

升华能随温度和压力的变化及其 对汽化反冲冲量的影响^{*}

汤文辉, 徐志宏, 牛锦超, 余金虎

(国防科技大学理学院技术物理研究所, 湖南长沙 410073)

摘要:从普适的热力学原理出发, 研究了升华能随温度和压力的变化。结果表明, 升华能随温度或压力的增加而线性减小。采用光滑粒子流体动力学方法对金属铝在脉冲 X 射线辐照下的汽化反冲冲量进行了数值模拟, 考察了升华能的变化对冲量的影响。结果表明, 考虑升华能随温度和压力的变化后, 冲量明显增加。

关键词: 升华能; 汽化反冲; 冲量; 脉冲 X 射线

中图分类号: O434.1

文献标识码: A

1 引 言

当高能脉冲(X 射线、电子束、激光等)辐照在固体表面上时, 由于高能粒子与固体原子的相互作用, 脉冲能量的部分或全部会迅速转移到固体中去, 这就是脉冲的能量沉积。固体表层的状态与能量沉积的大小密切相关。由于能量沉积速度非常快(ns 量级), 如果沉积的能量足够大, 超过固体的汽化能, 固体将直接从固态升华为气态。汽化物质向外喷射, 同时未汽化的固体上产生冲量作用。汽化反冲冲量对于研究材料在脉冲辐照下的动力学响应非常重要, 而冲量的大小与材料的升华能密切相关。

本工作研究了固体升华能随压力和温度的变化关系, 以此为基础, 考察了升华能的变化对冲量的影响。

2 升华能随温度和压力的变化

对于在温度 T 和压力 p 下发生的一级相变, 相变潜热可通过克拉珀龙方程描述

$$\frac{dp}{dT} = \frac{L}{T(v_2 - v_1)} \quad (1)$$

式中: L 为相变潜热, v_1 和 v_2 分别为相变前后的比容。对于升华相变, v_1 为固相比容, v_2 为气相比容。由于气相比容比固相比容大得多, 所以升华能可表示为

$$L = e_s = Tv \frac{dp}{dT} \quad (2)$$

式中: v 即气相比容。这个关系式表明, 升华能的确是随温度和压力相关的。但是, 由于缺少蒸气压数据, 要通过(2)式确定出升华能随温度和压力的变化是非常困难的。下面利用热力学理论来讨论这一问题。在热力学基本微分方程(对 1 摩尔质量的系统)

$$dH = TdS + vd p \quad (3)$$

中引入第二 TdS 方程有

^{*} 收稿日期: 2007-01-08; 修回日期: 2007-03-27

基金项目: 国家自然科学基金(10672180); 高等学校博士学科点专项科研基金(20059998005)

作者简介: 汤文辉(1964—), 男, 博士, 教授, 主要从事高压物理、高能粒子束与物质的相互作用研究。

E-mail: wenhuitang@163.com

$$dH = c_p dT + \left[v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dp = c_p dT + v(1 - \alpha T) dp \quad (4)$$

式中: H 为焓, α 为体膨胀系数, c_p 为定压比热。利用公式(4), 可以得到从任意状态 $x(p_x, T_x)$ 过渡到另一状态 $y(p_y, T_y)$ 时焓的变化为

$$H_y - H_x = \int_{T_x}^{T_y} c_p dT + \int_{p_x}^{p_y} v(1 - \alpha T) dp \quad (5)$$

现在将上式用于固体的升华。设初态 1 的压力为 0, 温度为 0 K, 终态 2 为三相点之下的固体饱和曲线上某一点所表示的饱和固体状态(正要升华的固体), 如图 1 所示。为了计算从状态 1 过渡到状态 2 时焓的变化, 可以沿从 1 到 2 的可逆路径积分, 而最方便的路径是从 1 到 A 和 A 到 2。从 1 到 A 是等温过程, 从 A 到 2 是等压过程, 于是

$$H_2 - H_1 = \int_0^p v(1 - \alpha T) dp + \int_0^T c_{2p} dT = \int_0^p v dp + \int_0^T c_{2p} dT$$

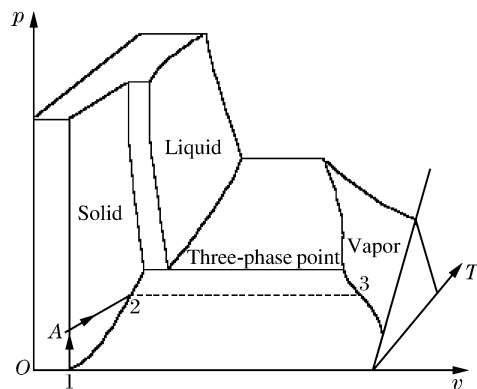


图1 物质的 p - v - T 曲线

Fig. 1 The p - v - T curves of matter

因此

$$H_2 = \int_0^T c_{2p} dT + \int_0^p v dp + H_1 \quad (6)$$

式中: c_{2p} 是固体在压力 p 时的定压比热, 它对压力的变化并不敏感, 所以计算中可取常压值。

下面计算饱和蒸气的焓。因为

$$c_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

假定饱和蒸气为理想气体, 则其焓只是温度的函数

$$H_3 = \int_0^T c_{3p} dT + H_{30} \quad (7)$$

式中: H_{30} 是饱和蒸气在 0 K 时的焓, c_{3p} 是蒸气的定压比热。

现在假设固体在温度 T 和压力 p 时发生升华, 这一过程对应图 1 中从状态 2 转变到状态 3 的情况, 于是升华能为

$$L = e_s = H_3 - H_2 = \int_0^T c_{3p} dT - \int_0^T c_{2p} dT - \int_0^p v dp + H_{30} - H_1 \quad (8)$$

这就是升华能与温度和压力之间的关系式。当温度和压力都很小时, 3 个积分项都趋于 0, 这时的升华能 ($e_{s0} = H_{30} - H_1$) 为 0 K 时的升华能, 这个数据在一些物性数据表中可查出(例如文献[1])。

在静态问题中, 蒸气压一般都非常小, 公式(8)中对压力的积分项可以忽略, 这时有

$$L = e_s = \int_0^T c_{3p} dT - \int_0^T c_{2p} dT + H_{30} - H_1 \quad (9)$$

这就是所谓的基尔霍夫方程。

在强脉冲 X 辐射条件下, 材料表层将在很短的时间内(ns 量级)吸收大量能量, 温度和压力迅速升高。当吸收的能量超过升华能时, 表层材料将直接从固态升华为气态, 其压力和温度同时迅速升高, 这时(8)式中对压力的积分项不能忽略, 所以基尔霍夫方程并不适合高温高压情况。由于脉冲能量沉积导致的温升很快, 固体发生升华转变时的压力并不很高, 如果用 Murnaghan 方程描述压力与比容的关系, 则压力积分项可表示为

$$f \equiv \int_0^p v dp = \frac{An}{\rho_0(n-1)} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{n-1} - 1 \right] \quad (10)$$

式中: A 和 n 为 Murnaghan 方程中的常数。通过数值分析后发现, 积分量 f 与压力之间呈现很好的线

性关系,并可表示为 p/ρ_a , 其中 ρ_a 为零压密度与压力 p 时密度的平均值。因此可以得到以下结果:对于金属等升华为单原子分子气体的情况, $c_{3p}=2.5R/M$, $c_{2p}=3R/M$ (R 为普适气体常数, M 为摩尔质量), 升华能与温度和压力的关系可表示为

$$e_s \approx e_{s0} - \frac{R}{2M}T - \frac{p}{\rho_a} \quad (11)$$

对于双原子分子固体升华为双原子分子气体的情况,若温度足够高,转动和振动自由度都激发,则 $c_{3p}=4.5R/M$, 而双原子分子固体的比热容为 $c_{1p}=6R/M$ [2], 于是(8)式可表示为

$$e_s \approx e_{s0} - \frac{3R}{2M}T - \frac{p}{\rho_a} \quad (12)$$

可以看出,固体的升华能随温度升高或压力的增大而线性减小。

3 升华能的变化对汽化反冲冲量的影响

当强脉冲 X 射线与固体相互作用时,固体表层将发生汽化反冲,并在固体内部形成热击波。本研究采用光滑粒子流体动力学方法(简称为 SPH 方法)对这一动力学过程进行数值模拟。SPH 方法是一种无网格的 Lagrange 粒子方法,适合于大变形问题,但目前仍在发展之中[3-4]。我们在文献[5]的基础上对 SPH 方法进行了改进,并得到了验证[6]。在数值计算中,总的汽化反冲冲量可表示为所有汽化反向运动物质的冲量之和[7],即

$$I = \sum_j m_j u_j \quad (13)$$

式中: m_j 为第 j 个汽化了的粒子的质量, u_j 为相应粒子的速度。

设脉冲 X 射线为 1 keV 黑体谱和 3 keV 黑体谱两种情况,辐照量 Φ_0 分别为 200、300 J/cm², 时间谱为底宽 40 ns 的等腰三角形。铝的升华能分两种情况,一种是取常数值不变,另一种情况则是随温度和压力而变化。

计算得到 1 keV 黑体谱辐照铝靶时冲量随时间的变化规律如图 2、图 3 所示, 3 keV 黑体谱辐照铝靶时冲量随时间的变化规律如图 4、图 5 所示,其中实线对应升华能 e_{s0} 取常数值 11.923 kJ/g 时的情况,虚线对应升华能按公式(11)随温度和压力而变化的情况。

从图 2、图 3 可以看出,其它条件不变,如果考虑升华能随温度和压力的变化,铝靶表面的汽化反冲冲量明显增加,其稳定值增加了 10% 以上。随辐照量的增大,两种升华能情况下的冲量差别呈减小趋势。但当能谱变硬以后,升华能的变化对冲量的影响更大。可见,考虑升华能随温度和压力的变化对于汽化反冲冲量的计算非常必要。

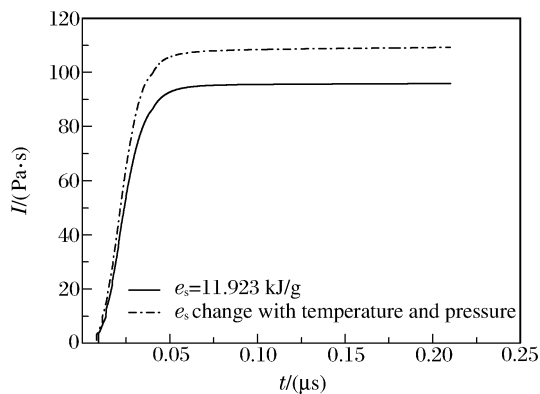


图 2 1 keV 黑体谱、辐照量为 200 J/cm² 时的冲量
Fig. 2 The blow-off impulse induced by pulsed X-ray irradiating on aluminum, of which the energy spectrum is 1 keV blackbody spectrum, and the flux density is 200 J/cm²

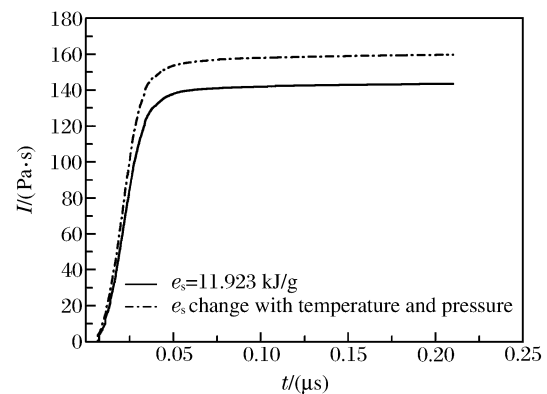


图 3 1 keV 黑体谱、辐照量为 300 J/cm² 时的冲量
Fig. 3 The blow-off impulse induced by pulsed X-ray irradiating on aluminum, of which the energy spectrum is 1 keV blackbody spectrum, and the flux density is 300 J/cm²

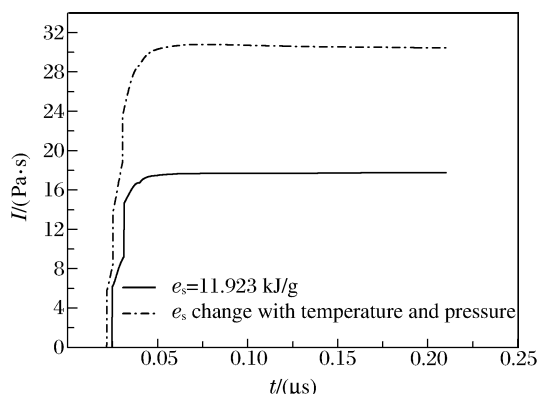


图4 3 keV黑体谱、辐照量为 200 J/cm^2 时的冲量
Fig. 4 The blow-off impulse induced by pulsed X-ray irradiating on aluminum, of which the energy spectrum is 3 keV blackbody spectrum, and the flux density is 200 J/cm^2

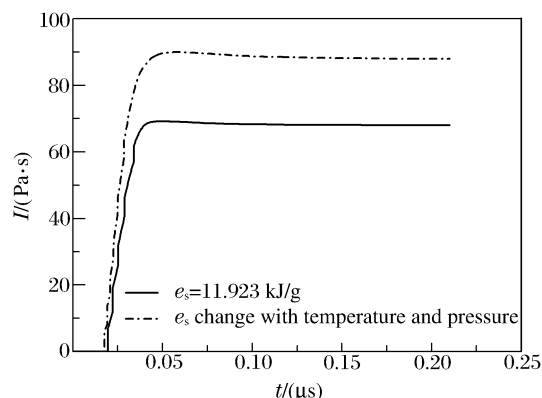


图5 3 keV黑体谱、辐照量为 300 J/cm^2 时的冲量
Fig. 5 The blow-off impulse induced by pulsed X-ray irradiating on aluminum, of which the energy spectrum is 3 keV blackbody spectrum, and the flux density is 300 J/cm^2

4 结 论

本研究从普适的热力学原理出发,研究了升华能随温度和压力的变化,采用 SPH 方法对金属铝在脉冲 X 射线辐照下的汽化反冲冲量进行了数值模拟,得到了以下主要结果:

(1) 固体物质的升华能随温度或压力的增加而线性减小。

(2) 升华能的不同取值对材料在脉冲 X 射线辐照下的汽化反冲冲量有重要影响。当考虑升华能随温度和压力的变化时,冲量明显增加。

References:

- [1] 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.
- [2] Tang W H, Zhang R Q. Introduction to Theory and Computation of Equations of State [M]. Changsha: National University of Defense Technology Press, 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.
- [3] Monaghan J J. SPH without a Tensile Instability [J]. J Comput Phys, 2002, 159: 290-311.
- [4] Parshikov A N, Medin S A. Smoothed Particle Hydrodynamics Using Interparticle Contact Algorithm [J]. J Comput Phys, 2002, 180: 358-382.
- [5] Parshikov A N, Medin S A, Loukashenko I I, et al. Improvements in SPH Method by Means of Interparticle Contact Algorithm and Analysis of Perforation Tests at Moderate Projectile Velocities [J]. Int J Impact Eng, 2000, 24: 779-796.
- [6] Xu Z H, Tang W H. A Modified SPH Method Based on Riemann Solution [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2006, 23(6): 713-716. (in Chinese)
徐志宏, 汤文辉. 基于黎曼解的一种改进用算法 [J]. 计算物理, 2006, 23(6): 713-716.
- [7] Zhao G M, Zhang R Q, Tang W H. The Blowoff Impulse on Material due to Pulsed X-Ray Radiation [J]. Explosion and Shock Waves, 1996, 16(3): 259-265. (in Chinese)
赵国民, 张若棋, 汤文辉. 脉冲 X 射线辐照材料引起的汽化反冲冲量 [J]. 爆炸与冲击, 1996, 16(3): 259-265.

The Sublimation Energy versus Temperature and Pressure and Its Influence on Gasifying Blow-off Impulse

TANG Wen-Hui, XU Zhi-Hong, NIU Jin-Chao, SHE Jin-Hu

(*Institute of Technical Physics, College of Science, National University of
Defense Technology, Changsha 410073, China*)

Abstract: The dependence of the sublimation energy on temperature and pressure was studied based on universal thermodynamics. The result shows that the sublimation energy decreases linearly with the increasing temperature or pressure. The blow-off impulse of aluminum induced by pulsed X-ray was simulated by smoothed particle hydrodynamics (SPH) method, and the influence of sublimation energy on impulse was discussed. In contrast to the situation that sublimation energy is a constant, the numerical result shows that the blow-off impulse of aluminum will increase obviously if the change of sublimation energy with temperature and pressure is considered.

Key words: sublimation energy; blow-off; impulse; pulsed X-ray

《高压物理学报》征稿简则

《高压物理学报》是我国高压物理领域唯一的专业性学术刊物,在国内外公开发刊。力求及时报道高压物理学科基础理论和应用研究方面具有创新性、高水平、有重要意义的研究成果,读者对象为国内外科技工作者。征稿内容为动态及静态高压技术,人工合成新材料,高温高压下材料的力学、光、电、磁等特性以及物质微观结构的研究,动态及静态高压研究中的测试技术,高温高压下的相变,高温高压物态方程等。接受中、英文稿件。

1. 来稿应具有科学性、先进性和实用性,论点明确、论据可靠、数据准确、逻辑严谨、文字简练、图表清晰。每篇论文的篇幅应在 6 000~8 000 字以内,请使用中华人民共和国法定计量单位。论文格式请参考近期出版的《高压物理学报》。请使用电子邮件投稿(gaoya@caep.ac.cn),也可提供软盘。

2. 所投稿件不得涉及国家及本单位机密,投稿时请附本单位保密审查意见,由审查者签名并加盖公章。

3. 文章标题字数应在 20 字以内。文中图、表应有自明性,所有图题、图注、表题、表注均为中、英文对照,图、表中的文字一律用英文。

4. 第一作者应确保全体作者同意文章署名,需提供第一作者、通讯作者简介(姓名、出生年、性别、职称、学位、研究方向等),以及所有联系方式(通信地址、邮政编码、电话号码、传真、电子邮箱等),以备联系。请注明论文(工作)的资助项目(资助项目名称和批准号),简要介绍工作背景和论文意义。

5. 来稿应保证文章版权的独立性,严禁抄袭,文责自负,请勿一稿多投。

重点注意事项

▲ **中英文摘要** 摘要用第三人称书写,语言要简练,应有具体内容。要求:(1) 拥有与论文同等量的主要信息,重点包括 4 个要素:即研究目的、方法、结果和结论。(2) 以提供论文梗概为目的,不得评论、解释论文内容。中文摘要应在 200~400 个字之间,英文摘要不少于 120 个实词。为便于 Ei Compendex 以及国外其它数据库收录,英文摘要中尽量避免特殊字符(各种数学符号、上下脚标及希腊字母)及由特殊字符组成的数学表达式;第一句不要与英文题名重复;尽量用短句子并避免句形单调;用过去时态叙述主要工作,用现在时态叙述结论,尽量用主动语态代替被动语态。

▲ **参考文献** 参考文献应是公开出版物。请充分著录参考文献,引用条数不宜太少,并尽量引用近期国内外文献,采用“顺序编码制”著录。中文参考文献必须附英译文,著录项目应齐全。

▲ **版权与稿酬** 《高压物理学报》已加入《中国学术期刊(光盘版)》、万方数据库、中文科技期刊数据库、中国期刊网、数字化科技期刊群、台湾中文电子期刊服务——思博网(CEPS)等,并被 Ei Compendex 光盘收录。凡经本刊录用的稿件,其著作权(包括光盘版和网络版版权)便自动转让给《高压物理学报》编辑部,编辑部不再另行通知。来稿一经发表,即付稿酬(包括光盘版和网络版稿酬)。

《高压物理学报》一贯秉承服务科学、服务读者、服务作者的办刊理念,慎重对待每一篇来稿,尊重作者劳动。优秀稿件享有快速发表通道,重大创新性成果可在 3 个月内刊出。

通信地址:四川绵阳 919 信箱 110 分箱《高压物理学报》编辑部,邮政编码:621900

电子邮件:gaoya@caep.ac.cn(投稿、征订、咨询)

电 话:(0816)2490042; 传真:(0816)2282695

《高压物理学报》编辑部