

# Grüneisen 系数与铝的高温高压状态方程\*

宋 萍† 蔡灵仓

(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,绵阳 621900)

(2007 年 11 月 28 日收到,2008 年 9 月 4 日收到修改稿)

基于 Gray 金属三相状态方程模型,分别采用  $\rho\gamma = \text{常数}$ ,Gray,GRIZZLY 的 Grüneisen 系数模型和从头算给出的 Grüneisen 系数,系统计算了铝的熔化曲线、等熵压缩线、等温压缩线和等熵卸载线,计算结果与实验数据比较表明:在冲击压力约为 500 GPa 的宽广压力范围,GRIZZLY Grüneisen 系数模型是最适合描述铝的热力学特性的形式, $\rho\gamma = \text{常数}$ 模型次之,在高压区,Gray 和从头算的 Grüneisen 系数的计算结果与实验值差距较大.

关键词:Grüneisen 系数,状态方程,铝

PACC:6430,6490

## 1. 引 言

在状态方程研究中,Grüneisen 系数( $\gamma$ )是表征材料热力学性质的一个重要参数,实验直接测量难度较大,通过理论分析获得的数据也存在很大的差别<sup>[1]</sup>,因此在物态方程理论计算中,常采用一些经验模型.在这些经验模型中,简单而又常用的模型是密度  $\rho$  与  $\gamma$  满足  $\rho\gamma = \text{常数}$ ,该模型对部分材料在压力不太高的区域比较适用,但在高温高压下不适用,如密度  $\rho$  趋于无穷大(即  $\rho_\infty$ )时,不满足  $\gamma_\infty$ (即  $\chi(\rho_\infty)$ )趋向于理想气体常用值  $2/3$ <sup>[2]</sup>.为了宽区物态方程的应用,在满足  $\chi(\rho_0) = \gamma_0$  和  $\chi(\rho_\infty) = \gamma_\infty$  的条件下,不同计算状态方程程序采用了不同形式的  $\chi(\rho)$  函数,如 Gray<sup>[3]</sup>,GRIZZLY<sup>[4]</sup>等模型一般假设 Grüneisen 系数只与材料的比容( $V$ )或密度( $\rho$ )相关,与温度无关,通过优化参数来确定特定材料在特定压力范围的 Grüneisen 系数表示形式.这些解析表达式过去在宽区物态方程计算中应用非常广泛,但对表达式的适用性缺乏系统比较.近年来从头算给出的 Grüneisen 系数<sup>[5]</sup>,在宽区物态方程计算中是否适用,还需进一步系统验证.

本文基于 Royce<sup>[3]</sup>在上世纪七十年代建立的金屬三相(固相、液相和气相)状态方程 Gray 模型,采用  $\rho\gamma = \text{常数}$ ,Gray,GRIZZLY 的 Grüneisen 系数模型

以及第一性原理计算给出的 Grüneisen 系数,系统计算了铝在 500 GPa 以内的冲击温度和 300 GPa 以内的熔化曲线,通过与现有实验数据比较,优选了 GRIZZLY 模型中的参数,比较了四种 Grüneisen 系数对铝在宽广压力范围的适用性.以雨贡纽曲线为参考线,选用以上的 Grüneisen 系数,计算了铝的等温压缩线、等熵卸载线、等熵压缩线,并同国内外的实验结果进行了比较.

## 2. Grüneisen 系数模型

对铝,实验表明<sup>[6,7]</sup>,在不太高的压力范围内, $\gamma$  与材料密度  $\rho$  满足

$$\rho\gamma = \rho_0\gamma_0 = \text{常数}$$

$$(\gamma_0 \text{ 为常态密度 } \rho_0 \text{ 时的值}), \quad (1)$$

即

$$\chi(V) = \frac{\gamma_0}{V_0} V,$$

$\gamma$  与  $V$  呈线性关系如图 1.而 Cohen 和 Gülseren 等人<sup>[8]</sup>采用第一性原理的分子动力学方法计算高温高压条件下各种相关热力学参数,采用热力学定义给出相应的 Grüneisen 系数,以及吴强<sup>[9]</sup>采用 BM(Born-Mayer)物态方程,利用 Hugoniot 曲线和相应的冷压曲线直接确定的 Grüneisen 系数,其结果都表明,在低压区 Grüneisen 系数  $\gamma$  随密度(或比容)的变化非

\* 国家自然科学基金(批准号:10776029/A06)资助的课题.

† E-mail: Songp1024@yahoo.com.cn

常剧烈,而在高压区的变化则较为平缓,显然,  $\rho\gamma =$  常数在高压区与 Cohen 和吴强的分析结果不相符,对  $\rho\gamma =$  常数在状态方程计算中适用的范围需要验证.

Gray Grüneisen 系数模型为<sup>[3]</sup>

$$\chi(V) = \gamma_0 - a(1 - V/V_0), \quad (2)$$

$a$  为常数.显然,该模型中  $\gamma$  与比容  $V$  依然是线性关系.

GRIZZLY Grüneisen 系数模型为<sup>[4]</sup>

$$\chi(V) = \frac{2}{3} + A\left(\frac{V}{V_0}\right) + B\left(\frac{V}{V_0}\right)^2, \quad (3)$$

其中  $A = \gamma_0[2 - \chi(V_0)] - \frac{4}{3}$ ,  $B = \gamma_0[\chi(V_0) - 1] + \frac{2}{3}$ ,  $\chi(V_0)$  为自由参数.

GRIZZLY Grüneisen 系数模型在较低压力范围内与  $\rho\gamma =$  常数一致,在压力较高时,其变化趋势趋于平缓,与 Cohen 和吴强的分析结果一致.

对文献 [5] 由从头算给出的  $\gamma$  采用多项式拟合的方法获得,  $V > 0.25 \text{ cm}^3/\text{g}$ ,  $\gamma$  趋近于常数 1.267, 本文外推时取为该值.从图 1 中可以看出,从头算给出的  $\gamma$  也呈现出低压剧变高压渐变的特性,但在低压区的变化比  $\rho\gamma =$  常数要剧烈得多.

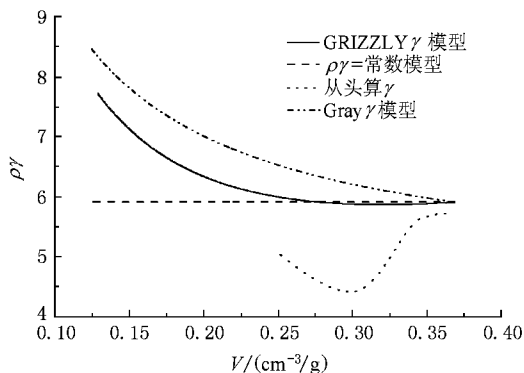


图 1 Grüneisen 系数  $\gamma$  随比容的变化

### 3. 状态方程模型

在 Gray 三相状态方程中,熔化及液相,采用 Grover 模型<sup>[10]</sup>模型假定:

1) 熔化熵与压力无关,对大多数金属熔化熵为一常数.

2) 定容比热容  $C_V$  在固态区间为常数  $3R$  ( $R$  为气体常数),液态区间比热容与温度有关,是一条普

适曲线,并由熔化温度来标定,它表示为

$$C_V = 3R - \tau R \frac{T}{T_m}, \quad T > T_m, \quad (4)$$

式中  $\tau \approx 0.15$ ,  $R$  为气体常数,  $T_m$  为熔化温度;高温液相的  $C_V$  降为  $3R/2$ .

3) 金属熔化时,熔化温度遵循改进的 Lindemann 定律<sup>[11]</sup>

$$\frac{d \ln T_m}{d \ln V} = \frac{2}{3} - 2\gamma_m,$$

通过积分得到

$$T_m(V) = T_{m0} \left(\frac{V}{V_{n0}}\right)^{2/3} \exp\left[-2 \int_{V_{n0}}^V \frac{\gamma_m}{V} dV\right], \quad (5)$$

其中  $T_{m0}$  为常压下比容  $V = V_{n0}$  时的熔化温度,  $V_{n0}$  为常压下熔化时的比容,  $\gamma_m$  熔化 Grüneisen 系数.

4) 液相区采用硬球模型<sup>[12]</sup>.

Royce 以定标律“scaling-law”<sup>[3]</sup>状态方程为基础,以 Hugoniot 状态方程为参考,将状态方程中的压力与能量变换为类 Grüneisen 方程的表达形式,见文献 [3],压力  $P(V, T)$  表示为

$$P(V, T) = P_i(V, T) + P_c(V, T) + P_{cc}(V, T), \quad (6)$$

$$P_i(V, T) = P_H(V) \left[1 - \frac{\gamma_S(V)}{2V} (V_0 - V)\right] + \frac{\gamma_S(V)}{V} \{E(V, T) - E_{OH}\}, \quad (7)$$

$$P_c(V, T) = (P_i(V, T) - P_0(V)) - \frac{\gamma_S(V)}{V} \{E(V, T) - E_0(V)\}, \quad (8)$$

$$P_H(V) = \frac{\rho_0 C^2 x}{(1 - Sx)^2 - 2CS'x^2} \times \left\{1 + \frac{C^2 S'^2 x}{[(1 - Sx)^2 - 2CS'x^2]^2}\right\}, \quad (9)$$

$$x = \frac{V_0 - V}{V_0},$$

上式中  $P_i(V, T)$  为定标律“scaling-law”状态方程中的压力表达式,  $P_{cc}(V, T) = -P_{cs}(T = T_R, V = V_0)$ , 是为了满足在室温、常密度下  $P = 0$  而附加的一个修正项;  $E$  为内能;  $V = 1/\rho$  为比容;  $V_0$  为常态比容;  $\gamma_S$  为固态 Grüneisen 系数;  $E_{OH}$  为 Hugoniot 零点能, 取为 0;  $C, S, S'$  为冲击波速度与粒子速度的二次拟合系数;  $\rho_0$  为初始密度.

冷能  $E_0(V)$ <sup>[3]</sup>表示为

$$E_0(V) = (A - B + E_{OK}) \exp\left(-\int_{V_0}^V \frac{\gamma}{V} dV\right),$$

$$A = \int_{V_0}^V \frac{\gamma}{V} \exp\left(\int_{V_0}^V \frac{\gamma}{V} dV\right) dV,$$

$$B = \int_{V_0}^V \left[1 - \frac{\gamma}{2V}(V_0 - V)\right] P_H \exp\left(\int_{V_0}^V \frac{\gamma}{V} dV\right) dV \quad (10)$$

零温零压的能量  $E_{0K} = -900R/A_w$ ,  $A_w$  为原子量.

状态方程具体表达式为<sup>[3]</sup>:

固相区,  $T \leq T_m(V) - \delta T(V)$ ,

$$E_s(V, T) = E_0(V) + 3R'T + \frac{1}{2} G'T^2, \quad (11)$$

$$P_s(V, T) = P_l(V, T) + \frac{1}{2V}(\gamma_e - \gamma_s(V))G'T^2 \\ = P_{cs}(V, T). \quad (12)$$

熔化态  $T_m(V) - \delta T(V) \leq T \leq T_m(V) + \delta T(V)$ ,

$$E(V, T) = E_s(V) + \nu[T - \nu\delta T(V)] \\ \times (\Delta S' - \alpha'), \quad (13)$$

$$P(V, T) = P_{cs}(V, T) + \frac{1}{V}(\lambda(V)T_m(V) \\ - (T - \nu\delta T)\gamma_s(V))(\Delta S' - \alpha'). \quad (14)$$

液相区,  $T_m(V) + \delta T(V) \leq T \leq T_c(V)$ ,

$$E(V, T) = E_s(V, T) + T_m(V) \\ \times \left\{ \Delta S' - \frac{\alpha'}{2} \left(1 + \frac{T^2}{[T_m(V)]^2}\right) \right\}, \quad (15)$$

$$P(V, T) = P_{cs}(V, T) + \frac{T_m(V)}{V} \{ \lambda(V) - \gamma_s(V) \} \\ \times \left\{ \Delta S' - \frac{\alpha'}{2} \left(1 + \frac{T^2}{[T_m(V)]^2}\right) \right\}. \quad (16)$$

高温液相,  $T \geq T_c(V)$

$$E(V, T) = E_c(V) + \frac{3}{2}R'T + \frac{1}{2}G'T^2, \quad (17)$$

$$P(V, T) = P_{cs}(V, T) + \frac{T_m(V)}{V} \{ \lambda(V) - \gamma_s(V) \} \\ \times \left\{ \Delta S' - \frac{\alpha'}{2} \left[1 - \left(\frac{3R'}{2\alpha'}\right)^2 + 2\left(\frac{3R'}{2\alpha'}\right)\frac{T}{T_m(V)}\right] \right\}, \quad (18)$$

其中,

$$E_c(V) = E_0(V) + T_m(V) \left\{ \Delta S' + \frac{\alpha'}{2} \right.$$

$$\left. \times \left[ \left(\frac{3R'}{2\alpha'}\right)^2 - 1 \right] \right\};$$

$$\lambda(V) = -d \ln T_m / d \ln V = 2\gamma_m(V) - 2/3;$$

$$\delta T = \frac{\Delta S' D^2 T_m^2}{2.4 C^2 (1-x) f(x)},$$

$x \geq 0$  时,  $f(x) = 1 + (4s-1)x$ ,  $x \leq 0$  时,  $f(x) = 1$ . 一般取  $\gamma_m = \gamma_s$ ;  $\nu = [T - (T_m - \delta T)] / 2\delta T$  为描述熔化过程的变量;  $T_c(V) = 9.38 T_m(V)$ , 为液相的  $C_V$  降为  $3R/2$  时的温度.  $\gamma_e = 2/3$  为电子 Grüneisen 系数;  $\Delta S' = \Delta S/A_w$ ,  $\Delta S$  为熔化熵, 是个常数;  $\alpha' = \alpha/A_w$  为描述定容比热在液态减少比率的参数;  $R' = R/A_w$ ,  $R$  为气体常数;  $G'$  为电子能量系数, 为满足能量和压力的电子项自恰, 采用 Thomas-Fermi 统计理论的低温微扰理论所得<sup>[12]</sup>

$$G' = \beta_{0K}(V/V_{0K})^{\gamma_e}, \quad (19)$$

$\beta_{0K}$  为零温零压时的理论电子比热系数,  $V_{0K}$  是零温零压比容,  $V_{0K}$  近似为  $V_0/1.013$ .

计算中, 以  $V$  和  $T$  为自变量, 通过以上状态方程及表 1 中的参数, 获得列表式状态方程中的压力  $P$ , 能量  $E$ , 及  $P, E$  分别对  $V$  和  $T$  的偏导数等物理参量的数据表. 等温线以满足  $T = 300$  K 为条件, 从数据表中提取数据.

等熵线采用文献 [12] 的计算方法, 对等熵过程, 熵增  $dS = 0$ , 则有等熵方程

$$\left(\frac{dT}{dV}\right)_s = - \frac{T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V}{\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V}, \quad (20)$$

边界条件

$$T_s(V, V_A) |_{V=V_A} = T_A,$$

$A$  为等熵线的起始点. 对等熵压缩过程,  $V_A = V_0$ ,  $T_A = 300$  K, 对等熵卸载过程, 起始于 Hugoniot 状态点,  $V_A = V_H$ ,  $T_A = T_H$ . 数据表中已有式中压力与能量对温度的偏导数, 由等熵压缩线的初始点, 由 (20) 式计算的斜率, 可以作出  $(V, T)$  平面上的等熵压缩线. 然后将  $(V, T)$  平面上的等熵压缩线上各点的状态  $(V, T)$  通过数据表得出其压力及能量值, 从而可以作出  $(P, V)$  平面上的等熵压缩线.

在等熵线上, 粒子速度可表示为

$$u = u_A - \int_{V_A}^V \left(-\frac{dP}{dV}\right)_s^{1/2} dV. \quad (21)$$

熔化压力计算以等熵压缩线为参考:

$$P_m = P_s + (\gamma/V_s)(E_m - E_s), \quad (22)$$

式中  $E_m$  为  $V = V_s$ ,  $T = T_m(V_s)$  时的值.

表 1 铝的状态方程计算参数列表

| $\rho_0(\text{g/cm}^3)$ | $\gamma_0^{[12]}$ | $\gamma_e^{[3]}$ | $a$ | $C^a(\text{km/s})$ | $S^a)$ | $S'^a)$  | $V_{m0}^{[15]}(\text{cm}^3/\text{g})$ | $T_{\text{Room}}/\text{K}$ | $q_s(\text{V}_0)^b)$ |
|-------------------------|-------------------|------------------|-----|--------------------|--------|----------|---------------------------------------|----------------------------|----------------------|
| 2.7                     | 2.18              | 2/3              | 1.7 | 5.378              | 1.336  | -0.00276 | 0.3983                                | 300                        | 1.25                 |

| $q_m(\text{V}_0)^b)$ | $T_{m0}^{[15]}/\text{K}$ | $A_w^{[3]}(\text{g/mol})$ | $\Delta S^{[3]}(\text{Mbar}\cdot\text{cm}^3/\text{g}\cdot\text{K})^c)$ | $\alpha^{[3]}(\text{Mbar}\cdot\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{K})$ | $\beta_{0K}^{[12]}(\text{Mbar}\cdot\text{cm}^3/\text{g}\cdot\text{K}^2)$ | $V_{0K}(\text{cm}^3/\text{g})$ |
|----------------------|--------------------------|---------------------------|--|---|--|--------------------------------|
| 1.12                 | 933                      | 26.98                     | $0.9637 \times 10^{-6}$  | $1.3 \times 10^{-5}$  | 0.4153   | 0.365                          |

a) 通过对文献 [13] 和 [14] 的实验数据拟合而得 b)  $q_m(\text{V}_0)$  为 GRIZZLY 模型中  $\gamma_m$  的自由参数取值,  $q_s(\text{V}_0)$  为 GRIZZLY 模型  $\gamma_s$  的自由参数取值 c)  $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ .

### 4. 计算结果与分析

现在,人们对铝的熔化曲线的认识很少存在争议的,就静高压实验数据<sup>[11]</sup>,用高压声速实验数据计算的冲击熔化温度与 Vocadlo 和 Alfe<sup>[16]</sup>用从头算得到的数据都非常符合,因此,许多科学家以铝的高压熔化曲线作为检验高压物态方程模型的基础<sup>[17]</sup>. 我们知道,用改进的 Lindemann 熔化定律计算熔化曲线时,最敏感的是 Grüneisen 系数. 所选用的 Grüneisen 系数是否适合计算铝的高温高压物态方程数据,首先考察该 Grüneisen 系数计算的高压熔化曲线是否合理.

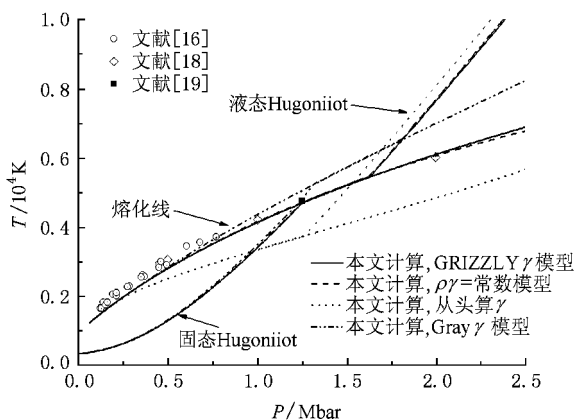


图 2 铝的冲击温度、熔化温度与压力

从图 2 可以看出,用 GRIZZLY 与  $\rho\gamma = \text{常数}$  的 Grüneisen 系数模型计算的铝的高压熔化曲线与现有静高压和动高压实验数据符合;用 Gray Grüneisen 系数模型计算铝的熔化曲线在 100 GPa 以上显著高于实验值;用 Xiang 等<sup>[5]</sup>从头算给出的 Grüneisen 系数计算铝的熔化线在约 30 GPa 以上就低于实验数据. 用上述四种 Grüneisen 系数计算铝的冲击温度在固相区相差不大,冲击熔点相差较大,GRIZZLY 和  $\rho\gamma = \text{常数}$  模型计算结果与文献 [19] 的结果一致,用向

世凯从头算给出的 Grüneisen 系数计算的结果为当冲击压力为 100 GPa 时,铝就开始熔化,这与实验结果的差距最大. 由此表明,四种 Grüneisen 系数中最适合描述铝的高压热力学特性的是 GRIZZLY 和  $\rho\gamma = \text{常数}$  模型,其余两种在高压下相对较差.

从图 3 和图 4,对铝的等熵压缩线,这四种 Grüneisen 系数的计算结果与实验结果在实验误差范围内区分不十分明显,这主要是我们的计算模型是以 Hugoniot 线为参考线的,在此压力范围内从 Hugoniot 线外推到等熵线,外推范围有限,未能反映

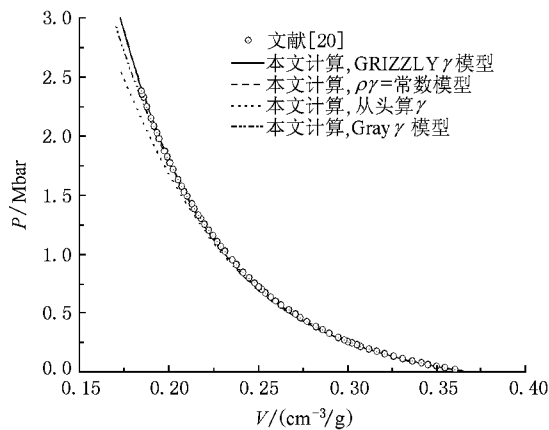


图 3 等熵压缩线与实验结果的比较

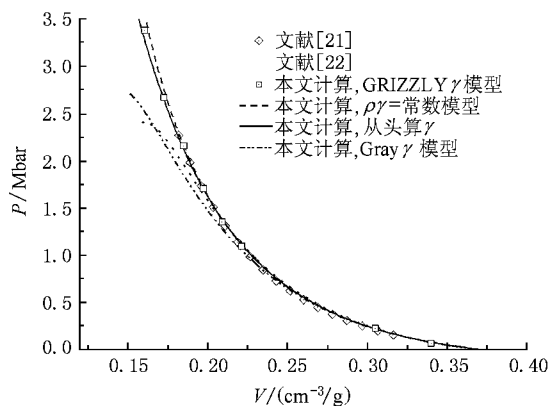


图 4 300 K 等温压缩线与实验结果的比较

出不同 Grüneisen 系数的差别,但 300 K 等温压缩线的结果就明显反映出四种 Grüneisen 系数计算结果的差别,尤其在高压区,Gray 和向世凯从头算的 Grüneisen 系数的计算结果与实验值差距较大.计算结果符合最好的是 GRIZZLY 模型的计算结果, $\rho\gamma =$  常数模型次之.这与前面计算熔化曲线所反映的规律是一致的.

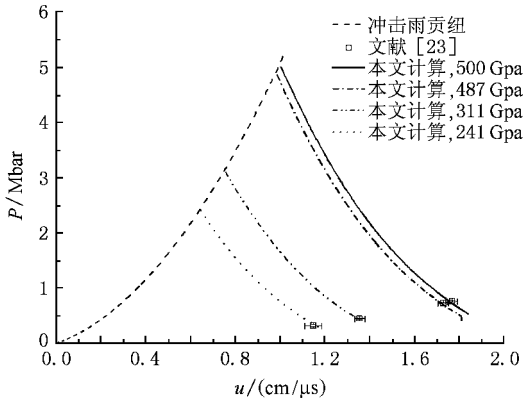


图 5 铝的等熵卸载压力与粒子速度

为了进一步验证 GRIZZLY Grüneisen 系数模型在更宽压力和温度范围的实用性,计算了铝从 500,

487, 311 和 241 GPa 的冲击态分别卸载到 76, 73, 45 和 32 GPa 的四条等熵卸载线,如图 5 所示.从最高 500 GPa 压力卸载到 76 GPa 时,粒子速度计算与实验值的相对偏差约 1%,卸载温度约为 17000 K (SESAME 3700 计算的卸载温度约为 17000 K<sup>[23]</sup>).这些结果表明,GRIZZLY Grüneisen 系数模型适用于描述铝冲击到 500 GPa (冲击温度约 28000 K) 的高温高压状态的热力学性质.

## 5. 结 论

在 Gray 三相状态方程模型的基础上,选用四种有代表性的 Grüneisen 系数,系统计算了铝的熔化曲线、等熵压缩线、等温压缩线和等熵卸载线,与现有实验数据比较表明,在冲击压力约为 500 GPa,冲击温度约为 28000 K 的宽广压力和温度范围,GRIZZLY Grüneisen 系数模型是最适合描述铝的热力学特性的形式, $\rho\gamma =$  常数模型次之.在高压区,Gray 和从头算的 Grüneisen 系数的计算结果与实验值差距较大.从理论分析,在 Gray 三相状态方程中,GRIZZLY 模型也应适用于其他金属,但其适用性,还需进一步检验.

- [ 1 ] Vocadlo L, Poirer J P, Price G D 2000 *American Mineralogist*. **85** xxxx - 1
- [ 2 ] Greeff C W, Graf M J 2004 *Phys. Rev. B* **69** 054107
- [ 3 ] Royce E B 1971 Gray, a Three-phase Equation of State for Metals. UCRL-51121
- [ 4 ] Abdallah J, User's Manual for GRIZZLY. Los Alamos National Laboratory Report. LA-10244-M
- [ 5 ] Xiang S K, Cai L C, Jing F Q 2004 *Phys. Rev. B* **70** 174102
- [ 6 ] Neal T 1976 *Phys. Rev. B* **14** 5172
- [ 7 ] Nellis W J, Mitchell A C, Yang D A 2003 *J. App. Phys.* **93** 304
- [ 8 ] Cohen R E, Gülseren O 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224101
- [ 9 ] Wu Q 2004 Doctor Paper (Mianyang: China Academy of Engineering Physics) p69 (in Chinese) [ 吴 强 2004 学位论文 (绵阳: 中国工程物理研究院) ]
- [ 10 ] Grover R 1971 *J. Chem. Phys.* **55** 3435
- [ 11 ] Hänström A, Lazor P 2000 *J. Alloys Compd.* **305** 209
- [ 12 ] Xu X S, Zhang W X 2004 *Introduction to Practical Equation of State*

*Theory* (Beijing Science Press) p521 (in Chinese) [ 徐锡申、张万箱 2004 实用物态方程理论导引 (北京: 科学出版社) ]

- [ 13 ] Stanley P M 1980 *LASL Shock Hugoniot Data* (University of California Press)
- [ 14 ] Knudson M D, Lemke R W, Hayes D B 2003 *J. App. Phys.* **94** 4420
- [ 15 ] Jeong J W, Lee I H, Chang K J 1999 *Phys. Rev. B* **59** 329
- [ 16 ] Vocadlo L, Alfè D 2002 *Phys. Rev. B* **65** 214105
- [ 17 ] Alfè D, Vocadlo L, Price G D 2004 *J. Phys.: Condensed Matter* **16** S973
- [ 18 ] Pelissier J L 1984 *Physica* **128A** 363
- [ 19 ] McQueen R G, Fritz J N, Morris C E 1983 *Shock Waves in Condensed Matter* 95
- [ 20 ] Davis J P 2006 *J. App. Phys.* **99** 103512
- [ 21 ] Greene R G, Luo H, Ruoff A L 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2075
- [ 22 ] Nellis W J, Moriarty J A, Mitchell A C 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1414
- [ 23 ] Knudson M D, Asay J R, Deeney C 2005 *J. App. Phys.* **97** 073514



# Grüneisen parameter and high temperature and high pressure equation of state for aluminum<sup>\*</sup>

Song Ping<sup>†</sup> Cai Ling-Cang

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

( Received 28 November 2007 ; revised manuscript received 4 September 2008 )

## Abstract

Based on the Gray equation of state ,the Grüneisen models of  $\rho\gamma = \text{constant}$  ,Gray ,GRIZZLY and the Grüneisen parameter calculated from ab initio were used to calculate the melt line , isentropic compression , isotherm compression and isentropic release lines of aluminum. Comparing the calculated lines with the experimental data ,the GRIZZLY Grüneisen model was found to be the best model for the equation of state of aluminum in the pressure range of about 500 GPa. The  $\rho\gamma = \text{constant}$  model is not as good as the GRIZZLY model. The Gray model and the Grüneisen parameter calculated ab initio fits the experimental data at high pressure badly.

**Keywords** : Grüneisen parameter ,equation of state ,aluminum

**PACC** : 6430 , 6490

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10776029/A06 ).

<sup>†</sup> E-mail Songp1024@yahoo.com.cn