文章编号：1000-5773(2006)02-0153-04

含电子影响的冲击温度计算*

冉宪文[1,2]，汤文辉[1]，谭 华[2]，戴诚达[2]

(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：在原有的冲击温度计算方法的基础上提出了一种新的计算方法，它既考虑了电子对冲击温度的影响，也有效的回避了物质零温物态方程计算的困难。通过对金属铝和铜的计算，结果与实验数据吻合得很好，所给出的铝和铜的冲击熔化点分别为(125.5 GPa，4 705 K)和(231 GPa，5 369 K)，与目前铝和铜的冲击熔化点的实验数据吻合得非常好。

关键词：冲击温度；冲击熔化点；物态方程；高温高压
中图分类号：O521.2 **文献标识码**：A

1 引 言

在冲击压缩下物质温度的计算是高温高压物态方程研究的难点问题之一，冲击波温度的确定对爆炸力学、凝聚态物理和地球物理学等学科相关方面的研究具有十分重要的影响[1-2]。目前获得物质在冲击压缩下的温度主要有两种方法：实验测量和理论计算。冲击温度的辐射法测量是以冲击压缩下物质的光谱辐射满足灰体辐射的假设为前提条件的，并且它的发射率与波长无关。事实上，即使冲击温度的实验测量也要事先计算物质的冲击温度，再根据理论计算的结果来进行实验设计。有关冲击温度测量的详细过程可以见谭华发表的一系列文章[3-6]。有关冲击温度的理论计算，汤文辉[7-8]总结了三种近似计算方法，即：(1) 利用 Grüneisen 方程和冲击绝热线计算冲击温度；(2) 利用三项式物态方程计算冲击温度；(3) 利用等熵方程为参考线的 Grüneisen 物态方程计算冲击温度。仔细研究可以发现以上三种计算方法考虑得都不全面，(1)和(3)两种方法没有考虑电子对冲击温度的影响；方法(2)虽然考虑了电子的影响，也可以计算物质冲击熔化区和液相区的冲击温度，但是它没有考虑电子和声子的相互作用，而且其中的冷能项对物质的冲击温度计算有较大的影响，这是因为目前所有的零温物态方程都不能够准确地描述物质在较大压力范围内的物态变化，这同时也是经典分子动力学难以准确计算物质物态变化的原因。采用从头计算方法能够比较有效地计算物质的零温状态方程，但由于受硬件条件和理论的限制，它所能够达到的压力范围也十分有限，而且应用于冲击温度的估算也十分不方便。

鉴于以上原因，本文在方法(1)的基础上提出了一种计算冲击温度的方法，该方法既考虑了电子的影响，同时又有效地回避了零温物态方程的计算困难。但目前还不能够计算物质在冲击熔化区和液相区的温度。

2 理论和计算方法

描述晶体中点阵和电子的 Grüneisen 方程分别为

$$p_{\mathrm{n}}=\frac{\gamma_{\mathrm{n}}}{v}e_{\mathrm{n}}=\frac{\gamma_{\mathrm{n}}}{v}c_{V\mathrm{n}}T,\ p_{\mathrm{e}}=\frac{\gamma_{\mathrm{e}}}{v}e_{\mathrm{e}}=\frac{\gamma_{\mathrm{e}}}{v}c_{V\mathrm{e}}T \tag{1}$$

* **收稿日期**：2005-04-18；**修回日期**：2005-05-23
基金项目：国家自然科学基金(10276039)
作者简介：冉宪文(1978—)，男，博士研究生，主要从事高温高压物态方程和相变机制研究. E-mail：ranxianwen@163.com

式中：p、v、e、γ、c_V 和 T 分别表示压强、比容、比内能、Grüneisen 系数、等容比热和温度，下标 n 和 e 分别表示点阵和电子。将两式相加就可以得到同时描述点阵和电子的 Grüneisen 物态方程

$$p_{ne}=\frac{\gamma_{eff}}{v}e_{ne} \tag{2}$$

其中

$$p_{ne}=p_n+p_e,e_{ne}=e_n+e_e,\gamma_{eff}=(\gamma_n c_{Vn}+\gamma_e c_{Ve})/c_{Vne},c_{Vne}=c_{Vn}+c_{Ve}$$

γ_{eff} 与 Anderson 提出的等效 Grüneisen 系数[9]具有相同的形式。

将热力学关系

$$de+pdv=c_V dT+T\cdot c_V(\gamma/v)dv$$

同时应用于点阵和电子有下面的热力学表达式

$$de_{ne}+p_{ne}dv=c_{Vne}dT+T\cdot c_{Vne}(\gamma_{eff}/v)dv$$

Hugoniot 方程的微分表达式为

$$de_H+p_H dv=\frac{1}{2}\left[p_H+(v_0-v)\frac{dp_H}{dv}\right]dv$$

冲击能量中同时包含点阵和电子的能量，将热力学表达式用于 Hugoniot 线，则左边相等，这样就可以得到下面的微分方程

$$\frac{dT}{dv}+T(\gamma_{eff}/v)=\frac{1}{2c_{Vne}}\left[p_H+(v_0-v)\frac{dp_H}{dv}\right] \tag{3}$$

利用计算机迭代数值求解上式，就可以计算得到物质的冲击温度，计算过程中采用了如下关系式

$$\frac{\gamma_0}{v_0}=\frac{\gamma_n}{v},c_{Ve}=\beta_{0K}\left(\frac{v}{v_{0K}}\right)^{\gamma_e}T$$

式中：β_{0K} 为零温零压下的电子热容系数，v_0 为常态下的物质比容，v_{0K} 为零温零压下的物质比容，γ_0 为物质常态下的 Grüneisen 系数，γ_e 为电子 Grüneisen 系数，对于金属可以取为 0.5[12]。

3 计算结果

图 1 是采用以上方法计算得到的铝和铜的冲击温度-冲击压力曲线，表 1 是计算过程中所使用的物质的物理参数数据。

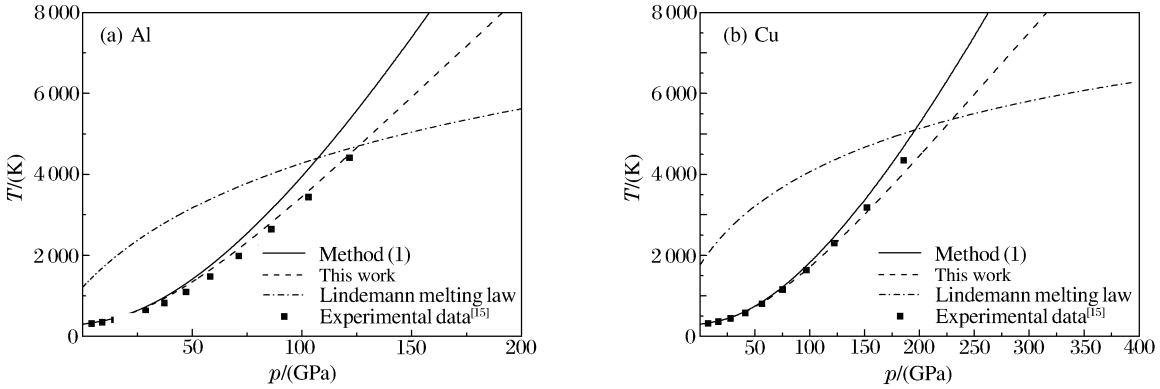


图 1 冲击温度-冲击压力曲线

Fig. 1 The curves of shock temperature and shock pressure

图 1 中物质的熔化线是采用 Lindemann 熔化定律计算的，它的表达式如下

$$T_m(v)=T_{mn}\left(\frac{v}{v_0}\right)^{2/3}\exp\left[2\gamma_0\left(1-\frac{v}{v_0}\right)\right] \tag{4}$$

式中：$T_{mn}=1.3T_{m0}$[14]，T_{m0} 是物质常压下的熔化温度。

由图 1(a)看出，本方法计算得到的冲击温度与实验数据[15]吻合得很好，和方法(1)相比，随着压力

的不断升高,电子对冲击温度的影响越来越大。值得提出的是,利用(3)式和(4)式计算得到的铝和铜的冲击熔化点分别为(125.5 GPa,4 702 K)和(231 GPa,5 369 K)。对于铝,McQueen 等[16]的声速数据给出的冲击熔化压力为 125 GPa,Ross 等[17-18]的理论计算给出的冲击熔化点为(125 GPa,4 745 K),与本工作得到的结果相吻合。对于铜,Hayes 等[19]给出的冲击熔化点的压力是(232±0.5) GPa,与本工作的结果也是十分吻合的。

表 1　计算所用的物理参数数据

Table 1　The data of physical quantities for calculation

Material	ρ_0[10] /(g/cm^3)	c_0[10] /(km/s)	s[10]	γ_0[11]	c_V[11] /[J/(g·K)]	β_{0K}[12] /[μJ/(g·K^2)]	$\frac{v_0}{v_{0K}}$[13]	T_{m0}[11] /(K)
Al	2.698	5.328	1.338	2.18	0.850	41.530	1.013	933.2
Cu	8.932	3.91	1.51	1.97	0.372	17.447	1.01	1 356

4　结 束 语

与传统的冲击温度的计算方法相比,本文中给出的冲击温度的计算方法是考虑的比较全面的,实际上,它也是将物质的能量和压力同时分成了点阵和电子的贡献的两个部分,同时利用热力学方法有效地回避了计算物质零温物态方程的难点,在数值迭代计算过程中,利用温度和电子比热之间的相互影响,使温度最终收敛,这个迭代的过程可以认为是在计算中变相地考虑了电子和声子的相互作用。图 1 显示计算结果与铝和铜在固相区的冲击温度实验数据相吻合,这也说明本工作的方法是比较有效的。

本文中所提出的冲击温度计算方法主要是针对热电子对冲击温度影响较大的材料,即金属材料。对于非金属,本工作的方法与方法(1)是等价的;对于结构相变较多的金属,如铁,计算结果的好坏与选择的计算参考点的参数密切相关,也就是说,若计算铁的 α 相的冲击温度,计算所用的参数就要选择 α 相区的。

理论上,尽管也可以采用三项式物态方程的方法计算物质在冲击熔化区和液相区的冲击温度,但遗憾的是,无法避免物质零温物态方程的计算,目前还没有找到一种比较有效的在冲击熔化区和液相区也能够回避物质零温物态方程计算的方法,这需要在接下来的工作中进行深入的研究。

另外,方法(3)也可以采用本工作的办法来将电子的影响加入到冲击温度的计算中,但是意义不是很大,因此它的计算结果本文中没有给出。

References:

[1] Williams Q, Jeanloz R, Bass J D, et al. The Melting Curve of Iron to 250 Gigapascals: A Constraint on the Temperature at Earth's Center [J]. Science, 1987, 236: 181-182.

[2] Brown J M, Mcqueen R G. Phase Transitions, Grüneisen Parameter, and Elasticity for Shocked Iron between 77 GPa and 400 GPa [J]. J Geophys Res, 1986, B91(7): 7485-7494.

[3] Tan H. Shock Temperature Measurements for Metals(Ⅰ)—Calibration of Pyrometers and Data Reduction for the Temperature at the Interface [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1994, 8(4): 254-263. (in Chinese)
谭　华. 金属的冲击温度测量(Ⅰ)——高温计的标定和界面温度的确定 [J]. 高压物理学报, 1994, 8(4): 254-263.

[4] Tan H. Shock Temperature Measurements for Metals(Ⅱ)—Release Approximation at the Interface [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1996, 10(3): 161-169. (in Chinese)
谭　华. 金属的冲击温度测量(Ⅱ)——界面卸载近似 [J]. 高压物理学报, 1996, 10(3): 161-169.

[5] Tan H. Shock Temperature Measurements for Metals(Ⅲ)—Influences of a Gap Interface between the Driven Plate and the Metal Film Sample on the Shock Temperature Measurements by Using Radiometry [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1999, 13(3): 161-168. (in Chinese)
谭　华. 金属的冲击温度测量(Ⅲ)——"基板/样品"界面间隙对辐射法测量冲击波温度的影响 [J]. 高压物理学报, 1999, 13(3): 161-168.

[6] Tan H, Dai C D. Shock Temperature Measurements for Metals(Ⅳ)—"Three Layers Model" and Its Applications [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(2): 81-91. (in Chinese)

谭 华,戴诚达. 金属的冲击温度测量(Ⅳ)——"三层介质模型"及其应用 [J]. 高压物理学报,2000,14(2):81-91.

[7] Tang W H. Theoretical and Experimental Studies on the Measurements of Shock Temperature for Metals [D]. Changsha: Graduate School of National University of Defense Technology, 1995. (in Chinese)
汤文辉. 金属冲击温度测量的理论和实验研究 [D]. 长沙:国防科技大学研究生院,1995.

[8] Tang W H, Zhang R Q, Hu J B, et al. Approximation Calculation Methods of Shock Temperature [J]. Advances in Mechanics, 1998, 27(4): 479-487. (in Chinese)
汤文辉,张若棋,胡金彪,等. 冲击温度的近似计算方法 [J]. 力学进展,1998,27(4):479-487.

[9] Anderson O L. The Power Balance at the Core-Mantle Boundary [J]. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 2002, 131: 1-17.

[10] Marsh S P. LASL Shock Hugoniot Data [Z]. Los Angles, London & Berkely: University of California Press, 1980.

[11] Gschneidner K A Jr. Physical Properties and Interrelationships of Metallic and Semimetallic Elements [A]. //Seitz F, Turnbull D. Solid State Physics, Vol 16 [C]. New York & London: Academic Press, 1965: 275-426.

[12] Xu X S, Zhang W X. Theoretical Introduction to Equation of State [M]. Beijing: Science Press, 1986. (in Chinese)
徐锡申,张万箱. 实用物态方程理论导引 [M]. 北京:科学出版社,1986.

[13] Tang W H. Evaluation of Solid Densities under Zero Temperature and Zero Pressure [J]. Journal of National University of Defense Technology, 1996, 18(1): 135-140. (in Chinese)
汤文辉. 固体零温零压密度的估算 [J]. 国防科技大学学报,1996,18(1):135-140.

[14] Royce E B. GRAY, a Three-Phase Equation of State for Metals [R]. Lawrence Livermore Laboratory Report, UCRL-51121, 1971.

[15] Trunin R F. The Properties of Condensed Matter under High Pressure and High Temperature [M]. Translated by Han J W. Mianyang: Institute of Fluid Physics, CAEP, 1996: 40-52. (in Chinese)
特鲁宁 R F. 高温高压下凝聚物质的性质 [M]. 韩钧万,译. 绵阳:中国工程物理研究院流体物理研究所,1996:40-52.

[16] Mcqueen R G, Fritz J N, Morris C E. The Velocity of Sound behind Strong Shock Waves in 2024 Al [A]. //Asay J R, Graham R A, Straub G K. Shock Waves in Condensed Matter-1983 [C]. Amsterdam: North-Holland, 1984: 95-98.

[17] Ross M. A Review of Some Recent Theoretical Calculation of Phase Transitions and Comparisons with Experimental Results [A]. //Asay J R, Graham R A, Straub G K. Shock Waves in Condensed Matter-1983 [C]. Amsterdam: North-Holland, 1984: 19.

[18] Moriarty J A, Young D A, Ross M. Theoretical Study of the Aluminum Melting Curve to Very High Pressure [J]. Phys Rev B, 1984, 30(2): 578-588.

[19] Hayes D, Hixson R S, Mcqueen R G. High Pressure Elastic Properties, Solid-Liquid Phase Boundary and Liquid Equation of State from Release Wave Measurements in Shock-Loaded Copper [A]. //Furnish M D, Chhabidas L C, Hixson R S. Shock Compression of Condensed Matter-1999 [C]. New York: AIP, 1996: 483-488.

Calculation of Shock Temperature by Considering Electronic Contribution

RAN Xian-Wen[1,2], TANG Wen-Hui[1], TAN Hua[2], DAI Cheng-Da[2]

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

Abstract: Basing on the former shock temperature calculation methods, a new method was proposed, which considered the electronic contribution and successfully avoided the difficulties of calculating 0 K EOS of materials. By applying it to aluminum and copper, the results were well consistent with experimental data. And the calculated onset of melting on the Hugoniot curves of aluminum and copper were (125.5 GPa, 4 705 K) and (231 GPa, 5 369 K), respectively, in good agreement with the presented experimental data of aluminum and copper.

Key words: shock temperature; shock induced melting point; equation of state; high pressure and high temperature