文章编号：1000-5773(2006)04-0386-05

200 GPa 压力范围内铝和铜的等熵压缩线计算*

莫建军，孙承纬

（中国工程物理研究院流体物理研究所，四川绵阳 621900）

摘要：将冲击 Hugoniot 线作为 Grüneisen 物态方程的参考线，以冲击的初始状态为参考状态，推导得到线性和二次曲线表示的冲击绝热线所对应的等熵压缩线方程，计算了 200 GPa 压力范围内铝和铜两种材料的等熵压缩线，并且计算了以 Hugoniot 关系为基础的 Appy 经验物态方程导出的等熵压缩线。计算结果表明，以 Appy 经验物态方程导出的等熵压缩线与以线性冲击绝热线导出的等熵压缩线接近，在 200 GPa 压力范围内两者相差不到 1.5%。将计算得到的铝的等熵压缩线与美国 Sandia 实验室 ICE 实验 Z864 数据进行了比较，由线性 Hugoniot 得到的等熵压缩线与实验数据相差不到 1%，由 Appy 经验物态方程得到的等熵线与实验数据几乎重合，说明在 200 GPa 压力范围内，以 Appy 物态方程和以线性 Hugoniot 为参考来计算的等熵压缩线有较高的精度。

关键词：等熵压缩线；Hugoniot 线；物态方程

中图分类号：O347.1；O242.1 **文献标识码**：A

1 引 言

一直以来，冲击压缩是人们研究材料物态方程的主要实验手段。但是，在冲击加载中，由于材料在获得高压的同时也将伴随着产生高温，并且材料在冲击压缩过程中可能发生相变，冲击 Hugoniot 与冲击熔化线相交导致一定的不确定性，这就要求探讨确定材料偏离 Hugoniot 状态的更合适方法。等熵过程是一种可逆的过程，磁驱动实验是等熵程度很高的准等熵压缩过程，也不会产生明显的熵增和温升，避免了在压缩过程中材料大幅度升温甚至熔化、汽化等现象的产生，给物态方程测量带来不确定性，可以给出相当准确的等熵压缩线。在一定的压力、温度范围内，依据等熵压缩数据可给出关于能量物态方程的有用信息。可以深入研究无冲击压缩过程中材料动态加载的物态方程、本构方程等特性。等熵压缩线可以作为 Grüneisen 物态方程方程或者其他物态方程的参考线，并且能提供等熵状态下材料动力可压缩性质的重要信息。因而，对等熵压缩的研究具有重要的科学意义。

等熵压缩实验研究在国内外开展的比较多。1983 年，Barker[1] 首先将多层组合飞片加载方法用于准等熵压缩的研究，实际上是多次冲击加载的组合，在钽材料中得到最高压力 72 GPa。20 世纪 90 年代美国 Sandia 实验室进行的梯度密度材料“Pillow”技术，利用部分等熵压缩过程降低了单纯冲击压缩中很大的能量损失，得到了速度为十几千米每秒的次级飞片。但是这些实验工作不能得到有意义的样品材料等熵压缩线，也不是以此为目标。近几年发展起来的一种新型实验技术——磁驱动等熵压缩(Isentropic Compression Experiments，ICE)，以冲击大电流产生的平滑上升磁压(可高达几百吉帕至若干太帕)加载多个材料样品，利用激光干涉测速技术(多点 VISAR 装置)测量各个样品有差别的自由面

* **收稿日期**：2006-01-04；**修回日期**：2006-02-20

基金项目：国家自然科学基金项目(10472108)；中国工程物理研究院重大基金项目(2004z0101)

作者简介：莫建军(1981—)，男，硕士研究生，主要从事工程力学专业相关研究. E-mail：mojj132@126.com

速度历程,经过非线性波的 Lagrange 分析或反积分[2]数据处理,可得到这种材料在一定压力范围内的压力-比容等熵线段的数据,而不是通常冲击压缩实验得出的单个压力点数据。这种实验的目的是测量材料的等熵压缩线,可作为 Grüneisen 方程或其他理论物态方程的重要参考线,改进对偏离 Hugoniot 状态(off-Hugoniot)的认识。这种等熵加载技术用于驱动高速飞片,除了地下核试验之外,这是目前在实验室中高速驱动所达到的最高水平,近来磁驱动厘米尺度完整铝飞片的速度已达到 33 km/s,已经成功应用于超高压物态方程的实验研究[3];2004 年,Hayes 做的 Z757 和 Z864 号实验,使铝的等熵压缩实验压力达到 185 GPa[4]。在理论研究方面,2002 年,Lemke 等对铝材料利用 Hugoniot 数据和 Grüneisen 方程假定进行了等熵线的理论计算,得到了 p-u 平面下的等熵压缩线[5]。另外,对于较大压力范围内的等熵压缩线,可以通过有关的物态方程数据库来计算。

本工作计算了铝和铜两种金属的等熵压缩曲线。首先以冲击 Hugoniot 线为参考线,利用 Grüneisen 关系式,分别得到冲击波速度与粒子速度为线性关系和二次曲线两种条件下的等熵压缩曲线;然后根据经验物态方程 Appy 公式,得到由其导出的等熵压缩线,并将其与线性条件下的等熵压缩线以及美国 Sandia 实验室 Z 机器上做的 Z864 实验数据进行比较。

2　等熵压缩线

2.1　由 Grüneisen 物态方程和冲击绝热线得到等熵压缩线方程

在对等熵线的研究中,绝大多数是研究等熵卸载线,等熵卸载线与等熵压缩线的区别在于等熵卸载线是从冲击末态出发来得到等熵线,而等熵压缩线则是从冲击初态出发来得到等熵线。本研究正是从材料初始状态(p_0,v_0)出发来研究材料的等熵压缩线。众所周知,以 Hugoniot 线为 Grüneisen 物态方程的参考线,等熵线可表示为

$$p_s(v)=p_{\mathrm{H}}(v)+\frac{\Gamma(v)}{v}[e_s(v)-e_{\mathrm{H}}(v)] \tag{1}$$

式中:p、v、e 分别是压力、比容和比内能,$\Gamma(v)$为 Grüneisen 系数,下标 s、H 分别表示等熵压缩线和冲击绝热线(即 Hugoniot 线)。根据热力学第一、第二定律有 $\mathrm{d}e=T\mathrm{d}s-p\mathrm{d}v$,沿等熵线 $p_s(v)$的比内能函数为

$$e_s(v)=e_0-\int p_s(v)\mathrm{d}v \tag{2}$$

而沿 Hugoniot 线的比内能 $e_{\mathrm{H}}(v)$由 Hugoniot 关系给出

$$e_{\mathrm{H}}(v)=e_0(v)+\frac{1}{2}(p_{\mathrm{H}}+p_0)(v_0-v) \tag{3}$$

将(2)式和(3)式代入到(1)式中,并假定 Grüneisen 系数满足近似关系 $\Gamma(v)/v=\Gamma_0/v_0$,可以得到等熵压缩线为

$$p_s=\mathrm{e}^{\Gamma_0\eta}\left[p_0-v_0\int_0^{\eta}F(z)\mathrm{e}^{-\Gamma_0 z}\mathrm{d}z\right] \tag{4}$$

式中

$$F(\eta)=\left[1-\frac{\Gamma_0}{2v_0}(v_0-v)\right]\frac{\mathrm{d}p_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}v}+\frac{\Gamma_0}{2v_0}(p_{\mathrm{H}}+p_0),\quad \eta=1-v/v_0$$

冲击 Hugoniot 关系常用冲击波速度 u_{s} 与波后介质粒子速度 u_{p} 的关系式来表达。在低压范围内,用 u_{s}、u_{p} 的线性关系近似表达已有较高的精度,然而在高压范围需要用更高阶多项式来表示。此处主要考虑冲击 Hugoniot 的 u_{s}、u_{p} 关系为线性和二次曲线两种情况下的等熵压缩线表达式,下文中所提到的线性、二次曲线关系均指 u_{s}、u_{p} 之间的关系。

2.1.1　线性情形

冲击波速度 u_{s} 和波后介质粒子速度 u_{p} 为线性关系(即 $u_{\mathrm{s}}=C_0+\lambda u_{\mathrm{p}}$),由冲击波跳跃 RH 关系式,可以得到($p$,$v$)平面上 Hugoniot 线的表达式为

$$p_{\mathrm{H}_1}(v)=p_0+\frac{\rho_0 C_0^2\eta}{(1-\lambda\eta)^2} \tag{5}$$

将(5)式代入到(4)式中,得到线性关系情况下的等熵压缩线为

$$p_{s_1}(v)=p_0+\rho_0 C_0^2 \mathrm{e}^{\Gamma_0\eta}\int_0^{\eta}\frac{1-(\Gamma_0-\lambda)z}{(1-\lambda z)^3}\mathrm{e}^{-\Gamma_0 z}\mathrm{d}z \tag{6}$$

2.1.2 二次曲线情形

冲击波速度 u_s 和波后介质粒子速度 u_p 为二次曲线关系(即 $u_s=C_0+\lambda u_p+\alpha u_p^2$),同样,结合 RH 关系得到($p$,$v$)平面上的冲击绝热线为

$$\begin{cases}u_p=\dfrac{1-\lambda\eta}{2\alpha\eta}\left[1-\sqrt{1-\dfrac{4C_0\alpha\eta^2}{(1-\lambda\eta)^2}}\right]\\ p_{H_2}=p_0+\rho_0 u_p(C_0+\lambda u_p+\alpha u_p^2)\end{cases} \tag{7}$$

因为 α 是一个量级为 10^{-3} 或者更小的数,所以 $4C_0\alpha\eta^2/(1-\lambda\eta)^2$ 是一小量,将(7)式中 $\sqrt{1-4C_0\alpha\eta^2/(1-\lambda\eta)^2}$ 进行级数展开,并将方程作最后保留前三项的近似处理,可以得到(p,v)平面上 Hugoniot 线的表达式为

$$p_{H_2}=p_0+\frac{\rho_0 C_0^2\eta}{(1-\lambda\eta)^2}\left[1+\frac{2C_0\alpha\eta^2}{(1-\lambda\eta)^2}\right] \tag{8}$$

将(8)式代入到(4)式中,得到 Hugoniot 为二次曲线情况下的等熵压缩线为

$$p_{s_2}(v)=p_0+\rho_0 C_0^2 \mathrm{e}^{\Gamma_0\eta}\int_0^{\eta}\frac{1-(\Gamma_0-\lambda)z}{(1-\lambda z)^3}\mathrm{e}^{-\Gamma_0 z}\mathrm{d}z+2\rho_0 C_0^3\alpha \mathrm{e}^{\Gamma_0\eta}\int_0^{\eta}\frac{3-(2\Gamma_0-\lambda)z}{(1-\lambda z)^5}z^2\mathrm{e}^{-\Gamma_0 z}\mathrm{d}z \tag{9}$$

比较(6)式和(9)式,可以发现冲击波速度与粒子速度成二次曲线得出的等熵压缩线前面两项和线性关系得出的等熵压缩线一致,只是多了与二次项系数有关的调节项。对于大多数物质来说,二次项系数通常为负的,所以在(p,v)平面上,由二次曲线得到的等熵压缩线一般位于由线性关系得到的等熵压缩线的下方。

2.2 由 Appy 经验物态方程直接得到等熵压缩线

压缩态的 Appy 物态方程可表示为[6]

$$p=p_{H_1}\left(1-\frac{1}{2}\beta_0\mu\right)+\beta_0\rho_0 e \tag{10}$$

式中:p_{H_1} 由(5)式给出,$\mu=\eta/(1-\eta)$,$\beta_0=(g_0+g_1\mu)/(1+g_2\mu+g_3\mu^2)$,$g_0=2\lambda-1$,$g_1=3g_0^2/4-g_0/3-0.638\,888\,9$,$g_2=g_0$,$g_3=g_0^2-\lambda^2$。

对于等熵压缩线上的比内能和压力,也应该满足(10)式,即有

$$p_s=p_{H_1}\left(1-\frac{1}{2}\beta_0\mu\right)+\beta_0\rho_0 e_s \tag{11}$$

考虑到等熵线上内能和压力关系((2)式),并将(2)式代入(11)式,得到一个关于 $e_s(v)$ 的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}e_s(v)}{\mathrm{d}v}+\beta_0\rho_0 e_s(v)+p_{H_1}\left(1-\frac{1}{2}\beta_0\mu\right)=0 \tag{12}$$

通过数值求解微分方程(12)式,再将得到的值代入到(11)式就可以作出(p,v)平面上的等熵压缩线。这个计算等熵线的方法,对于其他可表示为 $p=f(e,v)$ 形式的物态方程也是适用的。

3 计算结果及讨论

金属铝和铜等熵压缩线的计算过程中,线性关系 Hugoniot 参数[7]列于表 1;二次曲线冲击 Hugoniot 实验数据取自文献[8],其参数列于表 2; Appy 物态方程参数[6]列于表 3。

图 1 为 3 种情况下计算得到的铝的等熵压缩线与美国 Sandia 实验室 Z 机器上做的 Z864 号实验得到的 6061-T6 铝的等熵线的比较[4],其中 6061-T6 铝的 Hugoniot 参数[9]见表 1。

由图 1 可以看到用线性关系所计算得到的铝的等熵压缩线与 Z864 实验所得到的等熵线十分接近,两者相差不足 1%;由 Appy 物态方程计算的等熵线几乎与实验数据重合;并且可以看到与实验数据相比较,在压力范围为上百吉帕内以 Appy 物态方程和线性 Hugoniot 为参考计算的等熵压缩线明显优于以二次曲线 Hugoniot 为参考计算的等熵压缩线,说明在该压力范围内,以 Appy 物态方程和线性

Hugoniot 为参考来计算等熵压缩线是合理可行的。

表 1　线性 Hugoniot 参数

Table 1　Linear Hugoniot parameters

Material	ρ_0/(g/cm^3)	C_0/(km/s)	λ	Γ_0
Al	2.7	5.35	1.345	2.13
Al(6061)	2.703	5.35	1.34	2.13
Cu	8.93	3.91	1.51	1.97

表 2　二次曲线 Hugoniot 参数

Table 2　Quadratic Hugoniot parameters

Material	ρ_0/(g/cm^3)	C_0/(km/s)	α	λ	Γ_0
Al	2.7	5.55	−0.001 08	1.27	2.13
Cu	8.93	3.87	−0.007 67	1.53	1.97

表 3　Appy 物态方程参数

Table 3　Parameters of Appy equation of state

Material	g_0	g_1	g_2	g_3
Al	1.69	0.94	1.69	1.05
Cu	2.02	1.75	2.02	1.80

Note: * Represents the parameter at 80 K.

由线性、二次曲线所表示的冲击绝热线为参考来计算以及直接由 Appy 经验物态方程计算得到的关于铝和铜的等熵压缩线见图 2 和图 3 所示。

由图 2、图 3 可以看出,在压力不是很高(铝为 100 GPa 以下,铜为 200 GPa 以下)的情况下,以线性、二次曲线表示的冲击绝热线为参考来计算以及直接由 Appy 经验物态方程计算得到的等压缩熵线都十分接近,相差不到 1.5%。

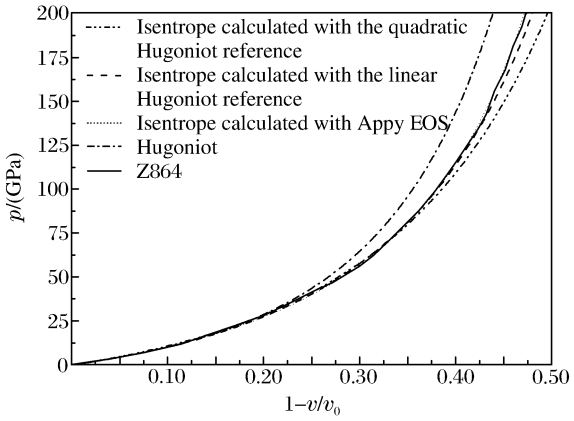


图 1　计算的等熵压缩线与 Z864 实验数据的比较

Fig. 1　Comparision of calculated isentrope with the experimental data of shot Z864 from the Sandia Z machine

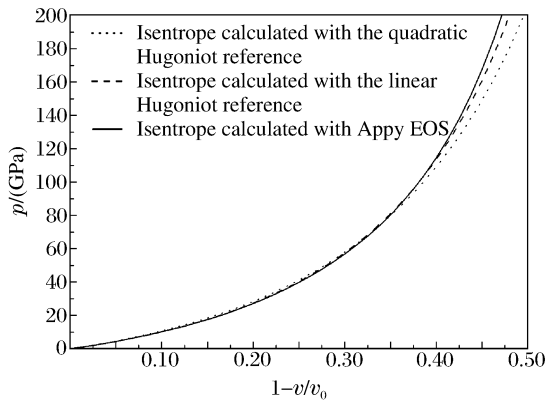


图 2　由线性、二次曲线 Hugoniot 关系和 Appy 物态方程计算得到的铝的等熵压缩线

Fig. 2　Isentropes of aluminum calculated from the linear, quadratic Hugoniot and the Appy EOS

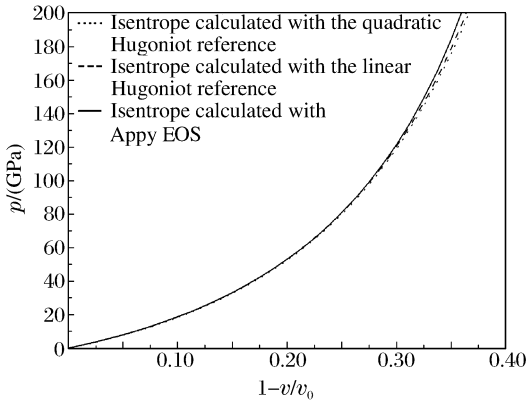


图 3　由线性、二次曲线 Hugoniot 关系和 Appy 物态方程计算得到的铜的等熵压缩线

Fig. 3　Isentropes of copper calculated from the linear, quadratic Hugoniot and the Appy EOS

4 结 论

200 GPa 压力范围内以 Appy 物态方程和线性关系表示的 Hugoniot 为参考线来计算等熵压缩线已有足够的精度,前者与实验数据几乎重合,后者与实验数据相差不到 1%。在该压力范围内用 Appy 物态方程和线性关系表示的 Hugoniot 为参考线来计算等熵压缩线要优于以二次曲线关系表示的 Hugoniot,其主要原因是实验不能实现严格的等熵压缩过程,只是一种准等熵压缩过程。

References:

[1] Barker L M. High-Pressure Quasi-Isentropic Impact Experiments [A]//Asay J R, Graham R A, Straub G K. Shock Waves in Condensed Matter-1983 [C]. Amsterdam: North-Holland, 1984: 217-224.

[2] Hayes D. Backward Integration of the Equations of Motion to Correct for Free Surface Perturbaritz [R]. Sand2001-1440, 2001.

[3] Sun C W. Experimental Techniques of Isentropic Compression and High-Velocity Flyer Driven by Magnetic Force [J]. Detonation and Shock Waves, 2005, (2): 84. (in Chinese)
孙承纬. 磁驱动等熵压缩和高速飞片的实验技术 [J]. 爆轰波与冲击波, 2005, (2): 84.

[4] Hayes D B, Hall C A. Measurement of the Compression Isentrope for 6061-T6 Aluminum to 185 GPa and 46% Volumetric Strain Using Pulsed Magnetic Loading [J]. J Appl Phys, 2004, 96(10): 5520-5527.

[5] Lemke R W, Knudson M D. Considerations for Generating up to 10 Mbar Magnetic Drive Pressure with the Refurbished Z-Machine (ZR), Dense Z-Pinches [A]//Davis J. 5th Int Conf on Dense Z-Pinches [C]. New Yok: AIP, 2002: 299-304.

[6] Tang W H, Zhang R Q. Theory and Computation Generality of Equations of States [M]. Changsha: Press of University of Science and Technology of National Defence, 1999. (in Chinese)
汤文辉, 张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1999.

[7] Hua J S, Jing F Q, Gong Z Z, et al. Study of Numerical Simulation for Quasi-Isentropic Compression [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(3): 195-202. (in Chinese)
华劲松, 经福谦, 龚自正, 等. 准等熵压缩数值模拟研究 [J]. 高压物理学报, 2000, 14(3): 195-202.

[8] Жерноклетов М В, Трунин Р Ф. Experimental Data of Shock Compression and Adiabatic Expansion of Condensed Matters under High Energy Densities [M]. Translated by Han J W. Mianyang: Institute of Fluid Physics, CAEP, 1997. (in Chinese)
热尔诺科列托夫 М В, 特鲁宁 Р Ф. 高能量密度下凝聚物质的冲击压缩和绝热膨胀的实验数据[M]. 韩钧万, 译. 绵阳: 中国工程物理研究院流体物理研究所, 1997.

[9] Marsh S P. LASL Shock Hugoniot Data [Z]. Berkeley: University of California Press, 1979.

Compression Isentropes of Aluminum and Copper up to 200 GPa

MO Jian-Jun, SUN Cheng-Wei

(*Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: The equation of compression isentropes derived from linear and quadratic Hugoniot curves has been obtained by employing the Hugoniot as the reference of Grüneisen EOS as well as from $p=f(e,v)$ form EOS directly. The compression isentropes of aluminum and copper are calculated with both Grüneisen and Appy EOS. The calculated results show that the compression isentrope of aluminum under 200 GPa calculated with Appy EOS approaches to that with the linear Hugoniot, where the error is less than 1.5%. It is also compared with the ICE data of Shot Z864 at the Sandia Z machine. They agree very well under 200 GPa and derived from both the linear Hugoniot and the Appy EOS, for those where the error is less than 1%. The isentropes of aluminum derived directly from Appy EOS coincides almost with the experimental one.

Key words: compression isentrope; Hugoniot; equation of state