные формулы уравнений состояния и коэффициента теплопроводности для железа (α -фаза), алюминия, никеля, свинца и титана. Эти формулы представляют собой новую запись уравнений состояния, приведенных в [1]. Выражение для «холодной» энергии интерполировано в интервале сжатия $0.9 \leq \delta \leq 2.0$ таким образом, чтобы холодное давление и квадрат скорости звука являлись полиномами по степеням $\delta - 1$.

1. Цель работы состоит в приведении уравнения состояния к виду, удобному при изучении процессов в переходной области, когда сжатие еще близко к единице, но уже существенны нелинейные процессы. В этой области нельзя ограничиться рассмотрением шарового тензора деформаций. Поэтому в холодную энергию вещества необходимо ввести слагаемое, учитывающее энергию формоизменения. Это слагаемое вводится таким образом, чтобы энергия холодного деформирования при малых деформациях совпадала с холодной энергией, используемой в линейной теории упругости. При сравнительно небольших сжатиях и малых девиаторах тензора деформаций используемые формулы приводят к такому отношению скоростей продольных и поперечных волн, которое по теории Дебая вытекает из представления тепловой части энергии [1] (скорость поперечных волн зависит от температуры, но в литературе авторы не обнаружили информации, позволяющей учесть эту зависимость. Не учтена также тензорная зависимость теплопроводности от направления деформирования среды).

Описываемое здесь исследование было предпринято, чтобы сформулировать уравнение состояния в виде, пригодном для замыкания уравнений нелинейной теории упругости, предложенной в [2]. Для полного замыкания этих уравнений необходимо еще задавать зависимость времени τ релаксации касательных напряжений от состояния среды.

Для описания трехосной деформации $x_i' = a_i x_i$ можно пользоваться коэффициентами a_i растяжения по главным осям ($i = 1, 2, 3$).

Следуя [2], вместо a_i вводятся параметры и инварианты тензора деформации

$$\delta = \rho / \rho_0 = (a_1 a_2 a_3)^{-1}, \quad \alpha_i = \ln a_i, \quad d_i = \alpha_i - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) / 3$$

$$D = 1/2 (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2), \quad \Delta = d_1 d_2 d_3 = 1/3 (d_1^3 + d_2^3 + d_3^3)$$

Для малых деформаций α_i практически совпадают с ϵ_i — главными значениями тензора деформаций, а α_i — с главными значениями его девиатора. Рассматривая деформации, близкие к шаровым, ограничимся линейной зависимостью внутренней энергии единицы массы вещества от D с коэффициентом, который зависит от плотности.

Зависимость энергии от энтропии S заимствована из [1]. Зависящий от плотности коэффициент $\gamma(\delta)$ в формуле для дебаевской температуры

$\theta = \theta_0 \gamma(\delta)$ представлен интерполяционным полиномом. Для функции Дебая проведена интерполяция, пригодная в рассматриваемом случае для не слишком низких температур. В диапазоне изучаемых температур можно пренебречь высокотемпературными поправками ([1], гл. 3).

Ниже приводятся формулы для уравнения состояния и для коэффициента теплопроводности. Необходимые пояснения способа их получения даны ниже

$$E(\delta, D, s) = \frac{1}{2}(c_0^2 - \frac{4}{3}b_0^2)(\delta - 1)^2 e_0(\delta) + 2b_0^2 e_1(\delta) D + c_0^2 \gamma_0 [\gamma(\delta) g(s) - g(s_0)(1 + \gamma_1(\delta))]$$

$$g(s) = s + 0.05/s, \quad s_0 = 293/\theta_0$$

$$S = \frac{c_0^2 \gamma_0}{\theta_0} [\ln(s/s_0) + 0.025(s^{-2} - s_0^{-2})]$$

$$\kappa = (c_0^4 \rho_0 \tau_c / \theta_0) [k_0 \delta^{2/3} / (1 - k_1 \theta_0 / T)], \quad T = \theta_0 \gamma(\delta) s$$

Здесь через s обозначена энтропийная переменная

$$s = T / (\theta_0 \gamma(\delta))$$

$$e_0(\delta) = 1 + (\delta - 1)[e_{00} + e_{01}/\delta + e_{02} \cdot 3(\ln \delta + 1 - \delta + (\delta - 1)^2/2) / (\delta - 1)^3]$$

$$e_1(\delta) = 1 + e_{11}(\delta - 1) + e_{12}(\delta - 1)^2 + e_{13}(\delta - 1)^3$$

$$\gamma(\delta) = 1 + \gamma_1(\delta - 1) + \gamma_2(\delta - 1)^2 + \gamma_3(\delta - 1)^3$$

Значения размерных величин c_0 , b_0 , ρ_0 , τ_c , θ_0 и остальных безразмерных коэффициентов приведены в табл. 1, 2. Все они имеют смысл интерполяционных констант.

Таблица 1

	Fe	Al	Cu	Ni	Pb	Ti
c_0 , км/сек	5.694	6.1215	4.651	5.437	2.151	5.853
b_0 , км/см	2.8659	2.9408	2.1409	2.4852	0.81231	2.9633
ρ_0 , г/см ³	7.840	2.785	8.900	8.860	11.340	4.510
τ_0 , 10 ⁻¹⁰ сек	0.712	0.767	0.950	0.797	3.40	0.787
θ_0 , °K	420	390	315	375	88	380
c_0^* , км/сек	5.718	6.201	4.685	5.616	2.213	5.835

Таблица 2

	Fe	Al	Cu	Ni	Pb	Ti
e_{00}	-0.042677	-0.086910	-0.090295	0.13409	-0.087230	10.9249
e_{01}	0.476118	4.49551	-0.047651	-1.25740	-0.392806	33.0090
e_{02}	0.639602	-0.38037	-0.83229	-1.099112	-0.087247	31.14893
e_{11}	2.6917	3.5769	3.4054	8.0180	4.8950	1.18037
e_{12}	-0.017537	1.0168	0.89094	10.661	6.9338	-2.84806
e_{13}	-0.13352	-0.44743	-0.40499	44.448	1.4611	1.5210
γ_0	0.005786	0.009617	0.005713	0.005351	0.002288	0.005773
γ_1	1.6723	2.1171	2.02934	3.95918	2.7746	1.0762
γ_2	-0.40804	-0.33262	-0.31394	4.0723	1.0464	-1.7366
γ_3	0.11311	0.093944	0.084733	0.70964	-0.11896	0.82778
$10^4 \cdot k_0$	0.9021	3.4845	4.0831	0.1777	0.07468	0.04201
k_1	0.33095	0.14615	0.19683	0.39467	0.68182	0.28947
s_0	0.7143	0.7520	0.9390	0.7820	3.335	0.7710

Приведенное выше уравнение состояния позволяет с помощью соотношений ([²])

$$\sigma_i = -\rho^2 E_\rho + \rho E_D d_i, \quad p = \rho^2 E_\rho$$

вычислить главные напряжения σ_i и среднее давление

$$p = -(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) / 3$$

В результате имеем

$$\begin{aligned} \sigma_i &= -p + 2\rho_0 b_0^2 \delta e_i(\delta) d_i \\ p &= \rho_0 [(c_0^2 - 4/3 b_0^2)(\delta - 1) p_0(\delta) + b_0^2 p_1(\delta) \delta^2 D + \\ &\quad + c_0 \gamma_0 \delta^2 (p_2(\delta) g(s) - p_2(1) g(s_0))] \\ p_0(\delta) &= 1 + p_{01}(\delta - 1) + p_{02}(\delta - 1)^2 + p_{03}(\delta - 1)^3 \\ p_1(\delta) &= p_{10} + p_{11}(\delta - 1) + p_{12}(\delta - 1)^2 \\ p_2(\delta) &= p_{20} + p_{21}(\delta - 1) + p_{22}(\delta - 1)^2 \end{aligned}$$

Формулы для квадратов скоростей продольных и поперечных звуковых волн c^2 и b^2 , вычисленные при шаровом тензоре деформации ($a_1 = a_2 = a_3 = \delta^{-1/3}$) имеют вид

$$\begin{aligned} c^2 &= c_0^2 [1 + c_1(\delta - 1) + c_2(\delta - 1)^2 + c_3(\delta - 1)^3] + \\ &\quad + c_0 \gamma_0 g(s) (\partial/\partial \delta) [\delta^2 p_2(\delta)] \\ b^2 &= b_0^2 [1 + b_1(\delta - 1) + b_2(\delta - 1)^2 + b_3(\delta - 1)^3] \end{aligned}$$

Квадрат холодной скорости звука c_*^2 получается отбрасыванием в формуле для c^2 слагаемого, пропорционального энтропийной функции $g(s)$

$$c_*^2 = c_0^2 [1 + c_1(\delta - 1) + c_2(\delta - 1)^2 + c_3(\delta - 1)^3]$$

(В использованной интерполяции $b = b(\delta) = b_*(\delta)$ и не зависит от температур.) Коэффициенты p_{ij} , c_i , b_i интерполяционных полиномов для давления и скоростей звука приведены в табл. 3. Во всех приведенных формулах под $\delta = \rho / \rho_0$ понимается сжатие по отношению к состоянию при нулевом давлении и $T = 293^\circ$. Скорости звука c_0 и b_0 относятся к состоянию $\delta = 1$, $D = 0$, $T = 0$. В табл. 1 приведены значения скоро-

Таблица 3

	Fe	Al	Cu	Ni	Pb	Ti
p_{01}	1.4527	2.1167	1.94175	2.5924	1.86895	4.67294
p_{02}	0.15063	1.14810	0.83013	2.4222	0.67277	3.5558
p_{03}	-0.064015	-0.13037	-0.13544	0.20113	-0.13085	16.3873
p_{10}	2.6917	3.5769	3.4054	8.0180	4.8950	1.18037
p_{11}	-0.035074	2.0336	1.78118	21.322	13.868	-5.6961
p_{12}	-0.40056	-1.34229	-1.2150	133.34	4.3833	4.5630
p_{20}	1.6723	2.1171	2.02934	3.95918	2.7746	1.0762
p_{21}	-0.81608	-0.66524	-0.62788	8.1446	2.0928	-3.4732
p_{22}	0.33933	0.28183	0.25420	0.21289	-0.35679	2.4833
c_1	2.8332	4.0314	3.74843	5.9741	3.95792	6.55516
c_2	0.29332	2.6973	2.0385	8.21226	2.9530	6.048182
c_3	-0.21467	-0.49868	-0.50313	12.9625	0.90073	43.6665
b_1	2.6917	3.5769	3.4054	8.0180	4.8950	1.18037
b_2	-0.017537	1.0168	0.89094	10.661	6.9338	-2.84806
b_3	-0.13352	-0.44743	-0.40499	44.448	1.4611	1.5210

сти звука c_0^* при $\delta = 1$, $D = 0$, $T = 293^\circ$, вычисленные по формуле

$$c_0^* = c_0 [1 + \gamma_0 g(s_0)(2p_{20} + p_{21})]^{1/2}$$

2. За исходное уравнение состояния холодного вещества была принята формула ([1])

$$E_*(\delta) = \frac{3A}{B\rho_0} \exp[B(1 - \delta^{-1/3})] - \frac{3K}{\rho_0} \delta^{1/3}$$

Вытекающие из нее представления холодного давления и модуля холодного объемного сжатия имеют вид

$$p_*(\delta) = \rho_0 \delta^2 \frac{\partial E_*}{\partial \delta} = A \delta^{2/3} \exp[B(1 - \delta^{-1/3})] - K \delta^{1/3}$$

$$M(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p_*}{\partial \delta} = \frac{2A}{3\rho_0} \delta^{-1/3} \left(1 + \frac{B}{2} \delta^{-1/3}\right) \exp[B(1 - \delta^{-1/3})] - \frac{4K}{3\rho_0} \delta^{1/3}$$

Модуль объемного сжатия связан со скоростями продольных и поперечных звуковых волн $c_*(\delta)$ и $b_*(\delta)$ соотношением

$$M(\delta) = c_*^2 - 4/3 b_*^2$$

Скорости, отмеченные звездочкой, вычислены по холодному уравнению состояния. В [1] предложены три различных способа интерполяции зависимости температуры Дебая от плотности ([1], стр. 43, (2.45)). Вариант с $m = 0$ эквивалентен зависимости

$$\theta(\delta) = \theta_0 \delta^{\epsilon+1/3} \sqrt{M(\delta)/M(1)}$$

Постоянные A , B , ρ_0 , θ_0 , ϵ характеризуют вещество и указаны в [1]. Величина K имеет вид

$$K = A + \Gamma \frac{\theta_0}{c_0^2} \frac{3R}{\mu} \left[\frac{293}{\theta_0} + 0.05\theta_0/293 \right]$$

Здесь Γ — параметр Грюнайзена, R — универсальная газовая постоянная, μ — атомный вес.

Для определения скорости поперечных волн постулируем интерполяционную формулу Дебая для $\theta(\rho)$, имеющую вид

$$\frac{1}{c_*^3} + \frac{2}{b_*^3} = \left(\frac{h}{k}\right)^3 \frac{18\pi L \rho_0}{\mu} \frac{\delta}{\theta^3(\delta)}$$

где h — постоянная Планка, k — постоянная Больцмана, L — число Авогадро. Из этой формулы, а также из равенства

$$c_*^2 - 4/3 b_*^2 = M(\delta)$$

могут быть при каждом фиксированном δ определены значения $b_*(\delta)$. Авторами были составлены таблицы функций $M(\delta)$, $b_*^2(\delta)$, $\gamma(\delta) = \theta(\delta)/\theta_0$ в интервале $0.9 \leq \delta \leq 2.0$, которые затем были приближены кубическими полиномами от $(\delta - 1)$. Формулы для $E_*(\delta, D)$, $p_*(\delta)$ получаются квадратурами соотношений

$$\frac{dp_*}{d\delta} = \rho_0 M(\delta), \quad \frac{\partial E_*(\delta, 0)}{\partial \delta} = \frac{p_*(\delta)}{\rho_0 \delta^2}, \quad \frac{\partial E_*(\delta, D)}{\partial D} = 2b_*^2(\delta)$$

Формула для полной энергии получается добавлением к $E_*(\delta, D)$ тепловой энергии Дебая

$$E = E_*(\delta, D) + \theta(\delta) g(T/\theta(\delta))$$

Полагая $s = T / \theta (\delta)$, получаем согласно теории Дебая

$$g(s) = \frac{3R}{\mu} \left[\frac{3}{8} + sD \left(\frac{1}{s} \right) \right], \quad D(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

$$S = \frac{1}{s} g(s) + \int \frac{g(s)}{s^2} ds$$

Формулы, приближающие $D(z)$ для высоких и низких температур, известны и приведены в [1]. Имея в виду применение к деформации металлов при взрывах, когда можно считать, что температуры либо выше, либо не намного ниже дебаевских, имеет место приближенная формула

$$D(z) = 1 - \frac{3}{8} z + \frac{1}{20} z^2$$

откуда

$$g(s) = \frac{3R}{\mu} s \left(1 + \frac{1}{20s^2} \right), \quad S = \frac{3R}{\mu} \left[\ln s + \frac{1}{40s^2} \right] - S_0$$

Эти формулы имеют ограниченную область применимости, например при $s = 1/20$ нарушается монотонность $S(s)$. При необходимости рассматривать низкие температуры можно воспользоваться более точными приближенными $D(z)$, используя те же зависимости для $E_*(\delta, D)$, $\theta = \gamma(\delta)\theta_0$. Ввиду указанных ограничений интерполяционные формулы п. 1 применимы для интервалов сжатий $0.9 \leq \delta \leq 2.0$ и температур $100 \leq T \leq \theta_e$, где θ_e — температура вырождения электронов ($T \approx 0.5 \cdot 10^6 Z^{1/3}$, Ze — заряд ядра, e — заряд электрона). Отклонение интерполированных величин $\gamma(\delta)$, $b_*^2(\delta)$ и $M(\delta)$ от значений приближающих полиномов на интервале $1.0 \leq \delta \leq 2.0$ составляет $\sim 1\%$, а на интервале $0.9 \leq \delta \leq 1.0$ соответственно $\sim 5\%$.

Величины коэффициентов A, B, ϵ, Γ , а также атомный вес μ , использованные при получении интерполяционных формул п. 1, приведены в табл. 4. При проведении вычислений для универсальных физических констант брались следующие значения: $h = 6.62 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}$, $k = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/град}$, $L = 6.02 \cdot 10^6 \text{ кмоль}^{-1}$, $R = 8.31 \cdot 10^7 \text{ г} \cdot \text{см/сек}^2 \cdot \text{град} \cdot \text{моль}$.

Таблица 4

	Fe	Al	Cu	Ni	Pb	Ti
A	0.37347	0.22863	0.27797	0.17491	0.28332	0.09161
Г	1.68	2.13	2.04	1.91	2.78	1.18
B	6.9790	10.578	9.6801	13.603	9.1318	22.8721
ε	-0.102	-0.322	-0.234	1.034	0.580	-3.328
μ, г/моль	55.85	26.98	63.54	58.71	207.21	47.90

3. В металлах осуществление теплопроводности происходит в основном за счет диффузии свободных электронов, время установления теплового равновесия между электронным газом и решеткой порядка 10^{-11} сек . В связи с этим при рассмотрении процессов с характерными временами, большими 10^{-8} сек , можно не учитывать теплообмена между решеткой и электронным газом, считая их температуры одинаковыми, и предполагать, что распространение тепла определяется коэффициентом теплопроводности электронов κ .

Между электропроводностью σ , теплопроводностью κ и температурой T ($T > \theta_0$) имеет место соотношение (закон Видемана — Франца)

$$\kappa/\sigma T = \text{const}$$

