

z 切 LiTaO_3 单晶的冲击相变研究^{*}

李 俊 周显明[†] 李加波 李赛男 祝文军 王 翔 经福谦

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波与爆轰物理重点实验室, 绵阳 621900)

(2006 年 11 月 2 日收到, 2007 年 6 月 29 日收到修改稿)

利用二级轻气炮加载下的冲击 Hugoniot 线(冲击波速度 D -粒子速度 u 关系)和粒子速度剖面测量, 结合基于密度泛函理论的平面波赝势计算研究了 z 切 LiTaO_3 单晶的高压相变. 实验发现, D - u 关系在 $u = 0.95 \text{ km/s}$ 附近出现明显拐折, 实测波剖面中 25.9 GPa 和 32.6 GPa 时观测到弹-塑性双波结构, 而终态压力为 42.7 GPa 和 53.0 GPa 时则为三波结构. 上述结果都清楚地表明 z 切 LiTaO_3 单晶冲击相变的发生, 相变起始压力约为 37.9 GPa. 同时, 理论计算的菱形相($R3c$ 对称群)压缩线与低压实验数据符合较好, 而正交相($P6mm$ 对称群)压缩线则与扣除热压贡献的高压实验数据相符, 由此推断 z -切 LiTaO_3 的高压相为正交结构. 从实验和理论上澄清了 z 切 LiTaO_3 的相变起始压力和高压相晶体结构的认识, 研究工作亦对类似单晶材料的冲击相变研究有参考价值.

关键词: z -切 LiTaO_3 , 冲击诱导相变, 冲击波实验, 第一性原理计算

PACC: 6470, 6250, 7115

1. 引 言

冲击相变是目前冲击波物理研究中的一个热点课题, 它能够探索和揭示物质在高温高压下结构和物态变化的临界现象和规律, 在材料科学、地球物理等领域中具有重要的科学意义, 如合成新的高性能材料, 认识地球内部结构等. 同时武器材料在高温高压过程中也可能发生相变和熔化等现象, 因此描述和理解物质的冲击相变特性对武器的精密设计也是十分重要的.

LiTaO_3 晶体是一种重要的功能材料, 由于存在较大的电光和非线性光学系数, 在超晶格光学、电光、压电、声表面波(SAW)和红外热释电器件等方面^[1-5]有重要用途, 认识它的高压物性有助于进一步提升其功能用途. 同时, 它也是研究结构相变的典型材料^[5], 有关它的铁电相变特性已有较多研究报道^[6-10], 而在高压结构相变方面则存在认识上的分歧^[11-15].

早期 Stanton 等^[12]通过高速平板撞击实验结合速度干涉仪系统测量了 z 切 LiTaO_3 在压力范围 6 GPa—28 GPa 内的冲击压缩特性, 得到雨贡纽弹性

极限(HEL)约为 4 GPa, 并认为冲击相变发生在 19 GPa 附近. 但 Stanton 等的实验数据较少(仅 4 个压力点), 可能尚未达到冲击相变的压力范围. 后来 Lin 等^[13]通过静压金刚石压砧(DAC)实验结合 Raman 光谱观测认为, 当压力高于 33.2 GPa 时 LiTaO_3 会转变为非晶态, 且在 35 GPa 后相变是不可逆的, 这一相变压力得到了 Suzuki 等^[14]的实验证实. 但最近 Zhang 等^[15]通过静压 X 射线衍射(XRD)和 Raman 光谱测量却认为, 压力至 36 GPa 初始相仍能保持稳定, 这与早期报道并不一致, 而由于加载条件的限制未能达到更高压力, 因此是否发生相变尚不清楚. Mukaide 等^[16]对 LiTaO_3 同构体 LiNbO_3 的静压研究表明: 加压至 25 GPa 时出现一个室温高压相, 衍射数据可用 NaIO_3 结构($P6mm$ 对称群)来拟合; 继续加压至 30 GPa 后加温至 850 K 则出现另一个高温高压相, 结构具有类似于 $P6_3$ 空间群的六角对称性. 他们提出 LiTaO_3 的高压相变特性应与 LiNbO_3 基本类似, 但仍缺乏直接的实验和理论证实. 由此可见, 对于 LiTaO_3 的高压相变起始压力至今仍存在疑虑, 有关相变后的晶体结构是否与 LiNbO_3 高压相相同也不清楚.

本文采用高速平板撞击实验, 通过测量 26

^{*} 中国工程物理研究院科学技术基金(批准号 20050102)资助的课题.

[†] E-mail: xianming_zhou@tom.com

GPa—227 GPa 压力范围内的 z 切 LiTaO_3 单晶的冲击 Hugoniot 曲线和速度波剖面,并结合基于密度泛函理论的平面波赝势(DFT-PWP)计算,以确定出 LiTaO_3 的冲击相变起始压力及其高压相结构类型.

2. 实验方法

2.1. 样品和实验装置

LiTaO_3 单晶试样由山东中晶光电子公司提供,采用提拉法工艺生长,光学级纯(杂质含量低于 0.1% wt),常态下呈无色透明,初始密度 7.46 g/cm^3 ,结晶方向为 0001 方向.样品直径 30 mm,厚度 8 mm,两端面垂直于 z 轴方向切割,并作光学抛光(表面粗糙度小于 $0.2 \mu\text{m}$),常态超声测量结果列于表 1 中.

表 1 z 切 LiTaO_3 超声测量数据

纵波声速 $C_L/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	横波声速 $C_S/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	体波声速 $C_B/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	剪切模量 G_0/GPa	体积模量 K_B/GPa	泊松比 ν
6.160	3.568	4.581	95.01	156.7	0.248

在二级轻气炮(发射管口径 32 mm)上采用高速平板撞击实验产生冲击加载,实验弹速范围为 2—6 km/s,飞片击靶速度 w 由气炮发射口的磁测速系统进行测量,相对不确定度小于 0.5%.为获得不同加载压力,选用 LY12 铝(Al 2024)、无氧铜、钨合金(93W)等不同冲击阻抗材料作为飞片,飞片直径 30 mm、厚度 6 mm,以确保 LiTaO_3 的测试区域不受样品边侧稀疏和飞片后界面追赶稀疏波的影响.同时选用光学 LiF 晶体作窗口材料,其良好的冲击透明性可保持至 200 GPa^[17],窗口直径 25 mm、中心厚度约 10 mm,加工成后端面为 3° 斜角的楔形.实验相关材

料的物理参数列于表 2,表中 ρ_0 , C_0 , λ 和 γ_0 分别为初始密度、冲击波-粒子速度线性关系 $D = C_0 + \lambda u$ 中的两个系数、常态 Grüneisen 系数和比定容热容.

表 2 材料 Hugoniot 参数

材料	$\rho_0/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$C_0/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	λ	γ_0
93W ^[18]	17.63	4.008	1.277	1.277
Cu ^[19]	8.935	3.933	1.500	2.0
HR3(304 steel) ^[18]	7.816	4.580	1.490	2.2
Fe ^[18]	7.853	3.955	1.580	1.9
Sr ^[18]	7.290	2.610	1.490	2.1
Al 2024 ^[19]	2.784	5.370	1.290	2.0
LiF ^[20]	2.640	5.148	1.353	1.63

LiTaO_3 的冲击 Hugoniot 测量采用可测量任意反射面的速度干涉仪(VISAR)结合多通道辐射高温计的联合诊断技术,实验装置如图 1 所示. LiTaO_3 前端面粘贴铝箔,以避免弹丸前压缩气体的发光对样品光辐射产生干扰;后端面压贴 LiF 窗口,从侧面用环氧树脂粘接.样品与窗口之间夹压小片铝箔($17 \mu\text{m}$),以反射 VISAR 测试激光(中心波长 532 nm);VISAR(条纹常数 $234 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{Fr}^{-1}$)和高温计(时间分辨力约 3 ns)测试光路共用同一组透镜探头,中心为 VISAR 测试光纤,四周布置高温计测试光纤,两者间距约为 4 mm 以避免样品光辐射信号与 VISAR 测试激光的相互干扰;实测信号波形均由高速数字储存示波器记录 and 测量.实验中由于高温计和 VISAR 系统使用的光电转换器件和传输光纤长度并不相同,因此每次实验前都需要对两套诊断系统的传输和响应时间差异进行标定.图 1 的虚框部分是采用 532 nm 纳秒激光器对上述系统进行时间标定的测试框图,典型的标定波形见内插图.

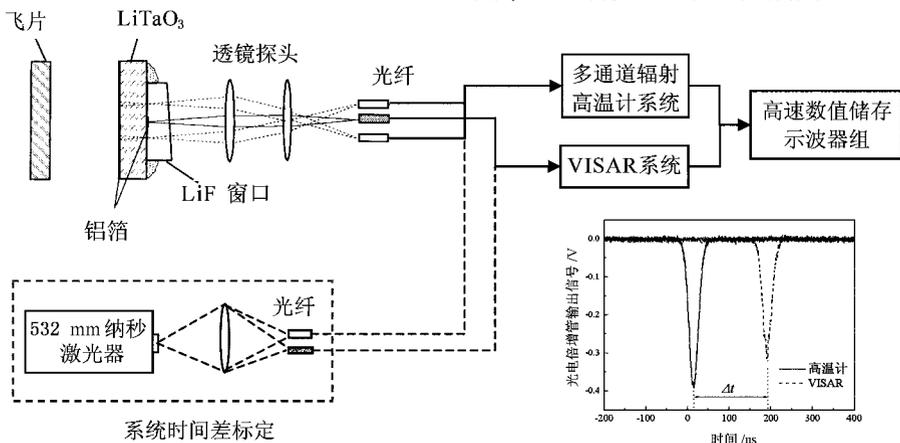


图 1 实验装置及测量系统示意图

2.2. 实验原理

根据冲击相变测量的原理,当受冲击压缩样品发生相变且进入混合相区时,由于塑性冲击波(P_1 波)波速一般大于相变冲击波(P_2 波),从 VISAR 测量的样品/窗口速度剖面中可观测到相变发生时的多波结构(包括弹性先驱波 EP),但该测量结果却无法给出冲击波进入样品的起始时刻.而从高温计测量中,由于 P_1 波扫过后样品压缩层立刻变为不透光,利用光谱辐射亮度历史虽然可以直接判读出冲击波到达样品的起始时刻和 P_1 波在样品中的传播时间,但却无法观测到速度更慢的 P_2 波(见图 2),因此实验中采用 VISAR 结合多通道辐射高温计的联合测量技术.从光辐射历史中直接获取冲击波进入样品的起始时刻 t_1 ,再结合 VISAR 波剖面上各波的到达时刻进行系统时间关联后,计算出 EP、 P_1 和 P_2 波的波速 C_1 、 D_1 和 D_2 ;对应的粒子速度则从原位粒子速度剖面上直接判读^[21].

图 2 为一发典型实验波形,其中 A 点为冲击波到达样品前端面时刻引起光强信号的急剧上升;C 点为 P_1 波到达样品/窗口界面卸载导致辐射光强的截止,恰好与波剖面上 P_1 波引起粒子速度上升的时刻对应;BC 段光信号出现先略微下降后明显上升的幅度变化可通过一维波动理论的波系近似分析进行解释.图 3 是冲击波与样品/窗口界面相互作用的 $x-t$ 图,在实验压力下,设样品的冲击波由左向右传播,当弹性先驱波 EP 波到达界面(或自由面)后立刻会向样品中反射一个左行中心稀疏波(c_1 波); c_1 波与随后的 P_1 波迎面相遇造成了冲击波强度的略微下降,对应于图 2 中 B 点光强幅度的略微下降;同时又反射回一右行稀疏波(c_2 波), c_2 波传至界面后再反射回一左行弹性压缩波,使样品受到二次压缩引起光辐射信号增强,之后以此反复在 P_1 波阵面与界面之间形成多次反射的复杂波系.由此不难导出 P_1 波波速表达式为

$$D_1 = \frac{h - C_1(t'_2 - t_2)}{h + C_1(t'_2 - t_2)} \cdot C_1, \quad (1)$$

式中 h 为样品初始厚度, $C_1 = C_1 \cdot \rho_0 / \rho_{\text{HEL}}$ 为第一次左行反射稀疏波速度, t_2 为 EP 波到达界面时刻, t'_2 为 B 点时刻.

从上述波系的近似分析可知,当 P_1 波到达界面后也会对随后的 P_2 波产生影响,但由于高温计测量

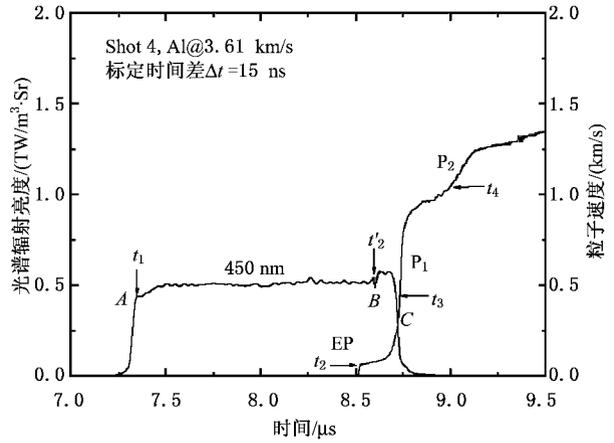


图 2 典型实验波形

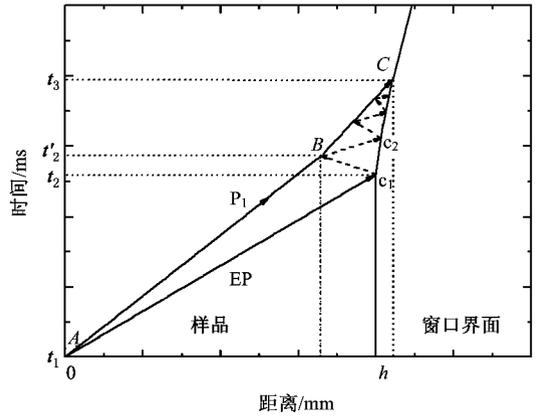


图 3 波系相互作用的 $x-t$ 图

中无法得到 P_1 波反射物与 P_2 波的相遇时刻,因此根据文献[22]的计算方法(忽略反射波的波系影响),可得 P_2 波波速为

$$D_2 = \frac{h + u_{\text{IF1}}(t_3 - t_2) + u_{\text{IF2}}(t_4 - t_3)}{t_4 - t_1}, \quad (2)$$

式中 u_{IF1} 为由 EP 波引起的界面运动速度, u_{IF2} 为由 P_2 波引起的界面运动速度. t_3 、 t_4 分别为 P_1 、 P_2 波到达界面的时刻.

而当实验冲击压力高于相变终点压力时,样品中冲击波并不存在多波结构,可由样品的光辐射历史直接判定冲击波到达前后端面的时刻,并结合样品初始厚度 h 得到 P_2 波为

$$D_2 = h(t_4 - t_1). \quad (3)$$

得到实测 D 、 u 数据后,根据 Rankine-Hugoniot 方程可计算出 LiTaO₃ 的相变起始压力 P_{PT} ,冲击终态压力 P_{H} 和比容 V 等^[23].

3. 计算方法

基于密度泛函理论框架的从头算方法已成功用于模拟许多不同材料的结构特性、能带结构、态密度和光学特征等性质^[24-25], 计算结果不但可预测物质结构的变化, 同时也可以辅助实验信息的解读.

本文采用基于密度泛函理论框架的平面波赝势(PWP)结合局域密度近似(LDA)的从头算方法, 计算了 LiTaO₃ 的冷压曲线 ($P-V/V_0$) 和零温焓 ($H-P$). 交换关联函数为 LDA-CA-PZ^[26], 电子和离子间的相互作用采用范数守恒赝势, 几何优化算法为 BFGS^[27] 算法, 精度控制条件为能量偏差 1.0×10^{-5} eV/atom, 最大力偏差 0.3 eV/nm, 最大应力偏差 0.05 GPa, 最大位移偏差 0.0001 nm. 平面波截止能 E_{cutoff} 取 550 eV, 布里渊区的 K 点网格设置为 $6 \times 6 \times 6$, 参与计算的价态电子包括 Li 的 s 态, O 的 s, p 态和 Ta

的 s, p, d 态. 计算时首先对晶胞参数进行零压结构优化, 再采用固定压力松弛晶格中所有原子和晶胞参数的方法得出系列不同静水压下的晶胞体积和对应能量, 最后根据三阶项 Birch-Murnaghan 物态方程

$$P = \frac{3}{2} k_0 [(v/v_0)^{-7/3} - (v/v_0)^{-5/3}] \times \left\{ 1 + \frac{3}{4} (k'_0 - 4) [(v/v_0)^{-2/3} - 1] \right\} \quad (4)$$

对计算结果进行最小二乘法拟合即得到零温压缩线.

参照同构体 LiNbO₃ 的高压相结构^[16], 零温计算中考虑了 LiTaO₃ 的三种结构类型: 菱形结构 ($R3c$ 对称群, 室温大气压相), 六角结构 (D_6^h 对称群) 和正交结构 ($Pbnm$ 对称群). 菱形相的初始晶体结构取自文献^[28], 而正交相和六角相的初始设置分别参照 NaIO₃ 晶体^[29] 和 LiIO₃ 晶体^[30] 的结构数据, 计算的晶胞结构如图 4 所示.

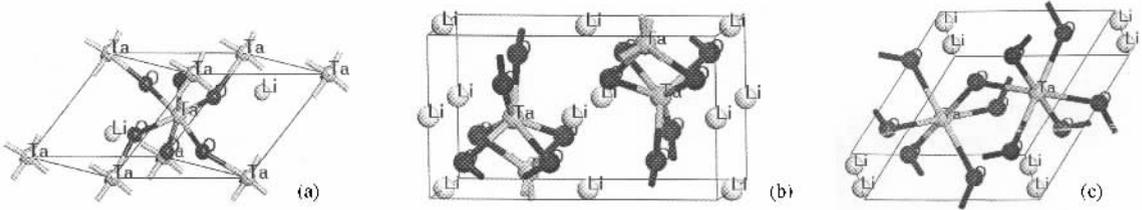


图 4 计算的 LiTaO₃ 晶胞结构 (a) 菱形结构 (b) 正交结构 (c) 六角结构

4. 结果与讨论

在中国工程物理研究院的二级轻气炮上共完成

12 发冲击实验, 对应压力范围为 25.9 GPa—226.7 GPa, 其中实验编号 1—4 为 VISAR 与高温计联合测量, 其余为高温计测量. 实测 Hugoniot 数据列于表 3 中.

表 3 z 切 LiTaO₃ 冲击 Hugoniot 测量结果

实验编号	飞片/基板	$w/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	EP 波			P_1 波			P_2 波		
			$D/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	$u/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	P_H/GPa	$D/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	$u/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	P_H/GPa	$D/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	$u/\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	P_H/GPa
1	Al/—	2.17	6.10	0.064	2.91	5.19	0.671	25.9	—	—	—
2	Al/—	2.55	6.15	0.065	2.98	5.26	0.820	32.6	—	—	—
3	Al/—	3.61	6.17	0.063	2.90	5.26	0.948	37.8	4.53	1.240	42.7
4	Cu/—	2.76	6.11	0.058	2.65	5.28	0.946	38.0	5.03	1.419	53.0
5	Sn/—	3.72	—	—	—	—	—	—	5.55	1.77	73.4
6	Al/—	5.71	—	—	—	—	—	—	6.16	2.15	98.9
7	Fe/Sn	4.14	—	—	—	—	—	—	6.25	2.23	103.8
8	Cu/Fe	4.18	—	—	—	—	—	—	6.45	2.33	112.2
9	HR ₂ /Fe	4.81	—	—	—	—	—	—	6.82	2.64	134.5
10	Cu/Fe	5.22	—	—	—	—	—	—	7.34	2.87	157.4
11	93W/Fe	4.49	—	—	—	—	—	—	7.46	2.98	166.0
12	93W/Fe	5.47	—	—	—	—	—	—	8.36	3.63	226.7

根据实测信号波形, 图 5 给出了不同压力下样品

的粒子速度波剖面, 为清楚起见图中时间坐标已作

归一化和无量纲处理. 可见, 当冲击压力为 25.9 GPa 和 32.6 GPa 时, 实测波剖面为弹性先驱波以及随后塑性冲击波的双波结构. 而在终态压力为 42.7 GPa 和 53.0 GPa 的两发实验波形中则观测到明显的三波结构, 即弹性先驱波 EP、塑性冲击波 P₁ 和相变冲击波 P₂. P₁ 波将冲击压力带至相边界, 随后 P₂ 波使 LiTaO₃ 进入新相. 在 42.7 GPa 的实验波剖面中, P₂ 波与 P₁ 波之间没有明显分界而呈斜坡状缓慢爬升(约 100 ns 数量级) 则是由有限相变速率所致^[31-32], 即相的转变并非瞬间完成的.

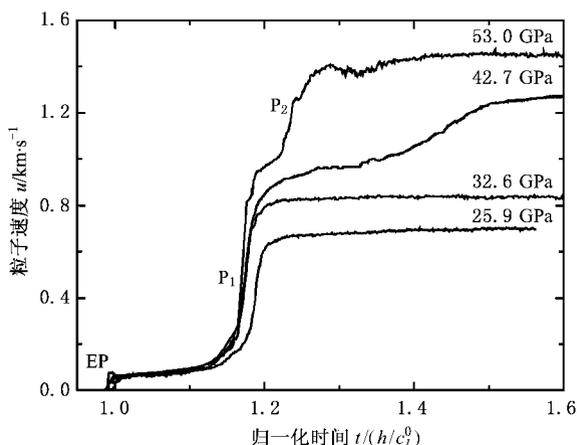


图 5 实测样品粒子速度剖面

样品冲击波-粒子速度 ($D-u$) 关系及其与文献数据^[12]的比较如图 6 所示. 图中 HEL 所示弹性先驱波波速平均值为 6.12 km/s, 与超声测量的纵波声速吻合. 当 $u < 0.95$ km/s 时, 我们实测冲击波速度与文献^[12]的最高点数据相符; 而文献^[12]中两个最低点的冲击波速度偏低, 目前一种合理解释是由于脆性材料在 HEL 之后产生剪切强度的明显下降或完全丧失所致^[33], 而不是由冲击相变引起的 $D-u$ 曲线拐折, 该现象在类似脆性材料中是普遍存在的, 在 LiNbO₃, Gd₃Ga₅O₁₂, MgO, SiO₂ 等脆性晶体的冲击测量中均观测到在 HEL 之后冲击波速度的异常偏低^[34-37].

当 $u > 1.25$ km/s 时, Hugoniot 数据的线性拟合关系为 $D = 2.748 + 1.577u$. 可见高、低压段两部分数据之间存在明显突变, 这是 LiTaO₃ 单晶发生冲击相变的另一明确实验证据, 实测冲击相变起始点 (PT) 对应的 D, u 平均值分别为 5.26 km/s 和 0.948 km/s.

根据相变热力学理论, 在固定的温度 T 和压力 P 下物质的最稳定相应具有最低的吉布斯自由能 $G(T, P) = E + PV - TS$, 而该条件下物质的其它所有结构相最终都会转变为最稳定结构, 因此通过零

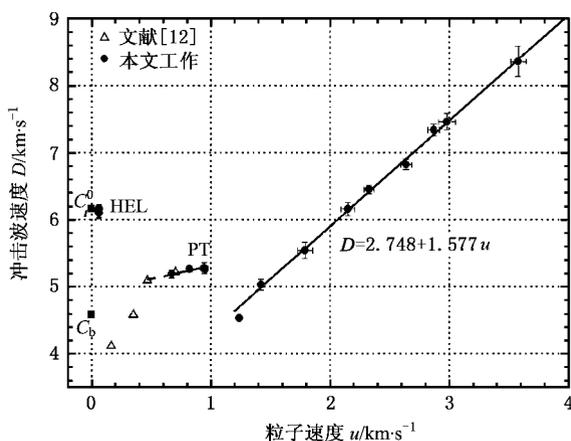


图 6 *z*-切 LiTaO₃ 冲击波-粒子速度关系曲线

温焓 ($H = E + PV$) 的计算可对 LiTaO₃ 的高压相结构进行搜索. 图 7 是计算的平均单原胞焓(已扣除电子系禀势能)随压力变化曲线, 为清楚起见图中菱形相的焓已归为零线. 当压力较低时, 菱形相的焓小于正交相和六角相, 这与 LiTaO₃ 的常态结构是一致的; 而更高压力时正交相的焓最低, 对应的结构最为稳定. 因此从计算的焓来看, LiTaO₃ 的高压相应是正交结构, 晶体结构随着压力增加会向晶轴相互垂直的趋势变化.

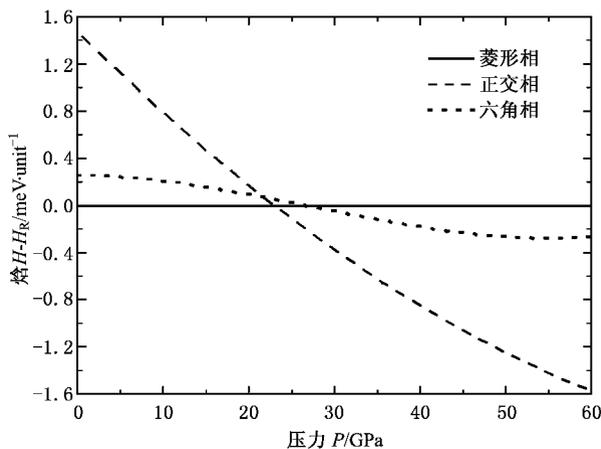


图 7 计算的平均单原子焓随压力的变化曲线

计算的零温压缩曲线 ($P-V/V_0$) 与实验数据的比较如图 8 所示, 可见菱形相压缩线与低压相冲击实验数据符合较好, 同时与静压衍射数据^[15]也基本符合; 正交相压缩线则与我们扣除热压贡献^[23]的高压相数据符合较好, 而六角相 $P-V/V_0$ 曲线则明显偏离实验数据, 由此也推断 *z* 切 LiTaO₃ 晶体的冲击高压相应为正交结构 ($Pbnm$ 对称群).

计算所得菱形相零压体积模量 K_0 及其压力偏

导数 K'_0 分别为 174 ± 2 GPa 和 2.8, 与超声测量的常态体积模量基本一致, 但小于静高压结果^[15] ($k_0 = 225 \pm 6$ GPa, $k'_0 = 1.3 \pm 0.5$); 正交相的 K_0 和 K'_0 分别为 291 ± 3 GPa 和 3.2, 且明显大于低压相的相应值, 可见正交相更难压缩, 对应的常态密度比初始相高约 24%. 利用我们新的实验数据得到雨贡纽弹性极限和冲击相变起初压力分别为 2.9 GPa 和 37.9 GPa, 这一相变压力明显高于 Stanton 等^[12] 的冲击实验结果 (19 GPa), 也略高于 Lin 等^[13] 和 Suzuki 等^[14] 的早期静压实验结果 (~ 35 GPa), 但与 Zhang 等^[15] 认为压力至 36 GPa 时仍能保持稳定初始相的最新实验结论是符合的. 同时结合 $D-u$ 关系判定, 压力至 63 GPa 后 LiTaO_3 进入完全高压相.

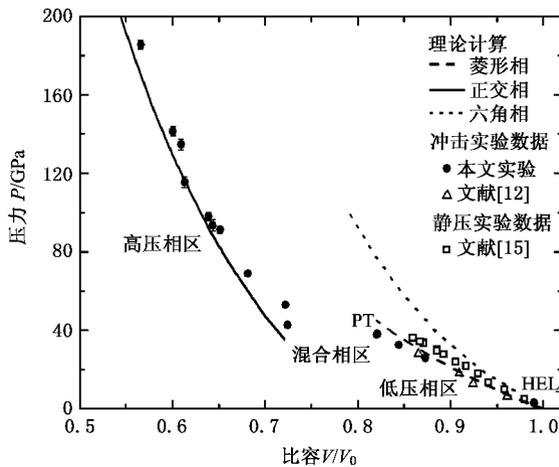


图 8 理论计算压缩线与实验数据的比较

5. 结 论

通过本文的冲击实验和理论计算研究, 得到以下结论:

1. 利用 VISAR 结合多通道辐射高温计的联合诊断技术测量了 z 切 LiTaO_3 单晶的粒子速度剖面 and 冲击 Hugoniot 数据, 结果清楚地显示出波剖面的多波结构和 $D-u$ 关系的不连续性变化, 从实验上进一步验证了 LiTaO_3 单晶冲击相变的存在, 利用我们实验结果得到相变起始压力约为 37.9 GPa.

2. 结合基于密度泛函理论框架的平面波赝势从头算方法, 发现正交相的理论计算的 $P-V/V_0$ 压缩曲线与高压段实验数据相符, 由此推断 LiTaO_3 的高压相为正交结构 ($P6mm$ 对称群).

3. 冲击实验结合第一性原理计算也是研究单晶材料高压相变的有效方法之一, 对以后开展其他材料的相变研究具有一定参照价值.

本文的实验和测量工作是在中国工程物理研究院流体物理研究所陈宏、王为、叶素华、傅秋卫、卢敏、向耀民、方茂林和陈志云等同志的协助下完成, 计算工作得到了中国科技大学梁万珍教授的支持和帮助, 并与中国科学院固体物理研究所曾雄研究员, 中国工程物理研究院向世凯博士等进行了十分有益的讨论, 在此一并致谢.

[1] Ashkin A, Body G D, Dzedzic J M, Smith R G, Ballman A A, Levinstein J J, Nassau K 1966 *Appl. Phys. Lett.* **9** 72

[2] Zhu S N, Zhu Y Y, Yang Z J, Wang H F, Zhang Z Y, Hong J F, Ge C Z, Ming N B 1995 *Appl. Phys. Lett.* **63** 17

[3] Gopalan V, Gupta M C 1996 *J. Phys. Lett.* **68** 888

[4] Sungwon K, Gopalan V 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 2949

[5] Feng D, Shi C X, Liu Z 2002 *Introduction to materials science* (Beijing: Chemistry Industry Press) p316 (in Chinese) [冯端 师昌绪 刘治国 2002 材料科学导论 (北京: 化学工业出版社) 第 316 页]

[6] Lan G X, Li G G, Li B, Wang H F 1981 *Acta Phys. Sin.* **30** 1548 (in Chinese) [蓝国祥、李冠告、李兵、王华馥 1981 物理学报 **30** 1548]

[7] Hu M S, Fong D 1982 *Acta Phys. Sin.* **31** 815 (in Chinese) [胡梅生、冯端 1982 物理学报 **31** 815]

[8] Kitamura K, Furukawa Y, Niwa K, Gopalan V, Mitchell T E 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 3073

[9] Gautier C A, Merian M, Etchepare J 2000 *J. Phys: Condens Matter* **12** 7175

[10] Ohkubo Y, Murakami Y, Saito T, Yokoyama A, Uehara S, Kawase Y 2002 *Phys. Rev. B* **65** 52107

[11] Zhou X M 2004 *The Feasibility Exploration for Shock Temperature Testing of Iron with LiTaO3 as Window Material* Doctoral Dissertation (Mianyang: China Academy of Engineering Physics) p4 (in Chinese) [周显明 2004 LiTaO_3 单晶用作测量 Fe 冲击温度窗口材料可行性的探索 (绵阳: 中国工程物理研究院) 第 4 页]

[12] Stanton P L, Graham R A 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 6892

[13] Lin Y K, Lan N K, Wang H F 1994 *Solid State Commun.* **91** 879

[14] Suzuki T, Akimoto S, Goto T, Syono T 1982 *Proceedings of the 23rd High Pressure Conference of Japan* p70

- [15] Zhang W W , Cui Q L , Pan Y W , Dong S S , Liu J , Zou G T 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 1666
- [16] Mukaide T , Yagi T , Miyajima N , Kondo T , Sata N , Kikegawa T 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 3852
- [17] Furnish M D , Chhabildas L C , Barker L M 1999 *Int. J. Impact. Eng.* **23** 261
- [18] Marsh S P 1980 *LASL Shock Hugoniot Data* (Los Angeles , London & Berkely : University of California Press)
- [19] Nellis W J , Mitchell A C , Young D A 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 304
- [20] Carter W J 1973 *High Temperature-High Pressure* **5** 316
- [21] Asay J R , Chhabildas L C 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 4774
- [22] Kawai N , Nakamura K G , Kondo K 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 4126
- [23] Jing F Q 1999 *Introduction to Experimental Equation of State* (Beijing : Science Press) p200 (in Chinese)[经福谦 1999 实验物态方程导引 (北京 : 科学出版社) 第 200 页]
- [24] Zhang Y , Tang C Q , Dai J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 868 (in Chinese)[张 勇、唐超群、戴 君 2005 物理学报 **54** 868]
- [25] Lu L Y , Chen X R , Yu B R , Gou Q Q 2006 *Chin. Phys.* **15** 802
- [26] Perdew J P , Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [27] Fischer T H , Almlöf J 1992 *J. Phys. Chem.* **96** 9768
- [28] Inbar I , Cohen R E 1996 *Phys. Rev. B* **53** 1193
- [29] Svensson C , Stahl K 1988 *J. Solid. State. Chem.* **77** 112
- [30] Zachariasen W H , Barta F A 1931 *Phys. Rev.* **37** 1626
- [31] Greeff C W , Trinkle D R and Albers R C 2002 *Shock Compression of Condensed Matter -2001* (New York : American Institute of Physics) p225
- [32] Greeff C W , Rigg P A , Knudson M D *et al* 2004 *Shock Compression of Condensed Matter-2003* (New York : American Institute of Physics) p209
- [33] Graham R A 1980 *J. Geophys. Res.* **85** 913
- [34] Goto T , Syono Y 1985 *J. Appl. Phys.* **58** 2548
- [35] Mashimo T , Chau R , Zhang Y , Kobayoshi T , Sekine T , Fukuoka K , Syono Y , Kodama M , Nellis W J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 105504
- [36] Grady D E 1977 *High Pressure Research : Applications in Geophysics* (New York : Academic Press) p389
- [37] Graham R A 1974 *J. Phys. Chem. Solids.* **35** 355

Shock-induced phase transition of z -cut lithium tantalate single crystal^{*}

Li Jun Zhou Xian-Ming[†] Li Jia-Bo Li Sai-Nan Zhu Wen-Jun Wang Xiang Jing Fu-Qian

(Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research , Institute of Fluid Physics , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 621900 , China)

(Received 2 November 2006 ; revised manuscript received 29 June 2007)

Abstract

High-pressure phase-transition behaviors of z -cut lithium tantalate single-crystal have been studied by Hugoniot measurements at our two-stage light-gas gun and DFT-PWP calculations. A distinct discontinuity was discovered on the $D-u$ (shock-wave velocity versus particle velocity) relation. An elastic-plastic two-wave structure was observed from the VISAR measured particle velocity profiles at low pressures (25.9 GPa and 32.6 GPa), while three-wave structure appeared in the measured particle velocity profiles at the final pressure of 42.9 GPa and 53.0 GPa. Both facts indicate a shock-induced phase transition of LiTaO_3 samples occurred with an onset pressure of 37.9GPa. The theoretically calculated OK pressure versus compression ratio ($P-V/V_0$) curve for the rhombohedral phase ($R3c$ space group) is in good agreement with the low-pressure experimental data , while that for orthorhombic phase ($Pbnm$ space group) is in accord with the results by deducing thermal pressure contribution from the measured shock-compression data at high pressures. This suggests that the high-pressure phase has orthorhombic symmetry. High-pressure phase transformation behaviors including the transition pressure and structures , which are unclear in current literature , have been clarified in this paper by our new shock-wave data and *ab-initio* calculations. These behaviors were demonstrated to be in close similarity with that of its isomorphous crystal LiNbO_3 . The present work is significant for the investigations of shock-induced phase-transition of similar single-crystal materials.

Keywords : z -cut LiTaO_3 single-crystal , shock-induced phase-transition , shock-wave experiment , *ab-initio* calculation

PACC : 6470 , 6250 , 7115

^{*} Project supported by the Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 20050102).

[†] E-mail : xianming_zhou@tom.com