

DOI:10.11918/j.issn.0367-6234.201804141

Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} 非晶合金冲击压缩行为理论与实验研究

张云峰¹, 罗兴柏¹, 孙华刚², 施冬梅¹, 张玉令¹, 刘国庆¹

(1. 陆军工程大学, 石家庄 050000; 2. 陆军装备研究院, 石家庄 050000)

摘 要: 为研究 Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} 非晶合金的冲击压缩响应及物态方程, 利用平板冲击试验, 测试了受到速度为 350 m/s ~ 550 m/s 的铜板冲击时, 非晶合金试样的自由面粒子速度; 采用阻抗匹配法得到了材料的雨贡纽参数, 并利用理想混合物模型对材料的雨贡纽参数进行预估, 分析对比了理论计算结果与实验结果; 将求材料格林艾森物态方程转化为非线性最优化问题, 提出了基于模拟退火算法的材料格林艾森物态方程计算方法, 设计了退火参数表, 并采用解析法计算了材料的布里希-默纳罕物态方程和三项式物态方程, 对比研究了三种物态方程与实验结果. 理论和实验结果表明, 5 ~ 10 GPa 压力范围内, Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} 非晶合金的零压体积声速为 4 267 m/s, *D-u* 曲线斜率为 4.376, 曲线斜率远大于一般金属材料, 其雨贡纽极限强度为 5.60 GPa 左右; 理想混合物模型仅适用于计算高压区 Zr 基非晶合金的雨贡纽参数, 低压区理论计算结果与实验结果误差较大; 在 5 ~ 10 GPa 压力范围内, 格林艾森物态方程、三项式物态方程与实验结果吻合度较高, 而布里希-默纳罕物态方程误差较大, 不适用于计算材料状态参量.

关键词: Zr 基非晶合金; 物态方程; 平板冲击; 数值法; 模拟退火算法

中图分类号: O347 **文献标志码:** A **文章编号:** 0367-6234(2019)05-0094-06

Theoretical and experimental research of shock compressive behavior of Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} amorphous alloy

ZHANG Yunfeng¹, LUO Xingbai¹, SUN Huagang², SHI Dongmei¹, ZHANG Yuling¹, LIU Guoqing¹

(1. Army Engineering University, Shijiazhuang 050000, China;
2. Army Equipment Research Institution, Shijiazhuang 050000, China)

Abstract: The plate-impact experiment was used to measure the response of shock pressure and the equation of state (EOS) of Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} amorphous alloy. The particle velocities of free surface were tested under impact from copper plate with the velocity from 350 m/s to 550 m/s. The Hugoniot parameters of the material were calculated by using impedance matching method, and the experimental results were compared with the computational results calculated by ideal mixture model. The problem to solve the Gruneisen EOS of the material was turned into nonlinear optimization. A novel numerical method based on simulated annealing algorithm was developed to analyze the Gruneisen EOS of the material, and the annealing scheme was designed. The Birch-Murnaghan equation and the Trinomial equation of the material were proposed by analytical method, and compared with Gruneisen EOS and the experimental results. The experimental and theoretical results show that within the pressure between 5 GPa and 10 GPa, the zero-pressure volume velocity of Zr₄₁Ti₁₄Ni_{12.5}Cu₁₀Be_{22.5} amorphous alloy was 4267 m/s, the slope of *D-u* curve was 4.376, which is much larger than normal metal, and the Hugoniot limit of the material was around 5.6 GPa. The ideal mixture model is only applicable to calculate the Hugoniot parameters of Zr-based amorphous alloy in high-pressure phase, whereas considerable errors will be caused under low pressure. The Gruneisen EOS and Trinomial EOS matched the experimental results well within the pressure between 5 GPa and 10 GPa, while there were major errors between the experimental results and the Birch-Murnaghan equation.

Keywords: Zr-based amorphous alloy; equation of state (EOS); plate-impact; numerical method; simulated annealing algorithm

收稿日期: 2018-04-19

作者简介: 张云峰(1990—), 男, 博士研究生;

罗兴柏(1962—), 男, 教授, 博士生导师;

孙华刚(1979—), 男, 高级工程师, 博士生导师

通信作者: 孙华刚, shg_neu@scut.edu.cn

非晶态合金是指内部结构中原子呈长程无序排列的合金^[1]. Zr 基非晶合金具有易成型、高强度、高硬度、低杨氏模量、高弹性极限、断裂韧性高等一系列优异的物理力学性能, 因而得到广泛的研究和应用^[2-3]. 尤其在军事领域, 独特的物理力学性能使其

具有光明的应用前景^[4-6],因而,对 Zr 基非晶合金冲击压缩行为及其物态方程的研究显得尤为重要。

在非晶合金的物态方程及冲击压缩性能研究方面, Li Gong^[7] 研究了 $\text{Ni}_{77}\text{P}_{23}$ 非晶合金的压缩行为,并计算了材料的布里希-默纳罕 (Birch-Murnaghan) 物态方程. Masaru^[8] 总结了多种非晶合金体积模量与压力间的关系,研究了高压材料的结构预弛现象. J. Q. Wang^[9] 研究了 Yb 基非晶合金的压缩性能,结果表明压力对该材料的摩尔比容、体积模量、泊松比等参数的影响显著大于它种非晶合金;对 Zr 基非晶合金的研究方面, Wei 等^[10-11] 测量了多种 Zr 基非晶合金的热力学参数,并从热力学参数出发计算了材料的 Murnaghan 方程. Zhang^[12], Pan^[13] 等依据材料的热力学参数,分别计算了两种 Zr 基非晶合金基于 Debye 模型的物态方程. Martin^[14], Mashimo 等^[15] 分别研究了 $\text{Zr}_{57}\text{Nb}_5\text{Cu}_{15.4}\text{Ni}_{12.6}\text{Al}_{10}$ 、 $\text{Zr}_{55}\text{Al}_{10}\text{Ni}_5\text{Cu}_{30}$ 两种非晶合金的冲击压缩行为,并发现了 Zr 基非晶合金冲击压缩曲线的分区现象. 目前,国内外学者对非晶合金的高压响应研究成果较为丰硕,但尚无针对 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金的冲击响应及其冲击物态方程的相关工作。

本文采用平板冲击实验,研究了 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶合金 5 GPa ~ 10 GPa 压力范围内的冲击压缩行为. 求得了材料的雨贡纽 (Hugoniot) 参数及 Hugoniot 极限强度,并与理论分析结果对比,得出了理论计算结果的适用范围;提出了基于模拟退火算法计算材料格林艾森 (Gruneisen) 物态方程的方法,并与解析法计算结果、Birch-Murnaghan 物态方程、三项式物态方程结果做了对比研究。

1 试验概况

1.1 材料制备

实验对象为 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金,选用纯度高于 99.5% 的 Zr, Ti, Ni, Cu, Be 高纯金属,清除金属表面氧化膜后,按原子分数进行配置,分别在石油醚溶液,无水乙醇溶液中进行超声波清洗,以去除金属表面的油污以及在配料过程中附着的杂质. 在高纯 Ar 气 (99.99 mass%) 气氛保护下,采用真空电弧炉熔炼,每个合金锭至少翻转熔炼 4 次,保证成分的均匀性良好,最终采用铜模喷铸法得到块体 Zr 基非晶合金,并利用线切割将材料制备成 20 mm × 20 mm × 4 mm 的长方体试样. 图 1 为制得试样的 XRD 图像,可以看到 38° 左右有一较宽的弥散峰且没有结晶峰,表明材料为典型的非晶结构。

1.2 平板冲击实验

平板冲击实验在中科院力学研究所的一级轻气

炮上进行,见图 2(a). 采用阻抗匹配法测量 Zr 基非晶合金的 Hugoniot 曲线,阻抗匹配法的基本原理为用冲击绝热线已知的材料做标准,将待测样品材料的冲击压缩特性与该标准材料进行比较,获得待测材料冲击绝热线. 实验飞片材料为超导电无氧铜,其密度为 8.93 g/cm³, Hugoniot 参数 C_0 为 3.940 km/s, λ 为 1.489. Zr 基非晶合金试样镶嵌在环氧树脂内,并与铝制靶环组成靶板,试验布置见图 2(b).

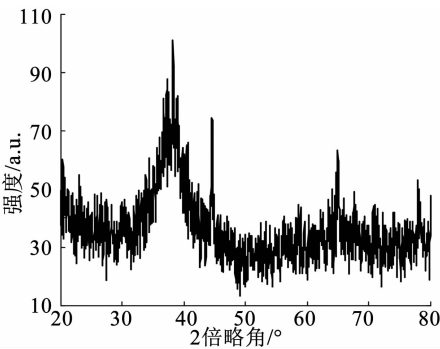
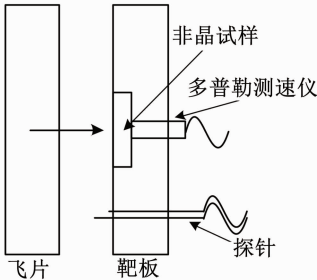


图 1 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶合金的 XRD 图像
Fig. 1 XRD pattern of $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$



(a) 105 mm 一级轻气炮



(b) 试验布置概略

图 2 实验布置概略

Fig. 2 Schematic diagram of the experimental setup

采用长短探针测量飞片的撞击速度 V , 长短探针头部距离与飞片撞击探针头部时间差的比值即为飞片速度. 利用全光纤光子多普勒测速仪 (PDV), 根据多普勒频移效应测量试样自由面速度 u_{fs} . 当被测物体向探头运动时, 从被测物体表面反射回来的信号光 f_s , 相对于激光器从探头发出的探测光 f_0 , 会有微小的多普勒频移 f_d

$$f_d = f_s - f_0 = \frac{2u_{fs}}{\lambda_0} = \frac{2f_0}{c} u_{fs}. \tag{1}$$

式中: λ_0 为探测光的中心波长, c 为光速,通过对干涉光时频分析提取多普勒频移 f_d ,代入式(1)即可求得试样自由面速度 u_{fs} .

2 实验结果与讨论

2.1 材料 D - u 曲线

在流体模型近似下,冲击波从自由面反射的卸载过程为等熵过程,当冲击波加载过程不太高时,冲击波后粒子速度 u 与自由面粒子速度 u_{fs} 的近似关系为^[14]

$$u \approx \frac{1}{2} u_{fs} \tag{2}$$

式(2)的推导过程可见文献[16]. 对于大部分固体,尤其在中压条件下,其冲击波速 D 与粒子速度 u 呈线性关系,在波前静止坐标系中, D - u 关系为^[17]

$$D = C_0 + \lambda u \tag{3}$$

式中 C_0 理论上等于固体的零压体积声速.

图3 为飞片撞击样品的 p - u 图,曲线 OC 为飞片(标准材料)的冲击绝热线, EAW 为飞片冲击绝热线过速度 W 的镜像,待测样品的波直线 OB 与 EAW 相交于 A 点,波直线公式为^[18]

$$p = \rho_0 Du \tag{4}$$

已知飞片撞击非晶合金试样时压力平衡,根据图2,由(3)(4)可得

$$D_2 = \frac{\rho_{01} [C_{01} + \lambda_1 (W - u_2)] (W - u_2)}{\rho_{02} u_2} \tag{5}$$

式中:下标 1 代表标准材料,下标 2 代表非晶合金. 由冲击波阵面质量守恒关系^[16],可得

$$\rho = \rho_0 D / (D - u) \tag{6}$$

将标准材料的 Hugoniot 参数、测试数据代入式(4)~(6)即可得到压力 p 、冲击波速 D 及材料密度 ρ ,表 1 为材料的实测及计算数据.

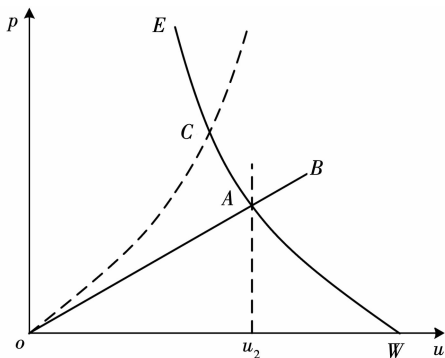


图 3 飞片撞击试样 p - u

Fig. 3 p - u diagram of flyer impacting sample

图4 为采用多普勒频移法测得的自由面速度曲线,可以看到材料明显的弹-塑性响应,曲线首先直

线上升,到达材料的 Hugoniot 弹性极限时出现小波峰,随后塑性波到达,曲线继续上升一段高度后达到稳定. Hugoniot 弹性极限(HEL)表示材料在单轴冲击载荷下的弹性响应极限,将弹性波波峰处的粒子速度代入式(4),即可求得 Hugoniot 弹性极限强度分别为 5.59 GPa、5.65 GPa、5.66 GPa、5.51 GPa、6.75 GPa,舍弃最后一个明显偏大的值求平均,取材料的 Hugoniot 弹性极限强度 σ_{HEL} 为 5.60 GPa.

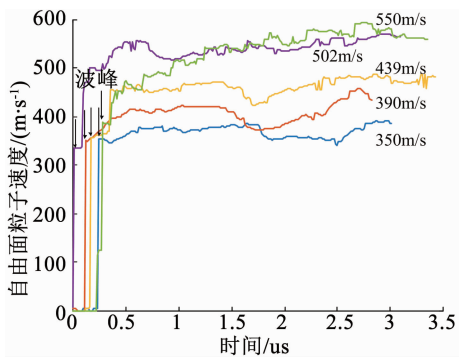


图 4 自由面速度

Fig. 4 Velocity of free surface

图5 为最小二乘法拟合的 $Zr_{41}Ti_{14}Ni_{12.5}Cu_{10}Be_{22.5}$ 非晶态合金 D - u 曲线,在 5~10 GPa 压力范围内,材料的 Hugoniot 参数 C_0 为 4.267 km/s, λ_0 为 4.376,远大于一 般固体 1.0~1.5 的斜率值, Martin^[14], Mashimo 等^[15] 观测到 $Zr_{57}Nb_5Cu_{15.4}Ni_{12.6}Al_{10}$ 、 $Zr_{55}Al_{10}Ni_5Cu_{30}$ 两种 Zr 基非晶合金也具有类似现象. 图6 为材料的 P - ρ 曲线,已知 Hugoniot 弹性极限下为材料的弹性响应阶段^[17],故可通过 σ_{HEL} 得到材料在 0~6 GPa 内的 P - ρ 响应.

表 1 实测及计算数据

Tab. 1 Experimental and computational data

序号	$W/(m \cdot s^{-1})$	$u_2/(m \cdot s^{-1})$	p/GPa	$\rho/(g \cdot cm^{-3})$	$D_2/(m \cdot s^{-1})$
1	350	190(6.00)	5.97(0.32)	6.36(0.021)	5 129.9(64.55)
2	390	210(10.59)	6.76(0.68)	6.38(0.042)	5 258.7(136.00)
3	439	239(7.38)	7.57(0.55)	6.42(0.028)	5 170.3(109.35)
4	502	270(7.18)	8.88(0.48)	6.45(0.026)	5 368.7(94.94)
5	550	290(8.61)	10.05(0.57)	6.46(0.031)	5 656.2(114.62)

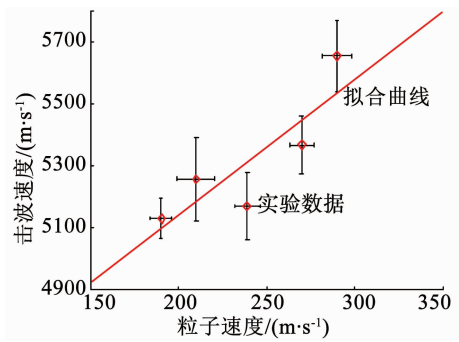


图 5 材料的 D - u 曲线

Fig. 5 D - u curves of the material

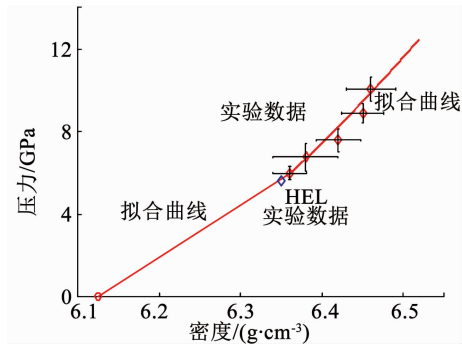


图 6 材料 $P\text{-}\rho$ 的曲线
Fig. 6 $P\text{-}\rho$ curves of the material

2.2 冲击绝热线的理论预估

假设 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金为理想混合物,由文献[18],当各组元的冲击波速度与粒子速度满足式(3)所示线性关系时,混合物的 Hugoniot 参数可由式(7)、(8)求得:

$$\frac{1}{C_0^2} = \frac{1}{V_0^2} \sum_i \frac{x_i V_{0i}^2}{C_{0i}^2}, \tag{7}$$

$$\frac{1}{\lambda_0^2} = \frac{1}{V_0^2} \sum_i \frac{x_i V_{0i}^2}{\lambda_{0i}^2}. \tag{8}$$

式中 x_i 为组元 i 的质量分数,理论计算所需参数及计算结果见表 2.

表 2 计算参数及结果				
Tab. 2 Parameters and computational results				
材料	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	$C_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	λ_0	相对分子量
Zr	6.505	3.757	1.018	40
Ti	4.528	5.220	0.767	22
Ni	8.874	4.602	1.437	28
Cu	8.930	3.940	1.489	29
Be	1.851	7.998	1.124	4
$\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$	6.125	4.147	0.925	26.78

可见,理论计算所得 Hugoniot 曲线斜率远小于实验所得结果. Martin^[14] 对 $\text{Zr}_{57}\text{Nb}_5\text{Cu}_{15.4}\text{Ni}_{12.6}\text{Al}_{10}$ 非晶合金高压物态方程的研究结果表明,材料的冲击 Hugoniot 曲线为低压区、混合区、高压区三部分的组合,而低压区部分的冲击 Hugoniot 曲线斜率远大于一般材料,而高压区 Hugoniot 曲线斜率与一般金属材料类似,在 1.0~1.5 之间. 因此,推测采用理想混合物模型的计算结果更接近非晶合金高压区 Hugoniot 参数,为验证该假设,采用相同方法计算 $\text{Zr}_{57}\text{Nb}_5\text{Cu}_{15.4}\text{Ni}_{12.6}\text{Al}_{10}$ 非晶合金 Hugoniot 参数,理论计算所需参数及计算结果见表 3(括号内为混合法理论计算结果).

由表 3 可知,采用理想混合物模型计算高压区 $\text{Zr}_{57}\text{Nb}_5\text{Cu}_{15.4}\text{Ni}_{12.6}\text{Al}_{10}$ 非晶合金 Hugoniot 参数与实

验结果相近,从而证实了假设,即 Zr 基非晶合金的高压区 Hugoniot 参数可通过理想混合物模型进行计算. 对于 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金,其 Hugoniot 曲线低压区、混合区的拐点压力大于 10 GPa,高压区 Hugoniot 参数约为 $C_0 = 4.147 \text{ km/s}$, $\lambda = 0.925$.

表 3 计算参数及结果				
Tab. 3 Parameters and computational results				
材料	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	$C_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	λ_0	相对分子量
Nb	8.586	4.438	1.207	41
Al	2.71	5.38	1.337	13
$\text{Zr}_{57}\text{Nb}_5\text{Cu}_{15.4}\text{Ni}_{12.6}\text{Al}_{10}$	5.4	3.83(3.848)	1.21(1.055)	34.144

2.3 冲击物态方程

在流体模型和谐振子模型近似下,忽略自由电子项的影响,由 Gruneisen 物态方程和 Rankin-Hugoniot 能量方程得出固体冲击物态方程计算模型^[19].

$$p = \frac{\frac{V}{\gamma} p_C - E_C}{\frac{V}{\gamma} - \frac{1}{2}(V_0 - V)}. \tag{9}$$

式中: p_C 为材料冷压, E_C 为材料冷能, γ 为 Gruneisen 系数. 为方便计算,通常利用波恩-迈耶势,冷能 E_C 和冷压 p_C 化为 Q 、 q 形式^[20]:

$$E_C = \frac{3Q}{\rho_{0K}} \left\{ \frac{1}{q} \exp[q(1 - \delta^{-1/3})] - \delta^{-1/3} - \left(\frac{1}{q} - 1 \right) \right\}. \tag{10}$$

$$p_C = Q\delta^{-2/3} \{ \exp[q(1 - \delta^{-1/3})] - \delta^{-2/3} \}. \tag{11}$$

式中: ρ_{0K} 为材料在 0 K 时的密度, $\delta = V_{0K}/V = \rho/\rho_{0K}$. Gruneisen 系数的 Dugdale-MacDonald 关系式的 Q 、 q 形式为^[16].

$$\gamma_{D-M} = \frac{1}{6} \frac{q^2 \delta^{-1/3} \cdot \exp[q(1 - \delta^{-1/3})] - 6\delta}{q \cdot \exp[q(1 - \delta^{-1/3})] - 2\delta}. \tag{12}$$

将式(10)~(12)代入式(9)即为材料物态方程的 Q 、 q 形式. 波后比容可由式(6)导出,将实验得到的 $D\text{-}u$ 形式的 Hugoniot 曲线代入式(4)(6)即可得到一组压力、比容值记为 $p_{fit} - V_{fit}$. 将 $p_{fit} - V_{fit}$ 代入式(9)~(12),通过数学迭代可得到数值法的目标函数为

$$f = \sqrt{\sum [p(Q, q) - p_{fit}]^2}. \tag{13}$$

式(13)将求材料物态方程参数的问题转化为非线性优化问题,模拟退火算法适合解决这类问题.

模拟退火算法(Simulated annealing algorithm, SA)是依据统计物理学原理,模仿固体退火过程的随机优化算法. 模拟退火算法特别适用于求解组合

优化问题,它的核心为 Metropolis 算法. Metropolis 算法产生一个马尔可夫链,它的转移概率确实收敛到一个独立平稳的 Gibbs 分布,当温度时,系统能量将收敛到全局极小点. Metropolis 算法如式(14)所示

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n, & \Delta E < 0; \\ Y_n, & \Delta E > 0, \xi < e^{(-\Delta E/T)}; \\ X_n, & \Delta E > 0, \xi \geq e^{(-\Delta E/T)}. \end{cases} \quad (14)$$

式中: X_n 为 n 时刻状态, Y_n 为随机生成的新状态, ΔE 为系统从状态 X_n 到 Y_n 的能量差, T 为当前温度, ξ 为 $(0,1)$ 间的随机数. 若 ΔE 为负,则新状态系统能量更低,该次转移被接受;若 ΔE 为正,则 Y_n 以概率 $e^{(-\Delta E/T)}$ 被接受,对于求解材料参数 Q 、 q 的问题,系统能量差即为目标函数(13)的新旧状态之差,算法的具体细节本文不再赘述. 参数设置如下,其中 $T_{\text{ini}} = 10^{32}$ 为初始温度, $T_{\text{end}} = 10^{-20}$ 为终止温度, $k = 0.995$ 为温差系数,温度依据式(15)进行迭代.

$$T_{n+1} = kT_n. \quad (15)$$

图 7 为退火过程,横坐标采用对数形式,可以看到,高温时,曲线波动范围较大,以此跳出局部最小值;低温时,曲线快速收敛,以提高计算速度. 经多次试验,算法稳定性较高.

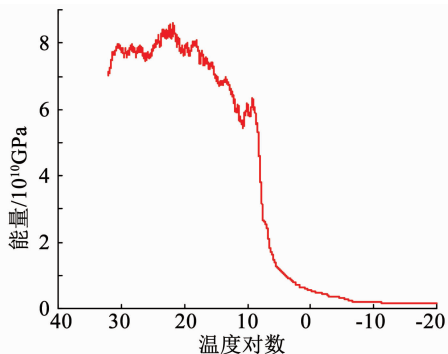


图 7 退火过程

Fig. 7 Annealing process

将所求参数 Q 、 q 代入式(9),即得 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金的 Gruneisen 冲击物态方程. 最终求得 $Q = 6.8296 \times 10^9$ GPa, $q = 2.0478$, 所得物态方程数据与实验数据均方差为 0.376 1 GPa, 而通过解析法^[20,22]求得 $Q = 7.8695 \times 10^9$ GPa, $q = 44.8467$, 代入实验数据解得负压力值,与事实不符,表明提出方法较适用于 Zr 基非晶合金 Gruneisen 物态方程的计算,而传统解析法误差较大.

2.4 多项式物态方程

实际应用过程中,也常采用 Birch-Murnaghan 物态方程^[7,14]和三项式物态方程表示材料的 p - V 关系, Birch-Murnaghan 物态方程为

$$p = \frac{3K_0}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right] \left\{ 1 + 3 \left(\frac{K'_0}{4} - 1 \right) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\}. \quad (16)$$

式中: K_0 为材料的零压体积模量. $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金的 K_0 为 114.4 GPa, K'_0 为体积模量对 p 的导数,其解析式为^[14]

$$K'_0 = 4\lambda_0 - 1. \quad (17)$$

三项式物态方程为

$$p = A_1\mu + A_2\mu^2 + A_3\mu^3. \quad (18)$$

式中: A_1 为材料零体积应变下的体积模量, A_2 、 A_3 为材料常数, $\mu = \rho/\rho_0 - 1$ 为材料的体应变,由最小二乘法得, $A_1 = 114.4$ GPa, $A_2 = 705.2$ GPa, $A_3 = 7651$ GPa.

材料三种形式的物态方程曲线见图 8, 曲线与实验数据走势契合, 在实验压力范围内, Gruneisen 物态方程、Birch-Murnaghan 物态方程、三项式物态方程均可较好地表现材料性质. 三种物态方程计算结果与实验数据的均方差分别为 0.376 1 GPa、0.363 5 GPa、0.980 8 GPa, 表明在 5 ~ 10 GPa 冲击压力范围内, Gruneisen 物态方程、三项式物态方程对材料性质的描述更为精准.

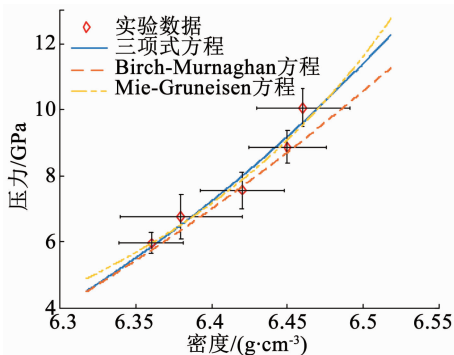


图 8 材料物态方程曲线

Fig. 8 EOS curves of the material

3 结 论

1) 采用匹配阻抗法, 利用长短探针、PDV 等手段实验测定了 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶合金的冲击 Hugoniot 曲线, 得到了材料 Hugoniot 参数及 Hugoniot 曲线, 在 5 GPa ~ 10 GPa 范围内, 曲线的斜率远大于一般固态金属及合金.

2) 采用理想混合物模型理论计算 Zr 基非晶合金的高压区 Hugoniot 参数, 计算结果适应性较好, 但该方法不适用于计算材料低压区 Hugoniot 参数. $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{10}\text{Cu}_{12.5}\text{Be}_{22.5}$ 非晶态合金 Hugoniot 曲线的低压区、混合区拐点压力大于 10 GPa.

3) 提出了基于模拟退火算法计算材料 Gruneisen 物态方程的方法, 并得到了 $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Ni}_{12.5}\text{Cu}_{10}\text{Be}_{22.5}$ 非晶合金的 Gruneisen 物态方程, 该方法较

传统解析法更适用于 Zr 基非晶合金 Gruneisen 物态方程的计算;与三项式物态方程、Birch-Murnaghan 物态方程对比结果表明,在 5 ~ 10 GPa 冲击压力范围内,Gruneisen 物态方程、三项式物态方程对材料性质的描述更为精准.

参考文献

[1] 惠希东, 陈国良. 块体非晶合金[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007: 1
HUI Xidong, CHEN Guoliang. Bulk amorphous alloy[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 1

[2] WANG G Y, LIAW P K, MORRISON M L. Progress in studying the fatigue behavior of Zr-based bulk-metallic glasses and their composites[J]. Intermetallics, 2009(17): 579. DOI:10.1016/j.intermet.2009.01.017

[3] DAI L H, YAN M, LIU L F, et al. Adiabatic shear banding instability in bulk metallic glasses [J]. Applied Physics Letters, 2005(87): 14916. DOI: 10.1063/1.2067691

[4] CONNER R D, DANDLIKER R B, SCRUGGS V, et al. Dynamic deformation behavior of tungsten fiber/metallic glass matrix composites[J]. International Journal of Impact Engineering, 2000(24): 435. DOI:10.1016/S0734-743(99)00176-1

[5] RONG G, HUANG D W, YANG M C. Penetrating behaviors of Zr-based metallic glass composite rods reinforced by tungsten fibers[J]. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2012(58): 21. DOI: 10.1016/j.tafmec.2012.02.003

[6] KIM G S, SON C Y, LEE S B, et al. Ballistic impact properties of Zr-based amorphous alloy composites reinforced with woven continuous fibers[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2012(43): 870. DOI:10.1007/s11661-011-0915-5

[7] LI G, GAO Y P, SUN Y N, et al. Compression behavior and equation of state of Ni77P23 amorphous alloy[J]. Chinese Science Bulletin, 2007, 52(4): 440. DOI:10.1007/s11434-007-0067-6

[8] MASARU A. Elastic constants, equation of state and mechanical relaxations of some metallic glasses at high pressure[J]. Materials Science Forum, 2012, 706: 1305. DOI:10.4028/www.scientific.net/MSF.706-709.1305

[9] WANG J Q, BAI H Y. High-pressure behaviors of Yb-based bulk metallic glass [J]. Scripta Materialia, 2009, 61: 453. DOI:10.1016/j.scriptamat.2009.04.044

[10] WANG W H, LI F Y, PAN M X, et al. Elastic property and its response to pressure in a typical bulk metallic glass [J]. Acta Materialia, 2004, 52: 715. DOI:10.1016/j.actamat.2003.10.008

[11] WANG W H, WEN P, WANG L M, et al. Equation of state of bulk metallic glasses studied by an ultrasonic method[J]. Applied Physics Letters, 2001, 79(24): 3947. DOI:10.1063/1.1426272

[12] ZHANG Y, PAN M X, WANG W H. Mie potential and equation of state of $\text{Zr}_{48}\text{Nb}_{8}\text{Cu}_{14}\text{Ni}_{12}\text{Be}_{18}$ bulk metallic glass [J]. Chinese

Physics Letters, 2001, 18(6): 805. DOI:10.1088/0256-307X/18/6/331

[13] PAN M X, WANG W H, ZHAO D Q, et al. The equation of state and potential function of $\text{Zr}_{41}\text{Ti}_{14}\text{Cu}_{12.5}\text{Ni}_{10}\text{Be}_{22.5}$ bulk metallic glass[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14: 5665. DOI:10.1088.0953-8984/14/23/302

[14] MARTIN M, SEKINE T, KOBAYASHI T, et al. High-pressure equation of the state of a zirconium-based bulk metallic glass[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2007, 38(11): 2689. DOI:10.1007/s11661-007-9263-x

[15] MASHIMO T, TOGO H, Zhang Y, et al. Hugoniot-compression curve of Zr-based bulk metallic glass[J]. Applied Physics Letters, 2006, 89: 241094-1. DOI:10.1063/1.2403931

[16] 经福谦. 实验物态方程导引[M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 1999: 209
JING Fuqian. Experimental state equation guidance[M]. Second Edition. Beijing: Science Press, 1999: 209

[17] ROSENBERG Z, DEKEL E. 终点弹道学[M]. 钟方平, 译. 北京: 国防工业出版社, 2012: 9
ROSENBERG Z, DEKEL E. Terminal ballistics [M]. ZHONG Fangping translate Beijing: National Defence Industry Press, 2012: 9

[18] 谭华. 实验冲击波物理导引[M]. 北京: 国防工业出版社, 2007: 15
TAN Hua. Experimental shockwave physics guidance [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2007: 15

[19] 史安顺, 张先锋, 乔良, 等. 多功能含能结构材料冲击压缩特性的理论计算[J]. 爆炸与冲击, 2013, 33(2): 148. DOI:10.11883/1001-1455(2013)02-148-08
SHI Anshun, ZHANG Xianfeng, QIAO Liang, et al. Theoretical calculation on shock compression characteristics of multifunctional energetic structural materials [J]. Explosion and Shock Waves, 2013, 33(2): 148. DOI:10.11883/1001-1455(2013)02-148-08

[20] 汤文辉, 张若棋. 物态方程理论及计算概论[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008: 212
TANG Wenhui, ZHANG Ruoqi. Introduction to theory and computation of equations of state[M]. Beijing: Higher Education Press, 2008: 212

[21] HAYKIN S. 神经网络与机器学习[M]. 申富饶, 译. 北京: 机械工业出版社, 2011: 374
HAYKIN S. Neural networks and learning machines[M]. Shen Furao, translate. Beijing: China Machine Press, 2011: 374

[22] 胡金彪, 经福谦. 用冲击压缩数据计算物质结合能的一个简便解析方法[J]. 高压物理学报, 1990, 4(3): 175
HU Jinbiao, JING Fuqian. A simplified analytical method for calculations of equation-of-state of materials from shock compression data[J]. Chinese Journal of High Pressure Physic, 1990, 4(3): 175

(编辑 苗秀芝)