

# 合成材料的组成\*

刘长泰

(西北核技术研究所, 1981年12月28日收到)

## 摘 要

对工程上所需要的特定材料, 若能在理论上预言它并能依理论结果制而即得, 乃为工程使用所盼。为此目的, 本文即要研究一个合适的理论, 选择一些物质组合起来, 使制成的合成材料与人们事先所要求的“目标材料”相合。文内前三部分给出理论, 第四部分给出结果。并对工程上给定的两种“目标材料”做了理论计算, 依计算结果制造了合成材料, 且对其做了实验。其结果是满意的。

## 一、基本方程

设  $P_K(v)$  为冷压,  $E_K(v)$  为冷能, 则

$$P_K(v) = -\frac{dE_K(v)}{dv} \quad (1.1)$$

式中  $v$  为比容, 由 Grüneisen 方程

$$P - P_K = \frac{\gamma}{v}(E - E_K) \quad (1.2)$$

并注意 Hugoniot 关系

$$E_H - E_0 = \frac{1}{2}P_H(v_0 - v) \quad (1.3)$$

则得,

$$P_H = \frac{2v}{2v - \gamma(v_0 - v)} \left\{ P_K + \frac{\gamma}{v} \left[ E_0 + \int_{v_{0K}}^v P_K(v) d(v) \right] \right\} \quad (1.4)$$

上面式中  $\gamma$  为 Grüneisen 系数。这里采用  $D-M$  关系

$$\gamma = -\frac{1}{3} - \frac{v}{2} \frac{d^2(P_K v^{2/3})}{dv^2} \bigg/ \frac{d(P_K v^{2/3})}{dv} \quad (1.5)$$

对 (1.3) 微分并和热力学关系

$$dE = T ds - P dv \quad (1.6)$$

联立得到

\* 钱伟长推荐。

$$ds = \frac{1}{2T} \left\{ (v_0 - v) dP_H + P_H dv \right\} \quad (1.7)$$

式中  $s$  是熵,  $T$  是温度. 下标  $H$  为 Hugoniot 状态. 对热力学压力求微分得

$$\left( \frac{\partial P}{\partial s} \right)_v ds = dP - \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_s dv \quad (1.8)$$

和

$$\left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v dT = dP - \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_T dv \quad (1.9)$$

由热力学关系

$$\left( \frac{\partial P}{\partial s} \right)_v = -T \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_P / c_v \left( \frac{\partial v}{\partial P} \right)_T \quad (1.10)$$

和关系式

$$\gamma = -v \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_P / c_v \left( \frac{\partial v}{\partial P} \right)_T \quad (1.11)$$

得

$$\left( \frac{\partial P}{\partial s} \right)_v = \frac{\gamma}{v} T \quad (1.12)$$

由 (1.12) 和 (1.8) 联立

$$ds = \frac{v}{T\gamma} \left\{ dP - \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_s dv \right\}$$

代入 (1.7) 式整理

$$\left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_s = \left\{ 1 - \frac{\gamma}{2v} (v_0 - v) \right\} \left( \frac{dP}{dv} \right)_H - \frac{\gamma}{2v} P_H \quad (1.13)$$

将关系式

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

代入 (1.9) 式及下面热力学关系

$$\left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_T = \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_s + \left( \frac{T}{c_v} \right) \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_v^2 \quad (1.14)$$

得

$$\frac{c_v \gamma}{v} dT = dP - \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_T dv \quad (1.15)$$

$$\left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_T = \left( \frac{\partial P}{\partial v} \right)_s + \frac{c_v \gamma^2}{v^2} T \quad (1.16)$$

把 (1.16) 代入 (1.15), 再与 (1.13) 结合得

$$\left( \frac{dT}{dv} \right)_H + \frac{\gamma}{v} T_H = \frac{1}{2c_v} \left[ (v_0 - v) \left( \frac{dP}{dv} \right)_H + P_H \right] \quad (1.17)$$

若  $c_v = \text{Constant}$ , 可对 (1.17) 积分

$$T_H = \exp \left[ - \int_{v_0}^v \frac{\gamma}{v} dv \right] \left\{ \frac{1}{2c_v} \int_{v_0}^v \left[ (v_0 - v) \left( \frac{dP}{dv} \right)_H + P_H \right] \exp \left[ \int_{v_0}^v (\gamma/v) dv \right] dv + T_0 \right\}$$

式中 $c_v$ 为定容比热,

$$c_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \quad (1.18)$$

而

$$E(v, T) = E_K(v) + E_T(v, T) \quad (1.19)$$

所以

$$c_v = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = \left( \frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_v \quad (1.20)$$

## 二、条件方程

为使由选定的几种物质组成的合成材料与事先给定的目标材料相一致,通过对上述基本方程中的诸参量的仔细分析和对极高压状态方程公式的分析,我们作出如下条件方程

$$\sum_{i=1}^N M_i = 1 \quad (2.1)$$

$$\rho_0^* \sum_{i=1}^N (M_i / \rho_{0i}) = 1 \quad (2.2)$$

$$v^* = \sum_{i=1}^N M_i v_i(P_K) \quad (2.3)$$

$$A^* = A_0 \quad (2.4)$$

$$Z^* = Z_0 \quad (2.5)$$

角标“\*”表示目标材料,“c”表示合成材料,“i”表示合成材料中的诸组成物质。 $M_i$ 为合成材料中诸组成物质的含量。 $A$ 及 $Z$ 为等效原子量和等效原子序数。 $\rho$ 为物质密度。

由方程(2.2),

$$\rho_0^c = \rho_0^* \quad (2.6)$$

因此,由(2.3)式

$$P_K^c = P_K^* \quad (2.7)$$

所以由(1.1)式

$$E_K^c = E_K^* \quad (2.8)$$

上标 $c$ 和 $*$ 分别表示合成材料和目标材料;下标 $0$ 表示初值。无 $0$ 者为函数任意值,以下皆同。

由(1.5)和(2.7),

$$\gamma^c = \gamma^* \quad (2.9)$$

从而由方程(1.4)

$$P_H^c = P_H^* \quad (2.10)$$

因此由(1.13)式和(1.3)式

$$P_i^c = P_i^* \quad (2.11)$$

$$E_H^c = E_H^* \quad (2.12)$$

(2.11)中 $P_i$ 为等熵压力。

由(2.12)式和(2.8)式, 合成材料和目标材料在冲击波经过它们时, 其热能相同(图1)

$$E_T^* = E_T^*$$

因此由方程(1.18)或(1.20)皆有

$$c_i^* = c_i^* \quad (2.13)$$

最后由方程(1.17)

$$T_H^* = T_H^* \quad (2.14)$$

按照 TF 模型<sup>[1-3]</sup>和三项式状态方程<sup>[4-7]</sup>, 以及原子序数确定价电子之常识(从而(2.4)式和(2.5)式完全使得合成材料与目标材料的零温电子比热系数相同), 由方程(2.4), (2.5), (2.6)至(2.12)可知, 直至极高压下合成材料与目标材料的全部状态量皆相吻合。

总之, 条件方程(2.1)~(2.5)完全保证了所制造的合成材料符合目标材料。如果只研究百万巴压力范围内的问题, 只须用条件方程(2.1), (2.2)和(2.3)就够了。

### 三、等效原子量和等效原子序数方程

现在我们来寻求(2.4)式和(2.5)式中等效原子量 $A$ 及等效原子序数 $Z$ 的方程式。

设合成材(或任何多成份材料)中第 $i$ 种元素的克原子量为 $A_i$ , 原子序数为 $Z_i$ , 又设每克合成材料中此元素含量为 $w_i$ , 则其原子个数为

$$n_i = N \cdot \frac{w_i}{A_i} \quad (3.1)$$

式中 $N$ 为阿伏加德罗常数。由此, 一克合成材料中所含的总原子个数为

$$n = N \sum_{i=1}^K \frac{w_i}{A_i} \quad (3.2)$$

$K$ 为合成材料中所含的元素种数, 以 $A_0$ 表示合成材料的等效克原子量, 则

$$N = n A_0$$

所以

$$A_0 = 1 / \sum_{i=1}^K \frac{w_i}{A_i} \quad (3.3)$$

以 $Z_0$ 表示等效原子序数, 稍加运算即得

$$Z_0 = \sum_{i=1}^K \frac{w_i}{A_i} Z_i / \sum_{i=1}^K \frac{w_i}{A_i} \quad (3.4)$$

若合成材料皆系地质介质或类地质介质(如水泥等)组成, 则

$$w_i = Q_i \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \quad (3.5)$$

(3.5)中 $m_j$ 为合成材料中的第 $j$ 种材料含量。 $x_{ij}$ 为此第 $j$ 种材料中第 $i$ 种元素的氧化物含量。 $Q_i$ 为这种氧化物中第 $i$ 种元素的含量。 $l$ 为合成材料中所含的材料种类数。

而氧含量为

$$w_0 = \sum_{p=1}^H Q_{0p} \sum_{j=1}^l m_j x_{0j} \quad (3.6)$$

式中  $H$  表示氧化物的种类数,  $Q_{0P}$  为诸氧化物中的氧含量. 对地质类介质  $H=K$ , 因此, (3.6) 式又可写成

$$w_0 = \sum_{i=1}^K Q_{0i} \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \quad (3.6)'$$

若用  $\tilde{Q}_i$  代替 (3.5) 中的  $Q_i$  和 (3.6) 式中的  $\sum_{P=1}^H Q_{0P}$ , 用  $\tilde{w}_i$  代替 (3.5) 中的  $w_i$  和 (3.6) 式中的  $w_0$ ,

则 (3.5) 式和 (3.6) 式可统一表示成

$$\tilde{w}_i = \tilde{Q}_i \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \quad (3.7)$$

从而, 由 (3.3) 和 (3.4) 得地质类物质组成的合成材料的等效原子量和等效原子序数为

$$A_e = 1 / \sum_{i=1}^K \frac{1}{A_i} \left( \tilde{Q}_i \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \right) \quad (3.8)$$

$$Z_e = \sum_{i=1}^K \frac{1}{A_i} \left( \tilde{Q}_i \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \right) Z_i / \sum_{i=1}^K \frac{1}{A_i} \left( \tilde{Q}_i \sum_{j=1}^l m_j x_{ij} \right) \quad (3.9)$$

#### 四、结 果

上面的理论可适用于任何状态. 这里所做的两种工程上用的合成材料, 其目标材料的性质给定的是冲击绝热压缩线. 它们分别为

$$\left. \begin{aligned} \text{I. } P_H^* &= \frac{0.26395\eta(\eta-1)}{[1.51(1-\eta)+\eta]^2} \text{ (百万巴)} \\ \rho_0^* &= 2.53 \text{ (克/厘米}^3\text{)} \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{II. } P_H &= \frac{0.22831 \eta(\eta-1)}{[1.401(1-\eta)+\eta]^2} \text{ (百万巴)} \\ \rho_0^* &= 2.62 \text{ (克/厘米}^3\text{)} \\ A^* &= 20.68 \quad Z^* = 10 \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

式中  $\eta = \rho / \rho_0$  为压缩比.

工程要求使用的压力范围为

I. 百万巴量级, II. 千万巴量级

依工程使用目的, 要求对目标材料 I 做出干合成材料和湿合成材料 (为在水内使用) 两种.

当然要达到目标材料规定的条件 (4.1) 和 (4.2), 按条件方程 (2.1) 至 (2.5), 对组份材料的选择是任意的 (要以使用目的而定). 在此依使用对象选取如下的地质材料

I. 水泥和刚玉 ( $Al_2O_3$ )

IA. 水泥、磁铁矿 (A) 和花岗岩 (干合成材料 I)

IB. 水泥、磁铁矿 (B)、花岗岩和水 (湿合成材料 I)

上面诸材料成份列于表 1. 它们的击波关系和初始出度为

$$\left. \begin{aligned}
 &\text{水泥 } D=2.874+1.349u, \rho_0=1.991; \text{ 刚玉 } D=6.956+1.449u \rho_0=3.831 \\
 &\text{磁铁矿(A) } D=4.259+1.368u \quad \rho_0=5.077 \\
 &\text{磁铁矿(B) } D=4.813+1.145u \quad \rho_0=3.918 \\
 &\text{花岗岩 } D=2.952+1.401u, \rho_0=2.62; \text{ 水 } D=3.09+1.164u, \rho_0=1
 \end{aligned} \right\} (4.3)$$

这里 $D$ 和 $u$ 为击波速度和粒子速度，单位是毫米/微秒，出度单位是克/厘米<sup>3</sup>。

首先利用方程 (1.1), (1.2), (1.3), (1.5) 及 (4.1), (4.2) 和 (4.3) 解得目标材料及各组份材料的冷压曲线 $P_K(\eta)$ ，然后利用表 1 中的数据算出(3.8)式及 (3.9) 式中的 $Q_i$ 和 $x_{ij}$ ，最后把(3.8)和(3.9)代入(2.4)和(2.5)，对 $m_i$ 求解方程组 (2.1)至(2.3) (对目标材料 I)和方程组 (2.1) 至 (2.5)(对目标材料 II)，我们得到

$$I. m_c:m_g=0.556:0.444 \quad (4.4)$$

$$II_A. m_c:m_m:m_r=0.12:0.078:0.802 \quad (4.5)$$

$$II_B. m_c:m_f:m_r:m_w=0.11:0.55:0.248:0.092 \quad (4.6)$$

注意， $m_i$  可因特殊需要而事先限定某个量。这里 (4.5) 和 (4.6) 中的 $m_c$ 和 $m_w$ 的数值即工程上预先限定的。

上面 (4.4) 到 (4.6) 中的 $m_c, m_g, m_m, m_f, m_r$ 和 $m_w$ 表示合成材料中的水泥，刚玉，磁铁矿(A)，磁铁矿(B)，花岗岩和水。利用(4.4), (4.5), (4.6), 通过方程(2.3), (2.4), (1.13), (1.17)算得的合成材料的冷压, 冲击绝热压力, 等熵压力, 冲击绝热温度, 格吕乃森系数的结果是满意的。为了比较理论结果和实验结果, 兹将诸压力 ( $P_H, P_K, P_s$ ) 曲线示于图 2~6。把百万巴和千万巴之特定点处的压力偏差列于表 2。其中, 在百万巴处, 合成材料 I 与目标材料的冲击绝热压力偏差为 3.1%, 合成材料 II<sub>A</sub> (干) 和合成材料 II<sub>B</sub> (湿) 与目标材料的冲击绝热压力偏差分别为 1.3% 和 2.4%。在千万巴处, 后二者与目标材料的冲击绝热压力偏差为 2.4% 和 7.9%。它们的冷压和等熵压力的偏差在百万巴范围内皆小于 2.4%。总之, 以文内理论所造的合成材料满足了工程使用的需要。

图 2 和图 3 中的冲击绝热压力实验数据为每个压力点的实验数据的平均值。即在实验中每个压力点放 5 炮, 每炮得 3 个数据, 5 炮共得 15 个数据。取其平均值作为该压力

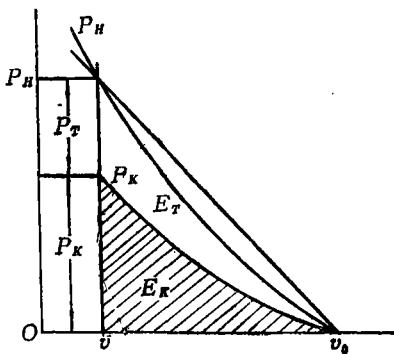


图1 冲激绝热压缩曲线 (图中 $E_0=0$ )

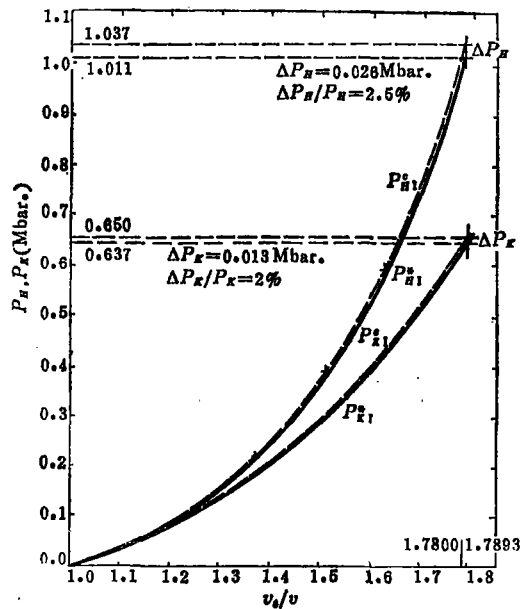


图2 合成材料 I 与目标材料的理论曲线及其实验数据的比较 (x 表示实验数据)

点之测试值。从图2和图3中看出，实验值与理论值是符合的。

对合成材料Ⅱ的计算，利用了下面的三项式状态方程

$$\left. \begin{aligned} P(\eta, T) &= P_K(\eta) + P_n(\eta, T) + P_o(\eta, T) \\ E(\eta, T) &= E_K(\eta) + E_n(\eta, T) + E_o(\eta, T) \end{aligned} \right\} \quad (4.7)$$

方程(4.7)中诸项的含义见文献[4—7]。

在本工作中，方正文，黄秀身，高峰山参加了全部实验。方正文还协助做了些计算。李青山设计了试件模具。张利兴、范振海、张宝川做了所需材料的化学成份分析。320机组的同志热情相助。作者在此向他们表示深切的谢意。

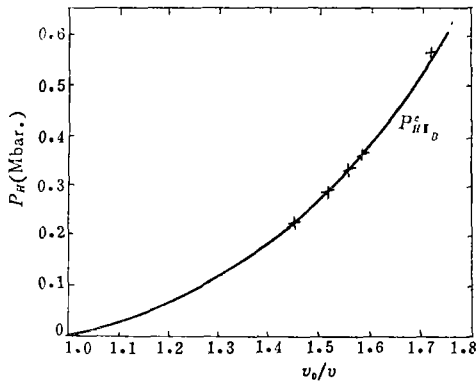


图3 合成材料Ⅱ<sub>B</sub>(湿)的理论值与实验值比较(x为实验数据)

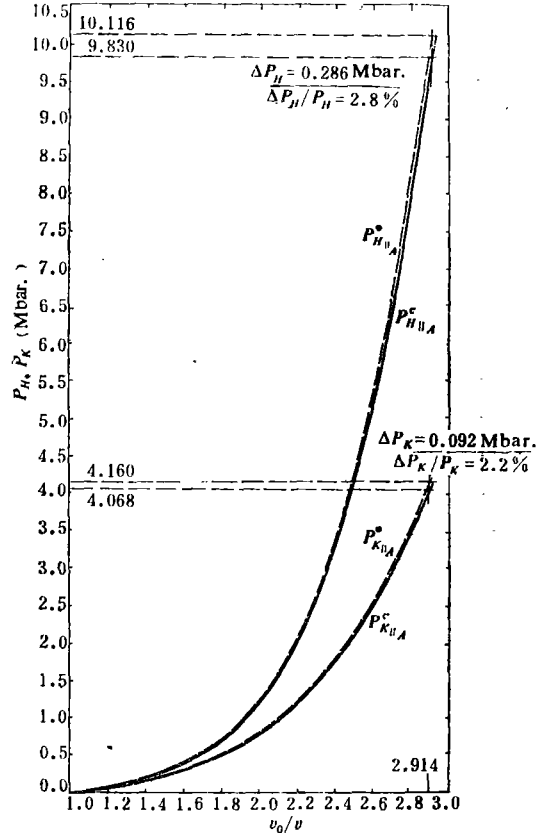


图4 合成材料Ⅱ<sub>A</sub>(干)与目标材料P<sub>H</sub>, P<sub>K</sub>曲线比较

表1. 水泥、磁铁矿、花岗岩的化学成份

成份 材料	SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	MnO	CaO	MgO	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	K <sub>2</sub> O	Na <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O <sup>-</sup>	CO <sub>2</sub>
水泥	25.68	0.35	8.95	6.17	0.32	0.07	48.84	4.60	0.10	0.81	0.59	1.42	0.59	2.30
磁铁矿	6.57	0.05	0.38	73.56	14.76	0.12	0.001	0.008	0.04	0.44	1.60	0.89	0.31	0.89
花岗岩	70.52	0.20	13.77	0.91	2.94	0.12	0.96	1.57	0.08	5.84	3.33	0.25	0.01	0.15

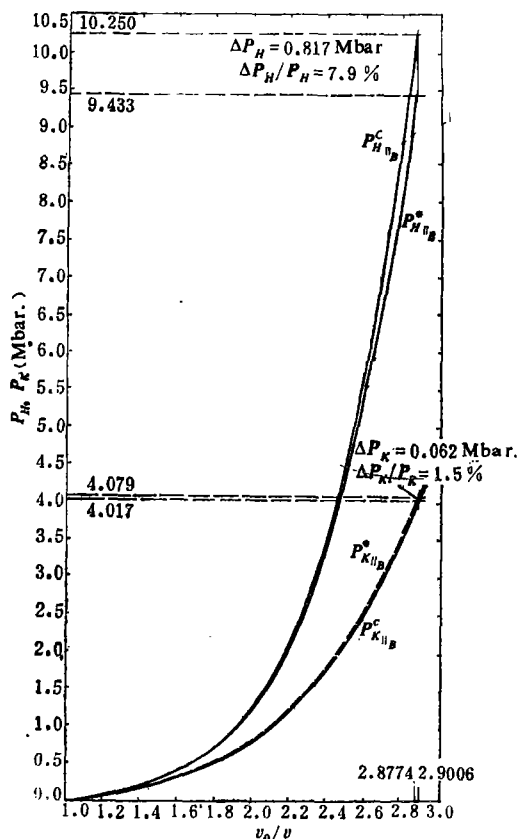


图5 合成材料 II B(湿)与目标材料  $P_H$ ,  $P_K$  曲线比较

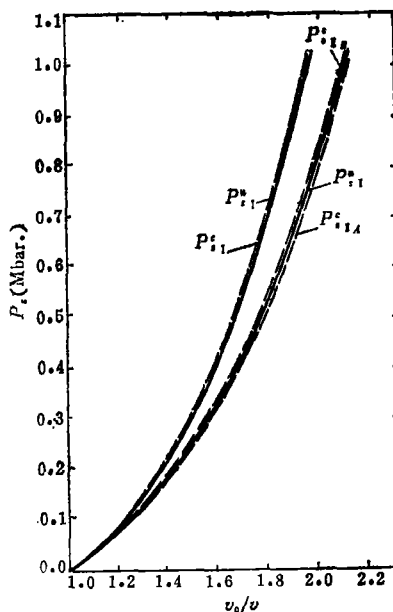


图6 合成材料 I, II 与目标材料等熵压缩线比较

表 2

合成材料与目标材料压力偏差比较 (压力单位Mbar)

材 料	$\eta_H$	$P_H^*$	$P_H^c$	$\Delta P_H/P_H$	$\eta_K$	$P_K^*$	$P_K^c$	$\Delta P_K/P_K$	$\eta_s$	$P_s^*$	$P_s^c$	$\Delta P_s/P_s$
I	1.7800	1.011	1.042	3.1%	1.7800	0.637	0.650	2.0%	1.7922	0.695	0.712	2.4%
I A	1.9229	1.021	1.008	1.3%	2.1249	1.020	1.004	1.6%	2.0887	1.016	1.002	1.4%
	2.9140	10.116	9.830	2.8%	2.9140	4.160	4.068	2.2%	3.2178	5.001	4.890	2.1%
I B	1.9229	1.021	1.045	2.4%	2.1517	1.074	1.063	1 %	2.0887	1.016	1.038	2.2%
	2.8774	9.433	10.250	7.9%	2.9006	4.079	4.017	1.5%	2.2727	1.488	1.531	2.9%

参 考 文 献

[1] Калиткин Н. Н., Модель атома томаса-ферми с квантовыми и обменными поправками, *ЖЭТФ*, 38, 5(1960)1534.

[2] McCarthy, S. L., The Kirzhnits corrections to the Thomas-Fermi equation of state, UCRL-14364

[3] Кнофф, L., Equation of state of matter at ultra-high pressures. *High Pressure Physics and Chemistry*, Ed. by R. S. Bradley Vol. 1, 247

[4] Зельдович Я.Б. и Ю. П. Райзер, *Физика Ударных Волн и Высокотемпературных*



*Гидродинамических Явлений*, глава XI, 533

- [ 5 ] McCloskey, D. J., An analytic formulation of equation of state, AD-412196
- [ 6 ] Альтшулер Л. В., С. Б. Корнер, А. А. Баканова и Р. Ф. Трунин, Уравнения состояния алюминия, меди и свинца для области высоких давлений, *ЖЭТФ* 38,3 (1960), 790
- [ 7 ] Альтшулер Л. В., Применение ударных волн в физике высоких давлений, *Успехи Физических Наук* 85, 2, (1965), 197

## Composition of Composites

Liu Chang-tai

*(North West Institute of Nuclear Technology, Xinjiang)*

### Abstract

For a special material needed in engineering, if it can be predicted on the basis of a certain theory and producing it to use the theory is successful, this is hoped to the use of the engineering. For the aim, the author wants to investigate a proper theory and select a few materials to make a composite which is consistent with an object material given beforehand. In this paper, the theory is given in the preceding three parts, and the results are given in the fourth part. Theoretical calculations were made for the composites of the two object materials given in engineering. Composites are made according to the results of the calculations. The experiment is made yet to the composites. The results of them are satisfied.