ПМТФ, № 2, 1974

УДК 539.3 + 536.2

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 $0.9 \leqslant \delta \leqslant 2.0$ 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

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

$$D = {}^1/_2\,(d_1^2 + d_2^2 + d_3^2), \ \ \Delta = d_1 d_2 d_3 = {}^1/_3\,(d_1^3 + d_2^3 + d_3^3)$$

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

$$E(\delta, D, s) = {}^1/_2\,(c_0^2 - {}^4/_3 b_0^2)(\delta - 1)^2 e_0(\delta) + 2b_0^2 e_1(\delta) D +$$
$$+ c_0^2\gamma_0[\gamma(\delta) g(s) - g(s_0)(1 + \gamma_1(\delta))]$$
$$g(s) = s + 0.05 / s, \quad s_0 = 293 / \theta_0$$
$$S = \frac{c_0^2\gamma_0}{\theta_0}[\ln(s / s_0) + 0.025(s^{-2} - s_0^{-2})]$$
$$\varkappa = (c_0^4\rho_0\tau_c / \theta_0)[k_0\delta^{2/3} / (1 - k_1\theta_0 / T)], \quad T = \theta_0\gamma(\delta)s$$

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/см³*	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

$$\sigma_i = -p + 2\rho_0 b_0^2 \delta e_1(\delta) d_i$$

$$p = \rho_0[(c_0^2 - {}^4/_3 b_0^2)(\delta - 1) p_0(\delta) + b_0^2 p_1(\delta)\delta^2 D + $$
$$+ c_0\gamma_v\delta^2(p_2(\delta)\, g(s) - p_2(1) g(s_0))]$$

$$p_0(\delta) = 1 + p_{01}(\delta - 1) + p_{02}(\delta - 1)^2 + p_{03}(\delta - 1)^3$$

$$p_1(\delta) = p_{10} + p_{11}(\delta - 1) + p_{12}(\delta - 1)^2$$

$$p_2(\delta) = p_{20} + p_{21}(\delta - 1) + p_{22}(\delta - 1)^2$$

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

$$c^2 = c_0^2[1 + c_1(\delta - 1) + c_2(\delta - 1)^2 + c_3(\delta - 1)^3] +$$
$$+ c_0\gamma_0 g(s)\, (\partial/\partial\delta)\, [\delta^2 p_2(\delta)]$$

$$b^2 = b_0^2[1 + b_1(\delta - 1) + b_2(\delta - 1)^2 + b_3(\delta - 1)^3]$$

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 $T = 293°$. 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 $\delta = 1$, $D = 0$, $T = 293°$, 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

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

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

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

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

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 $0.9 \leqslant \delta \leqslant 2.0$, которые затем были приближены кубическими полиномами от $(\delta - 1)$. Формулы для $E_*(\delta, D)$ $p_*(\delta)$ получаются квадратурами соотношений

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

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

$$g(s) = \frac{3R}{\mu}\left[\frac{3}{8} + sD\left(\frac{1}{s}\right)\right], \qquad D(z) = \frac{3}{z^3}\int\limits_0^z \frac{x^3dx}{e^x - 1}$$

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

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

$$D(z) = 1 - {}^3/_8\, z + {}^1/_{20}\, z^2$$

откуда

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

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 $0.9 \leqslant \delta \leqslant 2.0$ и температур $100 \leqslant T \leqslant \theta_e$, где θ_e — температура вырождения электронов ($T \approx 0.5 \cdot 10^6\, Z^{4/3}$, Ze — заряд ядра, e — заряд электрона). Отклонение интерполированных величин $\gamma(\delta)$, $b_*^2(\delta)$ и $M(\delta)$ от значений приближающих полиномов на интервале $1.0 \leqslant \delta \leqslant 2.0$ составляет $\sim 1\%$, а на интервале $0.9 \leqslant \delta \leqslant 1.0$ 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: $h = 6.62 \cdot 10^{-27}$ *эрг·сек*, $k = 1.38 \cdot 10^{-16}$ *эрг/град*, $L = 6.02 \cdot 10^6$ *кмоль*$^{-1}$, $R = 8.31 \cdot 10^7$ *г·см/сек*^{2}*·град·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 $\varkappa$.

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

$$\varkappa/\sigma T = \mathrm{const}$$

Этот закон справедлив при $\theta_e < T < \theta_e$ для чистых металлов (θ_e — температура вырождения свободных электронов). Для металлов, загрязненных примесями, он справедлив при $0 < T < \theta_e$ ([3,4]).

Электрическое сопротивление σ^{-1} линейно зависит от температуры (см. [3])

$$\sigma^{-1} = (T - T^*)/A$$

Для выяснения зависимости σ от плотности ρ можно воспользоваться пропорциональностью между σ и плотностью электронного газа и обратной пропорциональностью σ величине максимальной скорости электронов v_μ в вырожденном ферми-газе ([3])

$$\sigma \sim \frac{N}{V} v_\mu^{-1}, \quad v_\mu = \sqrt{\frac{2\mu_0}{m}}, \quad \mu_0 = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3}{\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

Здесь N — число свободных электронов в объеме V, m — масса электрона, N/V пропорционально плотности вещества $\rho = \rho_0\delta$. Отсюда $\sigma \sim \sigma^{2/3}$. Объединяя зависимости σ от температур и плотности с законом Видемана—Франца, имеем

$$\varkappa \sim \delta^{2/3}/(1 - T^*/T)$$

Представим эту зависимость в виде

$$\varkappa(\delta, T) = c_0{}^4\tau_c k_0 \delta^{2/3}/(1 - k_1\theta_0/T)$$

Размерный множитель сконструирован из скорости продольных звуковых волн c_0, дебаевской температуры θ_0 и дебаевского времени $\tau_c = 2\pi h/\theta_0$. Безразмерные константы k_0 и k_1 подобраны по значениям коэффициента теплопроводности $\varkappa_0$ для $T = 293°$, $\delta = 1$ и по температурному коэффициенту сопротивления $\alpha = (-1/\sigma)(\partial\sigma/\partial T)$, которые табулированы в [5]. Использованные значения сведены в табл. 5.

Таблица 5

	Fe	Al	Cu	Ni	Pb	Ti
α, 10^{-5} *град*$^{-1}$	651	423	433	692[1]	428	546
$\varkappa_0$, 10^5 *г·см/сек*^{3}*·град*	73.3	226	402	58.6	34.8	21.0

Авторы благодарны Ю. И. Фадеенко, В. В. Денисенко и Н. К. Кузьминой за консультации и помощь.

Поступила 2 X 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. *Жарков В. Н., Калинин В. А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М., «Наука», 1968.
2. *Годунов С. К., Роменский Е. И.* Нестационарные уравнения нелинейной теории упругости в эйлеровых координатах. ПМТФ, 1972, № 6, стр. 124—144.
3. *Майер Дж., Гепперт-Майер М.* Статистическая механика. М., Изд-во иностр. лит., 1952.
4. *Оскотский В. С., Смирнов И. А.* Дефекты в кристаллах и теплопроводность. Л., «Наука», 1972.
5. *Шульце Г.* Металлофизика. М., «Мир», 1971.