由声速和 Hugoniot 关系确定状态参数*

刘 长 泰

高温高压固体状态方程迄今完全由理论上进行计算还很困难。通常采用半经验状态方程，其中 Grüneisen 系数起着重要作用。目前已有的 Grüneisen 系数理论表达式或者只与冷压的导数相关，或者只与比容相关，而不含压力（更不含温度）。它的不确定性直接影响着高温高压状态参数的准确确定。因此，直接利用实验数据来确定它是必要的。在冲击压缩实验中确定它的方法已有几种，如“二次冲击压缩法”[1]及“多孔物质压缩法”[2-4]等。但这些方法皆有不宜之处（见文末讨论）。本文利用声速和冲击绝热实验数据来确定它。此外，也将等熵压缩和击波阵面温度直接由 Hugoniot 关系表达。这样在得到了 Grüneisen 系数之后，即可由 Hugoniot 测量结果对这些量直接进行计算。

一、理论方程的建立

在此，将一般热力学过程的压力写成

$$p = p(v, S), \tag{1}$$

式中 v, S 分别表示比容和熵。对 (1) 式求微分，得

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_S dv + \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_v dS,$$

或写成

$$\frac{dp}{dv} = \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_S + \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_v \frac{dS}{dv}. \tag{2}$$

根据热力学关系有

$$\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_v = -\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p T \Big/ c_v \frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T$$

$$= -T\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \Big/ c_v \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T, \tag{3}$$

式中 c_v 为物质定容比热，T 为温度。Grüneisen 系数为

$$\gamma = v\left(\frac{\partial p}{\partial E}\right)_v = v\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \Big/ c_v$$

$$= -v\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \Big/ c_v \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T. \tag{4}$$

由(3)式和(4)式得

$$\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_v = \frac{\gamma}{v} T. \tag{5}$$

把(5)式代入(2)式得

$$\frac{dp}{dv} = \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_S + \frac{\gamma}{v} T \frac{dS}{dv}, \tag{6}$$

热力学定律和 Hugoniot 方程为

$$TdS = dE + pdv, \tag{7}$$

$$E_H - E_0 = \frac{1}{2} p_H (v_0 - v), \tag{8}$$

式中下标 H 表示冲击压缩状态，0 表示初始状态。

对(8)式求微分得

$$dE_H = \frac{1}{2}(v_0 - v) dp_H - \frac{1}{2} p_H dv. \tag{9}$$

由(7)式和(9)式则得到沿 Hugoniot 曲线的熵的方程为

$$TdS = \frac{1}{2}(v_0 - v) dp_H + \frac{1}{2} p_H dv, \tag{10}$$

或可以写成

$$T\left(\frac{dS}{dv}\right)_H = \frac{1}{2}(v_0 - v)\left(\frac{dp}{dv}\right)_H + \frac{1}{2} p_H. \tag{11}$$

将(6)和(11)式联立，则有

$$\left(\frac{dp}{dv}\right)_H = \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_S + \frac{\gamma}{2v}\left[(v_0 - v) \times \left(\frac{dp}{dv}\right)_H + p_H\right],$$

---

* 1978 年 6 月 14 日收到。

移项得

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_S = \left[1 - \frac{\gamma}{2v}(v_0 - v)\right]\left(\frac{dp}{dv}\right)_H - \frac{\gamma}{2v} p_H, \qquad (12)$$

则声速为

$$c^2 = \left[\frac{1}{2} v\gamma(v_0 - v) - v^2\right]\left(\frac{dp}{dv}\right)_H + \frac{1}{2}\gamma v p_H. \qquad (13)$$

由此，Grüneisen 系数可表示成

$$\gamma = \frac{2\left[c^2 + v^2\left(\frac{dp}{dv}\right)_H\right]}{v(v_0 - v)\left[\frac{p_H}{v_0 - v} + \left(\frac{dp}{dv}\right)_H\right]}. \qquad (14)$$

等熵压缩体模量为

$$B_S = \left[\frac{1}{2}\gamma(v_0 - v) - v\right]\left(\frac{dp}{dv}\right)_H + \frac{1}{2}\gamma p_H. \qquad (15)$$

由(4)式

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = c_v \gamma / v. \qquad (16)$$

将(16)式代入如下的热力学关系

$$TdS = c_v dT + T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv, \qquad (17)$$

则有

$$TdS = c_v dT + \frac{\gamma}{v} c_v T dv. \qquad (18)$$

由(18)式和(10)式，经简单运算，即得到冲击波阵面温度方程为

$$c_v\left(\frac{dT}{dv}\right)_H + \frac{\gamma}{v} c_v T = \frac{1}{2}\left[(v_0 - v) \times \left(\frac{dp}{dv}\right)_H + p_H\right]. \qquad (19)$$

二、结　果

各种材料的 Hugoniot 测量数据根据需要可处理成各种不同的表达式. 一般来讲，给出击波速度 D 和粒子速度 u 之间的关系式是方便的，

$$D = \sum_{i=0}^{n} A_i u^i, \qquad (20)$$

式中 A_i 为实验数据拟合常数. 一般的材料在百万巴量级内的实验数据拟合常数 A_i 不超过三项. 对绝大部分材料，处理成两项式的线性关系就足够了，

$$D = A_0 + A_1 u. \qquad (21)$$

冲击波质量守恒和动量守恒方程

$$\frac{v_0}{v} = D/(D - u), \quad p_H - p_0 = Du/v_0. \qquad (22)$$

在这里，假定了波前物质处于静止状态，即初始粒子速度 $u_0 = 0$. 由(21)式和(22)式，经简单运算，可得

$$p_H = \frac{A_0^2(v_0 - v)}{[v_0 - A_1(v_0 - v)]^2} + p_0. \qquad (23)$$

关于声速，其实验结果用下式拟合

$$c = \sum_{i=0}^{n} g_i(\sigma - 1)^i, \qquad (24)$$

式中 $\sigma = v_0/v$ 为物质压缩比. 对硬铝的 Hugoniot 实验结果和声速实验结果分别表示如下:

$$D = 5.48 + 1.30u, \qquad (25)$$

$$c = 5.48008 + 8.742(\sigma - 1)$$

表　1

p_H(万巴)	30.8	41.1	51.3	60.4	70.9
γ	1.64	1.58	1.54	1.50	1.47

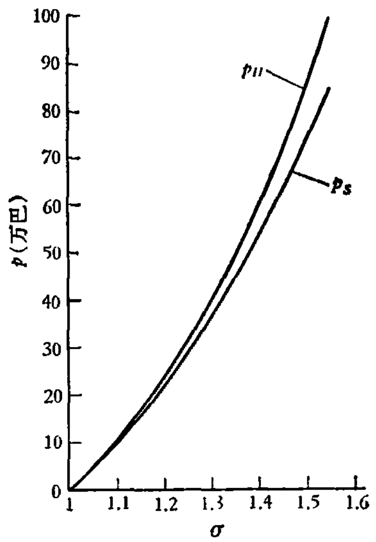

图 1　硬铝 Hugoniot 线和等熵压缩线

$$-6.459(\sigma-1)^2+11.032(\sigma-1)^3$$
$$-11.276(\sigma-1)^4+5.342(\sigma-1)^5, \quad (26)$$
$$v_0=0.358,$$

其中声速 c 的实验压力为 30 —70 万巴．利用(26)式的声速结果，由(14)式得到的 Grüneisen 系数列于表 1．由此 Grüneisen 系数和 Hugoniot 实验结果(25)，按照(12)式和(19)式所计算的等熵压缩线和击波阵面温度示于图 1 和图 2．

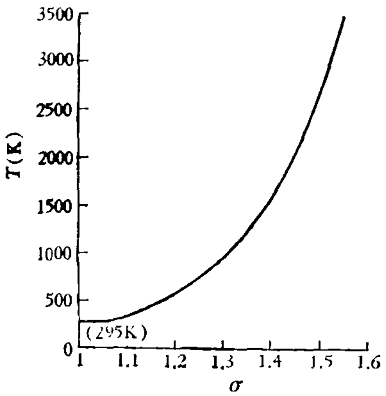

图 2 温度 T 与压缩比 σ 的关系曲线
(计算中初始温度 $T_0=295$K，比热 $c_v=0.896\times10^7$ 尔格/克・K)

三、讨　　论

关于 Grüneisen 系数，利用实验数据来确定它，无论哪种方法对实验精度的要求都是比较严的．文献[1]中的“二次压缩”法要测定两种材料的冲击压缩实验数据．它主要是利用了两种材料的波阻抗之差造成待测样品中的二次压缩状态．所以，它对密度较大的材料是不易实施的．而且获得的 Grüneisen 系数的准确性，要受到配用的高阻抗材料的 Hugoniot 关系之偏差的影响．文献[2—4]中的“多孔物质压缩”法则使用了同种物质的初始密度不同的两种样品，它建立的基础是，同种物质的初始密度不同的多孔材料和密实材料的冷压、冷能及 Grüneisen 系数值是相同的．这是不严格的．实际上，Grüneisen 系数及冷压、冷能不但与材料的其它物理性质相关，而且与材料的初始比容 v_0 相关． 本文采用同样试件的 Hugoniot 数据和声速测量值来确定 Grüneisen 系数，从理论上避免了上述两种方法的缺点．它可以适用于任何材料．由(14)式可见，这一方法实质上是基于 Hugoniot 线的斜率与等熵压缩线的斜率之差以及 Hugoniot 线的斜率与其弦的斜率之差． 所以，它对确定低密度材料的 Grüneisen 系数将更为有效．

上述的所有方法皆是对高压实施较易，对低压较难．

参 考 文 献

[1] Г. А. Адауров, А. Б. Балашов, А. Н. Дремин, *Изв. АН СССР, Сер. Геофиз.*, **5** (1961), 712.

[2] Л. В. Альтшулер, К. К. Крупников, В. Н. Леднев, В. Н. Жучихин, М. И. Бражник, *ЖЭТФ*, **39**-1(1960), 874.

[3] К. К. Крупников, М. И. Бражник, В. П. Крупникова, *ЖЭТФ*, **42**-3 (1962), 675.

[4] С. Б. Кормер, А. И. Фунтиков, В. Д. Урхин, А. Н. Колесникова, *ЖЭТФ*, **42**-3 (1962), 686.

钆镓石榴石单晶中的缺陷*

刘　　琳　　　张 志 友

(中国科学院物理研究所)

一、引　　言

做磁泡材料基片用的钆镓石榴石单晶(即 $Gd_3Ga_5O_{12}$，简写为 GGG)，要求有很高的完整性．GGG 晶体中的缺陷，特别是露在晶片表面的缺陷，会影响外延磁性膜的质量，在外延膜中形成钉扎，阻碍磁泡运动．GGG 晶体中发现的

* 1979 年 4 月 10 日收到．