第 17 卷 第 4 期 高 压 物 理 学 报 Vol. 17, No. 4
2003 年 12 月 CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS Dec., 2003

文章编号：1000-5773(2003)04-0330-06

Hugoniot 线上的一个经验常数
——来自多孔材料 Hugoniot 数据的对比研究*

代 福[1]，龚自正[1]，黄海军[1,2,3]，陈俊祥[2]，经福谦[1,2]

(1. 西南交通大学高温高压物理研究所，四川成都 610031；
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；
3. 辽宁大学物理系，辽宁沈阳 110036)

摘要：对不同初始密度样品冲击压缩 Hugoniot 数据的系统分析显示，对每种固体物质而言存在一个表征材料特性的沿其 Hugoniot 线不随冲击压力而变的经验常数 β。β 的数值随材料而异。对金属元素而言，该经验特性常数 β 与初始密实密度 ρ_0 之间遵循同一个幂指数关系。利用该常数 β，可很方便地对不同初始密度的 Hugoniot 数据进行换算，并可以很方便地获得 Grüneisen 参数。还对 β 值为常数的适用范围作了讨论。

关键词：Hugoniot 线；经验常数 β；多孔材料
中图分类号：O521.21 **文献标识码**：A

1 引 言

Grüneisen 参数 γ 是物质高温高压物态方程和高压物性研究中的一个重要参数[1]，在处理冲击压缩数据、研究物质热弹性性质和多种热力学量的温度和压力效应、进行等温压缩、等熵压缩及冲击压缩状态之间的相互转换、确定地球内部物质组成和温度分布等问题中有重要作用。迄今，人们已经提出多种方法对 Grüneisen 参数进行过研究。其中，Alt'shuler 等人提出过用测量多孔与密实材料 Hugoniot 数据计算 Grüneisen 参数的方法(参见文献[2])，具体的计算公式是

$$\gamma=\frac{2v(p'_{\mathrm{H}}-p_{\mathrm{H}})}{p'_{\mathrm{H}}(v_{00}-v)-p_{\mathrm{H}}(v_0-v)} \tag{1}$$

其物理意义是：对于某一种材料，设其多孔样品与密实样品的初始比容分别为 v_{00} 和 v_0，当对上述两种样品进行冲击压缩达到同一终态比容 v 时，如果样品中的实测冲击压力分别为 p'_{H} 和 p_{H}，则该材料在比容 v 时的 Grüneisen 参数可以通过(1)式计算得到。应该说明在上式推导过程中引入了如下的假设：γ 值仅是 v 的函数，与样品中的温度状态无关。经验说明，这个假设在一定条件下是近似成立的。

考虑到密度与比容互为倒数，即有 $v=1/\rho$ 关系，则(1)式可以改写为

$$\gamma=2/(\rho\beta-1) \tag{2}$$

式中

$$\beta=\frac{\rho_0-\rho_{00}p_{\mathrm{H}}/p'_{\mathrm{H}}}{\rho_0\rho_{00}(1-p_{\mathrm{H}}/p'_{\mathrm{H}})} \tag{3}$$

显然由(3)式定义的 β 的单位是 $\mathrm{cm^3/g}$。通过对多种材料 Hugoniot 实测数据的分析，我们发现，用

* **收稿日期**：2002-09-19；**修回日期**：2003-03-12
基金项目：国家自然科学基金重大项目(10299040)
作者简介：代 福(1977—)，男，硕士研究生.

(3)式计算的 β 值沿 Hugoniot 线基本保持不变，这个值可视之为用以表征该材料性质的一个经验常数。由于 β 值具有这个性质，为进一步处理和分析 Hugoniot 数据带来了很大方便。下面将给出得到上述结果的具体过程。

2　β 值的计算分析

为了比较全面地研究 β 值的性质，我们选用金属、矿物、离子晶体、分子晶体等多类物质进行研究和分析。

由于金属是常用材料，均质性好，易于进行比较精确的 β 值分析，故选用了多种金属进行研究，总计有低冲击阻抗值的铝(2024 铝)、中等冲击阻抗值的铁、铜和钴、高冲击阻抗值的钽、钨。计算中铝、铁、铜的实验数据取自文献[3]，钴、钽、钨的实验数据取自文献[4]。为了便于说明，在表 1 中列出了铁的实验数据，对上述金属材料，通过(3)式计算的结果绘于图 1。由图 1 看出所有金属材料的 β 值都可以近似为一个不随密度变化的常数，但具体数值随材料而异(见表 2)。

表 1　不同初始密度下铁的 β 值[3]

Table 1　Value of β of iron from different initial density[3]

ρ_0/(g/cm^3)	ρ_{00}/(g/cm^3)	p_H/(GPa)	p'_H/(GPa)	ρ/(g/cm^3)	β/(cm^3/g)
7.864	6.988	47.430	59.356	9.83	0.21
7.856	6.959	118.693	148.010	11.02	0.21
7.861	6.933	100.717	117.350	10.70	0.24
7.861	6.055	100.201	153.055	10.80	0.23
7.850	6.050	29.427	51.047	9.20	0.22
7.850	5.919	42.514	79.685	9.62	0.22
7.840	4.770	34.986	120.475	9.40	0.24
6.960	4.770	35.510	120.475	9.40	0.24
6.050	4.880	51.047	84.535	9.20	0.26

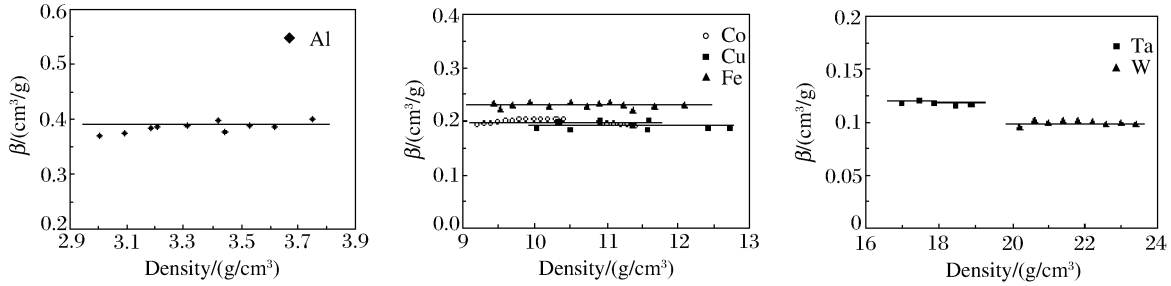

图 1　铝、铁、铜、钴、钽和钨的 β-ρ 关系

Fig. 1　Relationship between β and ρ of Al, Fe, Cu, Co, Ta and W

用同种方法，我们还对离子晶体 CsI 和 KCl 作了计算，计算结果绘于图 2，β 平均值列于表 2。对于矿物材料，我们计算了硅辉石 $CaSiO_3$、方镁石 MgO、金红石 TiO_2 和水镁石 $Mg(OH)_2$，计算结果绘于图 3，β 平均值亦列于表 2。图 4 是冰态 H_2O 和 CO_2 的计算结果，它们的 β 平均值在表 2 中给出。计算用的实验数据取自文献[4]。

从以上分析结果可知，对于多种类型材料(金属、离子晶体、矿物等)，在本研究用于实验数据分析的热力学状态范围内，均存在一个基本上不随压力和温度变化的特征常数 β，其值随材料而异，因而表征了该材料的一个经验常数。对于 β 值究竟代表了材料什么性质的问题，目前尚不清楚，有待进一步研究。

表 2 某些金属、离子晶体、分子晶体及矿物等材料的 β 平均值

Table 2 Average value of β for some metals, ionic crystals, molecular crystal and minerals

Material	$\bar{\beta}$ /(cm³/g)	Material	$\bar{\beta}$ /(cm³/g)
Al	0.39	CsI	0.495
Fe	0.23	$Mg(OH)_2$	0.367
Cu	0.19	$CaSiO_3$	0.354
Co	0.198	MgO	0.254
Ta	0.12	TiO_2	0.225
W	0.1	CO_2(Ice)	1.09
KCl	1.388	H_2O(Ice)	0.97

Note: Porosity range: W (1.44), Ta (1.52), $CaSiO_3$ (1.02), $Mg(OH)_2$ (1.005), TiO_2 (1.008), H_2O, Ice (1.09), CsI (1.797), KCl (1.41), Co (2.13), Fe (1.66), Al (1.424), Cu (1.554), CO_2, Ice (1.31), MgO (1.07)

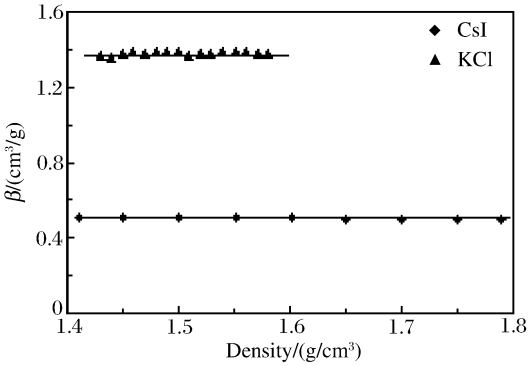

图 2 离子晶体 CsI 和 KCl 的 β-ρ 关系（计算用的实验数据取自文献[4]）

Fig. 2 Relationship between β and ρ of ionic crystal CsI and KCl (Experimental data used in calculations are from Ref. [4])

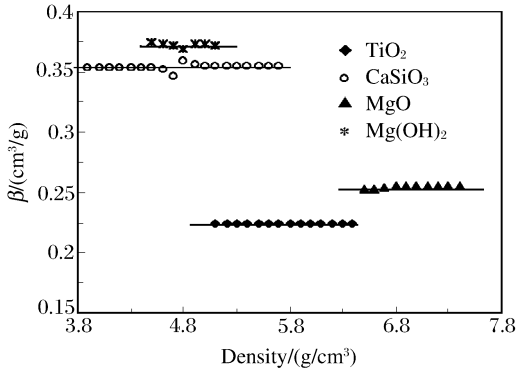

图 3 $CaSiO_3$, MgO, TiO_2 和 $Mg(OH)_2$ 矿物材料的 β-ρ 关系

Fig. 3 Relationship between β and ρ for mineral of $CaSiO_3$, MgO, TiO_2 and $Mg(OH)_2$

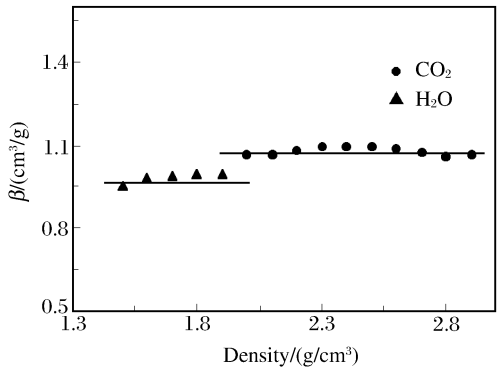

图 4 冰态 H_2O 及 CO_2 的 β-ρ 关系

Fig. 4 Relationship between β and ρ for H_2O and CO_2, both are in ice state

3 β 值性质的进一步研究

3.1 经验常数 β 合理性的补充证明

实践中，我们经常遇到两类情况，一类是对某种材料，既测量了它的密实样品的 Hugoniot 线，又测量了它的多种孔隙率（即具有不同初始密度）样品的 Hugoniot 线；另一类是对于许多天然的和人工压制的岩石、矿物样品，很难达到理想的密实状态，在这种情况下，能否通过测量两种不同孔隙率样品的 Hugoniot 线来推算其密实样品的 Hugoniot 线呢？第一类情况大都是金属元素，本文图 1 分析的金属均属此类情形。对于这类情况，我们只要把通过部分多孔样品数据与密实样品数据分析后得到的 β 值，用于从其它未参与上述求 β 值的多孔样品数据推算出“理论”的密实样品的 Hugoniot 数据，然后把它与实测密实样品数据进行比较，即进行交叉检验。如果两者符合性很好，就能对 β 值合理性给出补充证

明。为此，我们将(3)式改写为

$$p_{\mathrm{H}}=p'_{\mathrm{H}}\,\frac{\rho_0(\beta\rho_{00}-1)}{\rho_{00}(\beta\rho_0-1)} \tag{4}$$

具体的做法是：将事先确定的 ρ_0(密实样品初始密度)及 β 值代入(4)式，然后把参与(4)式计算的多孔样品实测数据 p'_{H} 及该多孔样品的初始密度 ρ_{00} 代入，便可求得对应于该多孔样品冲击压缩 v_{H}(实测值)的密实样品的冲击压力 p_{H}。图 5、图 6、图 7 分别给出了对 Al(2024 铝)、Fe、Cu 三种金属元素的上述计算结果(实验数据取自文献[3])。不难看出，由多孔样品实测数据换算的数据点，都位于密实样品的实测 Hugoniot 线上或位于曲线两侧的附近处。交叉检测的结果进一步支持了 β 值的合理性。

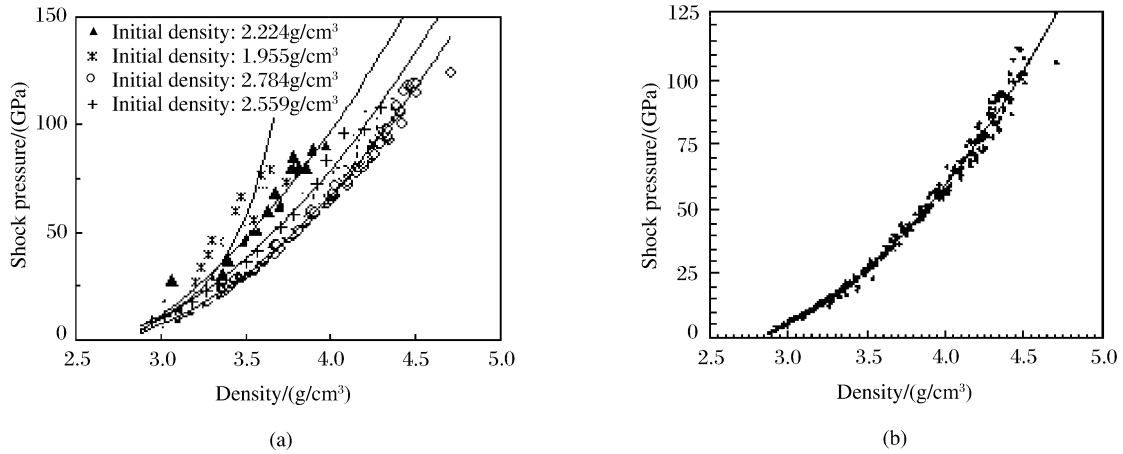

图 5　(a) 不同初始密度铝的 p-ρ Hugoniot 关系，(b) 用公式(4)将 (a)中的数据换算到密实密度下的结果及与密实铝 p-ρ Hugoniot 线(实线)的对比

Fig. 5　(a) Shock pressure vs. density of several porous Al, (b) Comparison of the modified p-ρ Hugoniot in (a) using Eq. (4) to no-porous density with Hugoniot of no porous sample (solid line) of Al

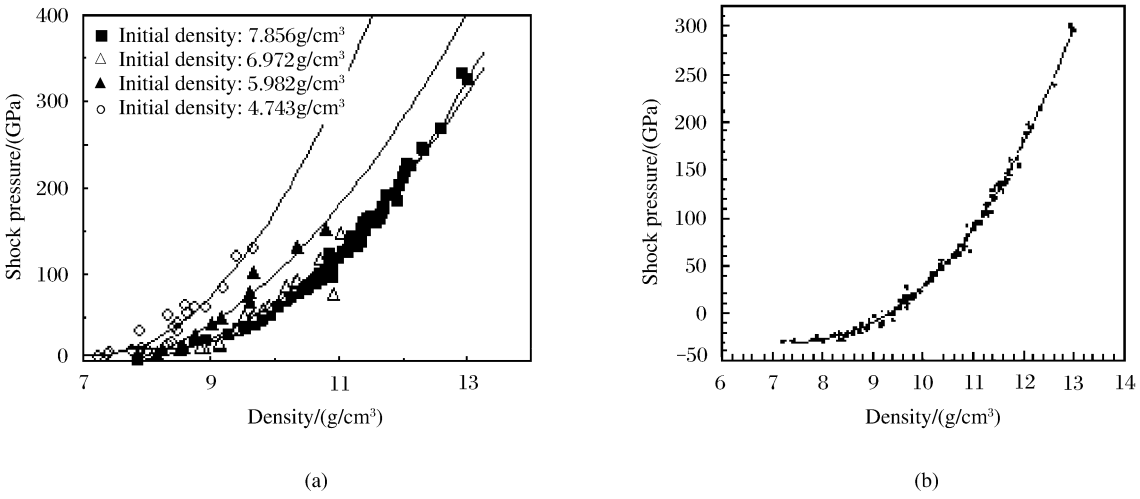

图 6　(a) 不同初始密度铁的 p-ρ Hugoniot 关系，(b) 用公式(4)将(a)中的数据换算到密实密度下的结果及与密实铁 p-ρ Hugoniot 线(实线)的对比

Fig. 6　(a) Shock pressure vs. density of several porous iron, (b) Comparison of the modified p-ρ Hugoniot in (a) using Eq. (4) to no-porous density with Hugoniot of no porous sample (solid line) of iron

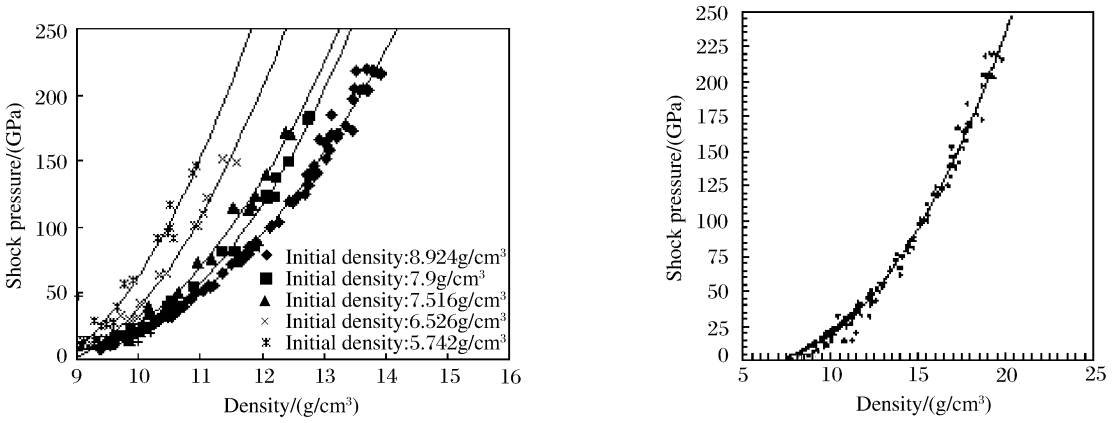

图 7 (a) 不同初始密度铜的 p-ρ Hugoniot 关系，(b) 用公式(4)将(a)中的数据换算到密实密度下的结果及与密实铜 p-ρ Hugoniot 线(实线)的对比

Fig. 7 (a) Shock pressure vs. density of several porous coppers. (b) Comparison of the modified p-ρ Hugoniot in (a) using Eq. (4) to no-porous density with Hugoniot of no porous sample (solid line) of copper

从上述第一类情况的检验结果看，第二类情况的解决是不难的。具体地说，可以先对两种孔隙率样品进行 Hugoniot 线测量，利用(3)式得到该材料的 β 值(此时可以把 ρ_0 和 ρ_{00} 分别看作两种孔隙率样品的初始密度)。第二步，如果知道了密实材料的密度，则又可以将多孔样品数据代入(4)，便可计算出密实样品的 Hugoniot 线。

3.2 金属元素 β 值的变化规律

金属元素由于其构成粒子简单，由原子实(或离子)和电子组成，特别有趣的是，其 β 值随材料的初始密度 ρ_0 呈单调递减的变化规律，见图 8 所示，并可用下式表示

$$\beta_{\text{metal}} = 1.217\rho_0^{-0.884} \tag{5}$$

式中 β 的单位是 cm^3/g，ρ_0 的单位是 g/cm^3。对于那些缺乏充分实验数据计算其 β 值的金属材料，利用(5)式对其多孔或密实材料 Hugoniot 参数作某种预测，也许是很有用的。

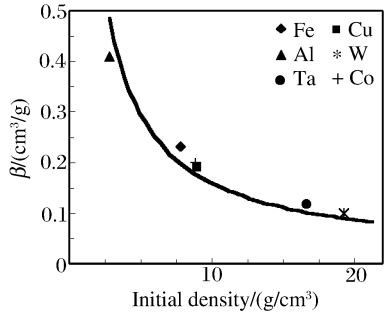

图 8 金属平均 β 值与初始密度的关系

Fig. 8 Average β vs. initial density of metals

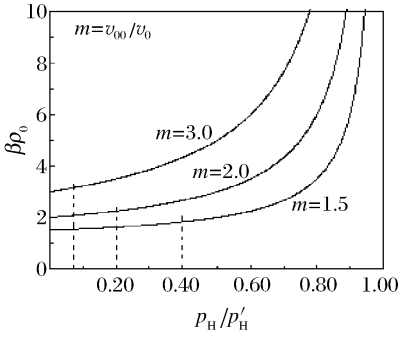

图 9 $\beta\rho_0$ 与 p_H/p'_H 的关系

Fig. 9 Relationship between $\beta\rho_0$ and p_H/p'_H

4 关于常数 β 局限性的讨论

β 是根据(1)式得出的，故 β 为常数的适用范围受到相应的限制。在从 Hugoniot 状态方程和 Grüneisen 状态方程推导(1)式的过程中本身假定：γ 值仅是 v 的函数。通过(1)式我们发现当 $v \to v_0$ 时，γ 值受 v_{00} 的影响很大，特别是当 $v = v_0$ 时，γ 成了 v_{00} 的函数，这与上述假定相悖。故我们讨论 β 时也必须在一定的压力范围之内。

分析发现，v_0 与 v_{00} 之间的差异越小越能体现 β

为常数的结论。事实上，v_{00}不能太小。为了考察孔隙率对常数 β 的限制，由(3)式可得：$\beta=v_0(m-\bar{\omega})/(1-\bar{\omega})$，式中 $m=v_{00}/v_0$ 为材料的孔隙率，$\bar{\omega}=p_H/p'_H$。分别取 m 值为 1.5、2 和 3，计算了在相应 m 下 $\beta\rho_0$ 与 $\bar{\omega}$ 的关系(如图 9 所示)。从图 9 可以看出：随着 m 值的增大，$\beta\rho_0$ 近似为常数的区域(图中虚线左边区域)减小。或者说，随着孔隙率的增大，β 值为常数的压力范围变窄。因此，可以说，经验常数 β 在一定的孔隙率和压力范围之内适用。关于经验常数 β 性质的进一步分析仍在进行之中。

References:

[1] Wu Q, Jing F Q, Li X Z. Behaviour of Grüneisen Parameter at High Pressure and Temperature Inferred from Shock Compression Data [J]. Chinese Phys Lett, 2002, 19: 528.

[2] Jing F Q. Introduction to Experimental Equation of State [M]. Beijing: Scientific Press, 1986. 371. (in Chinese). 经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 北京：科学出版社，1986. 371.

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

[4] Ahrens T J. Mineral Physics & Crystallography: A Handbook of Physical Constants [Z]. Washington D C: American Geophysical Union, 1995.

An Empirical Material Constant on the Hugoniot of Solids: From Comparative Study of Porous Materials

DAI Fu[1], GONG Zi-Zheng[1], HUANG Hai-Jun[1,2,3], CHEN Jun-Xiang[2], JING Fu-Qian[1,2]

(1. *Institute of Physics, Southwest Jiaotong University, Chengdu* 610031, *China*;
2. *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
3. *Department of Physics, Liaoning University, Shenyang* 110036, *China*)

Abstract: From the systemically comparative study of previous experimental solid Hugoniot data of different porous samples, a new material parameter β, which keeps in constant along Hugoniot for all kinds of solid materials, was revealed. For different materials, the value of β is different. There exist an universal power relationship between material constant β and initial density ρ_0 for metal. By using this constant β, Hugoniot data between different porous samples can be converted very simply, and Grüneisen parameter can also be obtained very easily. The limitation of this empirical material parameter being as a constant was discussed with variations of pressure and porosity.

Key words: shock Hugoniot; empirical material constant β; porous sample