

高压下固态 Kr 弹性性质、电子结构和光学性质的第一性原理计算^{*}

李晓凤¹⁾²⁾³⁾ 彭卫民²⁾ 申筱⁴⁾ 姬广富^{1)†} 赵峰¹⁾

1) 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重点实验室, 绵阳 621900)

2) 洛阳师范学院物理与电子信息学院, 洛阳 471022)

3) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

4) 上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240)

(2008 年 9 月 25 日收到, 2008 年 10 月 6 日收到修改稿)

采用密度泛函理论中平面波基矢-模守恒赝势结合局域密度近似以及广义梯度近似对固态 Kr 在高压下的结构以及弹性性质进行了研究, 通过计算发现弹性常数、Debye 温度以及声速都随压力的增大而增大, 所计算的弹性常数与实验和其他的理论符合的很好. 利用 Debye 模型得到了固态 Kr 的热力学性质, 熵随压力的增大而减小, 随温度升高而升高, 而定容热容 C_v 、定压热容 C_p 则随温度升高而升高, 而且 C_v 在达到一定温度时趋于定值, 所得的热力学性质和实验值是相符的. 最后还预测了固态 Kr 在高压下的电子结构和光学性质, 计算结果表明随压力的增加固态 Kr 的前沿能带变窄, 光吸收系数增大, 吸收峰增宽, 电子更容易发生跃迁, 固态 Kr 有可能转化为半导体.

关键词: Kr, 第一性原理, 弹性常数, 光学性质

PACC: 7115M, 6220D, 6740K

1. 引言

Kr 是最简单的分子材料之一, 而它的固体模型对于其他惰性气体的计算具有非常重要的指导意义. 在标准大气压下, Kr 大约在 119 K 液化, 116 K 凝固成晶体, 在这样条件下所形成的晶体具有面心立方结构. 惰性气体在高压下的结构、弹性性质以及电子结构等对于研究地球和其他星体有非常重要的意义, 特别对于一些内部可能充满了气体的星球(比如木星)尤为重要, 而且该材料在中还可以作为高压金刚石压砧实验的压标材料.

目前, 一些实验和理论已经对固态 Kr 在高压下的结构性质和弹性常数进行了研究. 从实验上看, Polian 等^[1]在金刚石压砧中采用了能量-分散的 X 射线衍射和布里渊区散射的方法测量了在室温下压力直至 35 GPa 时固态 Kr 的状态方程和高压下的弹性常数; 他们^[2]同时还利用能量-分散 X 射线结构确定光谱的方法研究了固态 Kr 高压下的性质. Losee

等^[3]通过 X 射线的方法测量了固态 Kr 在 115 K 以下各种热力学参数随着温度的变化关系. Shimizu 等^[4]采用布里渊区光谱仪确定了固态和液态 Kr 在 8 GPa 以下的体模量, 弹性常数和声速等物理量. Shimizu 等^[5]过布里渊区散射的方法测量了高压下固态 Ar 的弹性性质. 从理论上讲, 有很多的学者就惰性气体固态晶体进行了研究, Gupta 等^[6]利用经验的两体势模型分析了固态 Ne, Ar, Kr, Xe 在高温下的弹性常数. Tsuchiya 等^[7]利用第一性原理的方法(FP-LMTO)计算了惰性气体固态晶体在高压下的结构性质以及弹性性质. Ros 'ciszewski 等^[8]采用两体和三体势模型结合从头算对惰性气体基态的性质进行了研究. Tes 等^[9]采用了第一性原理和半球谐晶格分子动力学计算了固态 Ar 的高压下弹性性质. 到目前为至, 一些学者^[1-9]虽然对固态 Kr 的弹性性质进行了研究, 但是对固态 Kr 在高温高压下的热力学性质以及电子结构和光学性质还没有详细的研究. 本文将采用密度泛函理论(DFT)对惰性气体固态 Kr 在高压下的力学性质和热力学性质, 以及电子

^{*} 冲击波物理与爆轰物理重点实验室基金(批准号: 9140C6711010805)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: cyfjkf@caep.ac.cn

结构和光学性质进行全面的研究所。

2. 计算方法

我们在计算中采用了平面波赝势结合局域密度近似(LDA)以及广义梯度近似(GGA)方法,Kr 原子的交换关联函数分别采用由 Perdew,Zunger,Ceperly 和 Alder 所改进的 CA-PZ^[10] 函数(LDA)以及由 Perdew,Burke 和 Ernzerhof 提出的 PBE 函数(GGA)^[11]。所采用的赝势是模守恒赝势^[12],Kr 原子赝势组态取 $4s^2 4p^6$,所取截断能为 400 eV,布里渊区格点取 $10 \times 10 \times 10$,能量自洽精度设定为平均每个原子 1.0×10^{-6} eV。所有的电子结构计算全部由 Castep 模块^[13,14]完成。

由 Hooke 定律可知,微小形变下应力和应变是成正比的,用矩阵元表示为

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (1)$$

对于面心立方 Kr,具有三个独立的弹性常数,即 C_{11}, C_{12}, C_{44} ,而弹性常数和总能量关系为

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \quad (2)$$

对于面心立方结构的固态 Kr,它的体模量 B_s 可以由下列公式定义:

$$B_s = (C_{11} + 2C_{12})/3; \quad (3)$$

剪切模量 G 表示为

$$G = \frac{1}{2} [(C_{11} - C_{12}) + 4C_{44}] \quad (4)$$

杨氏模量 E 表示为

$$E = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (5)$$

为了研究固态 Kr 的热力学性质,本文采用了 Debye 模型。在 Debye 模型中,非平衡 Gibbs 函数 $G(V;P,T)$ 被定义为^[15],

$$G(V;P,T) = E(V) + PV + A_{\text{vib}}(V;T), \quad (6)$$

其中 $E(V)$ 是固态 Kr 每个原胞中的总能量, PV 表示静态压缩过程, A_{vib} 是 Helmholtz 振动自由能。考虑到球谐近似^[16]和 Debye 模型的声子态密度, A_{vib} 可以表示为^[17-19]

$$A_{\text{vib}}(\Theta;T) = nk_B T \left[\frac{9}{8} \frac{\Theta}{T} + 3 \ln(1 - e^{-\Theta/T}) - D(\Theta;T) \right], \quad (7)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数, $\Theta(V)$ 是 Debye 温度,

$D(\Theta;T)$ 是 Debye 温度积分, n 是分子中的原子数目。对于各向同性固体,泊松比 $\sigma = 0.25^{[20]}$,Debye 温度可以由以下公式得到:

$$\Theta = \frac{h}{k_B} [6\pi^2 V^{1/2} n]^{1/3} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}}, \quad (8)$$

其中 M 为分子量, B_s 是绝热体模量^[15], $f(\sigma)$ 和 B_s 由文献 18 给出。而定容热容 C_v 可以定义为

$$C_v = 3nk_B \left[4D\left(\frac{\Theta}{T}\right) - \frac{3\Theta/T}{e^{\Theta/T} - 1} \right]. \quad (9)$$

Grüneisen 参数由下列公式决定:

$$\gamma(V) = - \frac{d \ln \Theta(V)}{d \ln V}. \quad (10)$$

利用方程(8)就得到振动能和熵作为体积和温度的函数,结果如下:

$$E_D = \frac{9}{8} Nk_B \Theta + 3Nk_B T D\left(\frac{\Theta}{T}\right), \quad (11)$$

$$S_D(T,V) = 3Nk_B \left[\frac{4}{3} D\left(\frac{\Theta}{T}\right) - \ln(1 - e^{-\Theta/T}) \right], \quad (12)$$

其中 $D\left(\frac{\Theta}{T}\right)$ 是 Debye 函数。而 Debye 温度和许多物理量是相联系的,比如弹性常数,比热以及熔点等,在低温下,振动激发是由于声子振动引起的,因此低温下 Debye 温度可以从弹性常数计算得到(该方法已经在 $\text{Li}_2\text{O}^{[21]}$, $\text{AlB}_2^{[22]}$ 上得到成功应用)。Debye 温度的计算公式如下^[23]:

$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m, \quad (13)$$

其中 h 为普朗克常数, N_A 是阿伏伽德罗常数, ρ 是密度,而平均波速 v_m 可以从下面公式得到^[24]:

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_s^3} + \frac{1}{v_p^3} \right) \right]^{-1/3}, \quad (14)$$

其中 v_s, v_p 是压缩波和剪切波的速度,该速度可从 Navier 方程中^[25]推导得到,即

$$v_s = \sqrt{\left(B + \frac{4}{3} G \right) / \rho}, \quad (15)$$

$$v_p = \sqrt{G / \rho},$$

其中 G 是剪切模量。

3. 结果和讨论

对于面心立方 Kr 来说,通过改变晶格常数 a 就可以得到总能量 E 和相对应的原胞体积 V ,该能量体积数据可以通过 Birch-Murnaghan^[26] 状态方程进

行拟合,通过局域密度近似(LDA)和广义梯度近似(GGA)所得到固态 K_r 的平衡晶格常数为 0.3789, 0.4485 nm, 而实验值为 0.3986 nm, 从计算结果来看, LDA 的结果更符合实验值. 但是本计算结果是零温条件下, 而实验值则是 82 K 时的测量值, 考虑到温度效应, LDA 结果较好并且合理. 图 1 显示了固态 K_r 的密度随压力变化关系, 从图 1 中可以看出, 所计算的固态 K_r 的密度则 GGA 的结果偏小, 而 LDA 的结果偏大, 而这两者的平均值则与实验^[3]符合较好. 从图中还可以看出, 随着压力增大, 所得到的计算数据在高压下与实验值更加接近, 这是由于

在高压下固体分子间的相互作用加强, 所采用的密度泛函理论(DFT)能更加真实地反映分子晶体在高压下的性质. 由于采用 LDA 方法所得结果较好, 因此下面所有性质计算都是采用 LDA 方法. 图 2 显示了不同温度下体积比随着压力的变化关系, 其中 V_0 是不同温度下的零压平衡体积, 这说明固态 K_r 在不同压力下的压缩比受温度的影响并不明显.

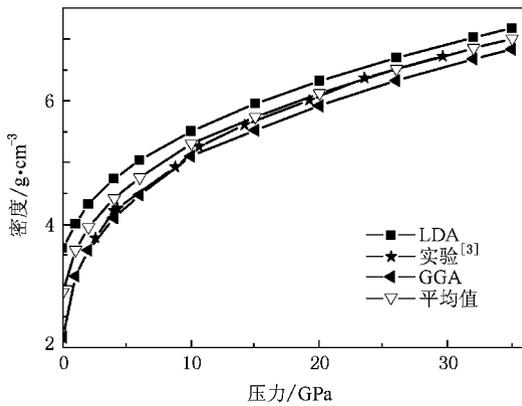


图 1 固态 K_r 零温下密度随着压力的变化(其中的平均值是 GGA 和 LDA 所得值的平均)以及实验结果

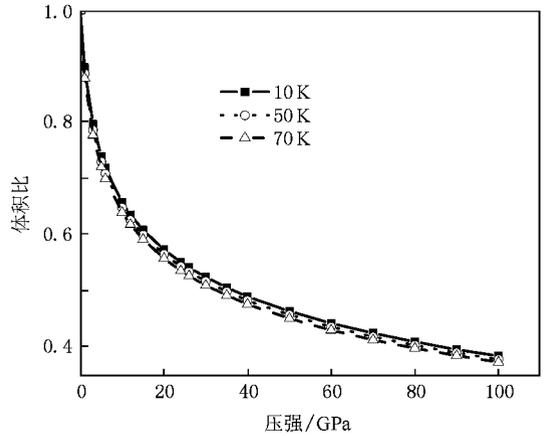


图 2 不同温度下固态 K_r 的体积比随着的压力的变化关系

表 1 中列出了不同压力下固态 K_r 的弹性常数的计算结果以及实验值^[1]. 从表 1 可以看出所计算的弹性常数和实验^[1]相符合, 而且固态 K_r 的弹性常数随着压力的增大而增大. 在 $T = 0 \text{ K}$, $P = 6 \text{ GPa}$

表 1 固态 K_r 在不同压力 P 下的弹性常数 C_{ij} 和体模量 B_s 的计算结果以及实验结果(单位为 GPa)

计算结果					实验结果 ^[1]				
P	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	P	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B
0	8.2	4.7	4.0	5.8					
5	42.9	27.9	20.1	32.9	1	6(2)	4(4)	3(3)	6(2)
6	46.7	30.0	22.1	35.7	5	36(2)	17(4)	21(3)	23(2)
10	69.3	45.8	32.3	53.6	10	71(2)	29(5)	34(4)	43(2)
20	118.2	78.0	55.8	91.4	15	101(2)	46(6)	45(5)	64(3)
30	166.6	110.5	78.1	129.2	20	131(2)	62(6)	56(5)	85(3)
40	209.2	138.4	98.5	162.0	25	160(3)	79(7)	64(6)	106(4)
50	252.2	166.7	118.8	195.2	30	184(3)	97(8)	70(6)	126(4)
60	294.6	194.1	139.1	227.6	35	205(3)	118(8)	73(6)	147(4)
70	336.7	221.6	158.9	259.9					
80	378.0	247.9	178.9	291.3					
90	420.4	275.4	198.9	323.8					
100	461.3	301.5	218.5	354.8					

注: 括号中为实验误差.

时, 所得计算结果为: $C_{11} = 46.7 \text{ GPa}$, $C_{12} = 30.0 \text{ GPa}$, $C_{44} = 22.1 \text{ GPa}$, $B = 35.7 \text{ GPa}$ 与文献 [4] 中 $T = 300 \text{ K}$, $P = 6 \text{ GPa}$ 时的弹性常数以及体模量 ($C_{11} = 40.7 \text{ GPa}$, $C_{12} = 28.7 \text{ GPa}$, $C_{44} = 15.8 \text{ GPa}$, $B = 32.7 \text{ GPa}$) 相符合. 而且 $C_{11} > C_{12} > C_{44}$, 这个关系和 Shimizu 在相同的压力范围内所得到的实验结果 [4] 一致. 图 3 显示出固态 Kr 的弹性常数计算结果, 实验数据 [4] 和其他理论数据 [7] 随着压力的变化关系, 体模量随着压力的变化关系, 从图中可知, C_{11} , C_{12} 随着压力的增加变化较快, 而 C_{44} 变化比较缓慢.

通过 Debye 模型还得到了固态 Kr 的热力学性质 (该方法已经被成功运用到了 BN [27], AlN [28] 等材料上). 在利用方程 (6)–(15), 从弹性常数可以得到固态 Kr 零温下的 Debye 温度 $\Theta_D = 74.1 \text{ K}$ 和文献 [3] 中的 71.1 K ($T \rightarrow 0 \text{ K}$) 相符合. 图 4 中给出了固态 Kr 的 Debye 温度, 剪切波波速, 压缩波波速随压力的变化曲线. 从图 4 中可以看出, 从 0–20 GPa 时, Debye 温度随压力变化比较快, 超过 20 GPa 时, 变化稍微平缓. 压缩波, 剪切波波速随压力的增加而增

大, 但压缩波速度变化较为平缓, 而剪切波波速随着压力变化较快. 图 5 (a) 显示了固态 Kr 的熵 S 在 $P = 0 \text{ GPa}$ 随着温度 T 的变化曲线, 从图中可以看出, 计算所得到的熵随温度的变化趋势和实验值 [3] 是相吻合的, 是随着温度的增加而增加. 图 5 (b) 显示了固态 Kr 的熵在不同温度下随压力的变化关系,

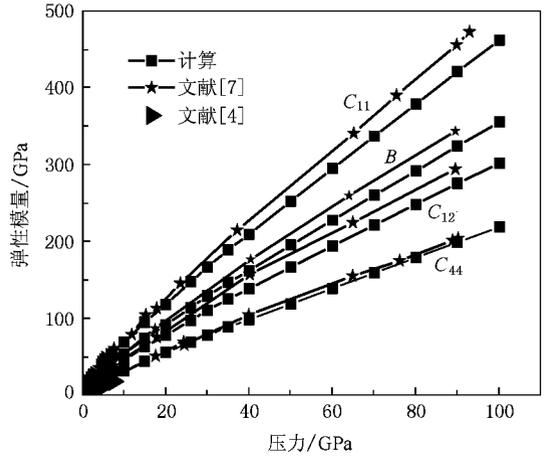


图 3 高压下固态 Kr 的弹性模量的计算结果, 以及其他的理论数据 [7] 和实验结果 [4]

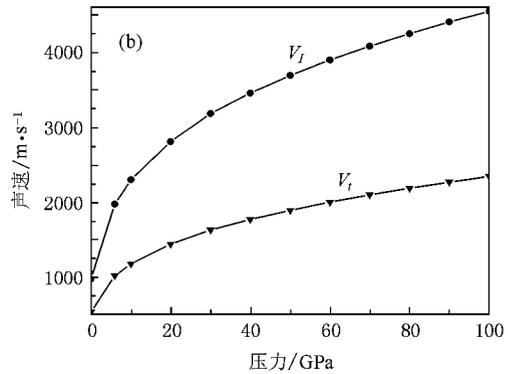
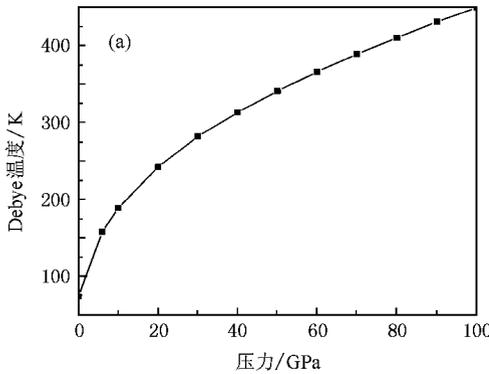


图 4 固态 Kr 的 Debye 温度和声速随着压力的变化

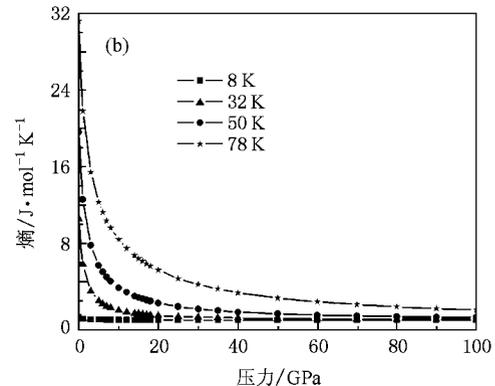
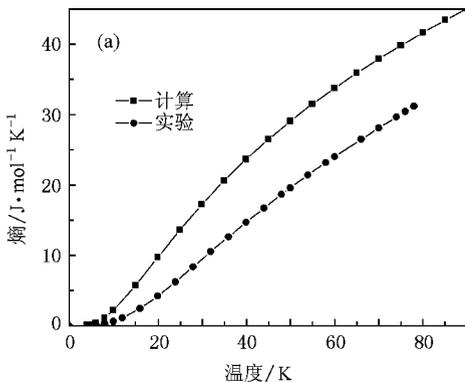


图 5 固态 Kr 的熵随着压力温度的变化关系 (a) 熵在 0 GPa 时随着温度的变化 (b) 熵在不同温度下随着压力的变化

很明显可以看出,当 $P < 20$ GPa 时熵随压力急剧下降,当 $P > 20$ GPa 时,熵随着压力几乎没有变化.但在低温下,当 $P > 20$ GPa 时,熵几乎不随压力的变化而改变,当温度增大时,熵的值随着压力才有所增加.图 6 给出了定容热容 C_v 、定压热容 C_p 随温度的变化趋势,从图中可以看出, C_v 和 C_p 在 $T < 30$ K 时

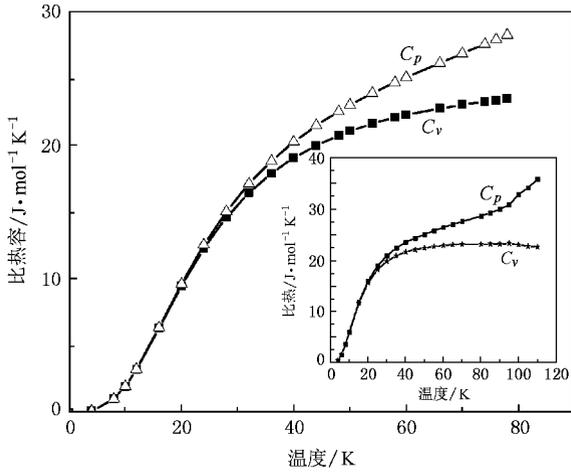


图 6 固态 Kr 的比热随着温度的变化关系(插图是饱和蒸气压下比热的实验值^[31])

变化趋势一致,在 $T > 30$ K, C_p 随温度的升高而升高,但 C_v 基本趋于定值,这种变化趋势和实验结果^[31]一致(图 6 中的插图为实验数据^[31]).

图 7 给出了固态 Kr 在 0GPa、50GPa 下的电子结构,表 2 给出了不同压力下固态 Kr 的带隙.当外部压力为零时,固态 Kr 的带隙约为 6.30eV,表明了该固体在零压下是绝缘体,带隙随着压力的增加而减小,并且减小的幅度较大(见图 8),这说明了固态 Kr 随着压力的变化可能从绝缘体变成半导体.

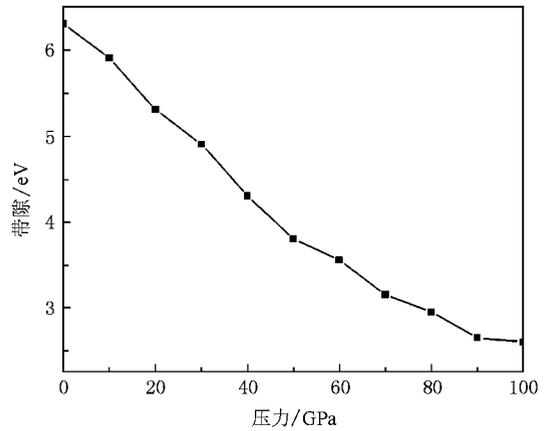


图 8 固态 Kr 在高压下的带隙

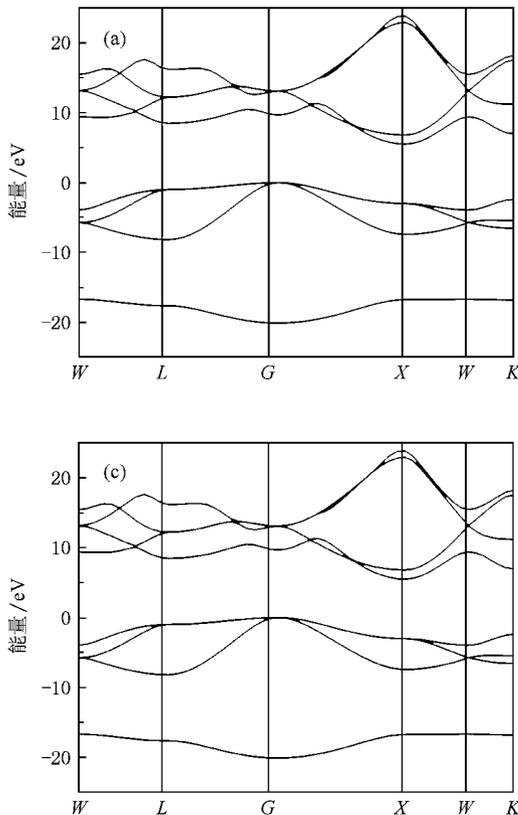


图 7 固态 Kr 在不同压力下的能带结构和态密度 (a) 0 GPa, (b) 50 GPa

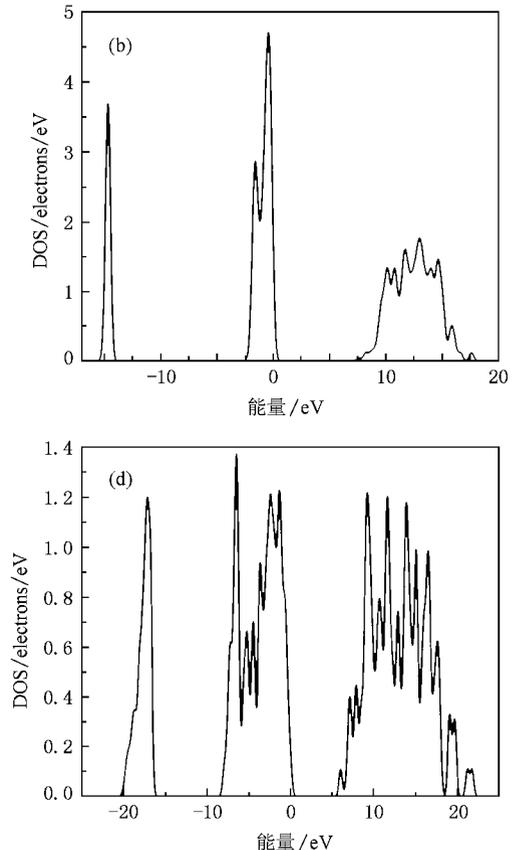


表 2 固态 Kr 在不同压力下的能带之间的带隙

压力/GPa	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
带隙/eV	6.3	5.9	5.3	4.9	4.3	3.8	3.6	3.2	2.9	2.7	2.5

本文还分析了固态 Kr 在不同压力下的光学性质. 固体中光子和电子之间的相互作用导致了占据态和非占据态之间的跃迁. 光谱就是由于激发而产生的, Dirac 函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 可以通过占据态和非占据态波函数的量子矩阵元来得到, 而实部 $\epsilon_1(\omega)$ 可以利用 Kramer-Kronig 关系从虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 计算得到, 而吸收系数 $\alpha(\omega)$ ^[29] 则可以从 Dirac 函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 和实部中估算出来. 固态 Kr 的不同压力下吸收系数 $\alpha(\omega)$ 在图 9 中显示. 从图中可以看出, $P = 0$ 时, 吸收光谱在 14.5 eV 处有明显的峰, 该峰值为 $0.345 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. 而 $P = 50 \text{ GPa}$ 时, 第一个峰值在 11.4 eV 处 (对应的峰值为 $0.436 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$), 中间

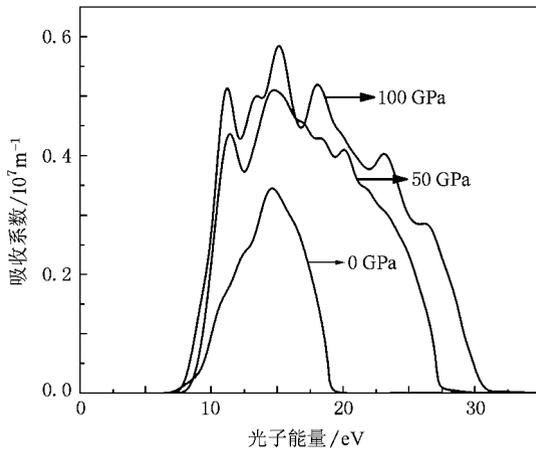


图 9 高压下固态 Kr 的光学吸收系数

峰值在 14.7 eV 处 (对应的峰值为 $0.51 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$). 而 $P = 100 \text{ GPa}$ 时, 特征峰明显增多, 但是第一个和中间峰值所在的位置基本相同. 从图 9 中还可以看出, 光学吸收系数随压力增加而升高, 而且吸收峰也增宽, 这说明高压下固态 Kr 更易受激发而跃迁, 这种效应和前沿能带带隙随压力的增大而降低是一致的.

4. 结 论

基于密度泛函的第一性原理计算方法, 采用局域密度近似 (DFT-LDA) 以及广义梯度近似 (DFT-GGA) 对稀有气体固态 Kr 进行研究, 计算得到固态 Kr 在压力直至 100 GPa 时的弹性常数, 弹性常数随着压力的增大而增大, 并且 Debye 温度, 声速都是随压力增加而增大. 还利用 Debye 模型得到固态 Kr 的热力学性质, 即熵 S , 定容热容 C_v , 定压热容 C_p 随温度压力的变化关系等. 即熵随着压力的增大而减小, 随着温度的升高而升高, C_v, C_p 则随温度升高而升高, 而且 C_v 在达到一定温度以后趋于定值, 所得结果和实验值以及理论值符合的很好. 最后还预测了固态 Kr 在高压下的电子结构和光学性质, 发现随着压力的增加固态 Kr 的前沿能带变窄, 光吸收系数增大, 吸收峰增宽, 电子更容易发生跃迁, 固态 Kr 有可能转化为半导体.

[1] Polian A, Besson J M, Grimsditch M, Grosshans W A 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1332
 [2] Polian A, Itie J P, Dartyge E, Fontaine A, Tourillon G 1989 *Phys. Rev. B* **39** 3369
 [3] Lossee D L, Simmons R O 1968 *Phys. Rev.* **172** 944
 [4] Shimizu H, Saitoh N, Sasaki S 1998 *Phys. Rev. B* **57** 230
 [5] Shimizu H, Tashiro H, Kume T, Sasaki S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4568
 [6] Gupta S, Goyal S C 2004 *Physica B* **352** 24
 [7] Tsuchiya T, Kawamura K 2002 *J. Chem. Phys.* **117** 5859
 [8] Ros'ciszewski K, Paulus B, Fulde P, Stoll H 2000 *Phys. Rev. B* **62** 5482

[9] Tes J S, Klug D D, Shpakov V, Rodger J R 2002 *Solid State Commun.* **122** 557
 [10] Cerperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
 [11] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
 [12] Hamann D R, Schluter M, Chiang C 1979 *Phys. Rev. Lett.* **43** 1494
 [13] Payne M C, Teter M P, Allen D C, Arias T A, Joannopoulos J D 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 1045
 [14] Milman V, Winkler B, White J A, Packard C J, Payne M C, Akhmatkaya E V, Nobes R H 2000 *Int. J. Quantum Chem.* **77** 895
 [15] Blanco M A, Francisco E, Luana V 2004 *Comput. Phys. Commun.* **158** 57

- [16] Maradudin A A , Montroll E W , Weiss G H , Ipatova I P 1971 *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation* (New York : Academic Press) **139** 197
- [17] Blanco M A , Martl' n Penda' s A , Francisco E 1996 *J. Mol. Struct.* **368** 245
- [18] Francisco E , Recio J M , Blanco M A , Martl' n Penda' s A 1998 *J. Phys. Chem.* **102** 1595
- [19] Flo' rez M , Recio J M , Francisco E , Blanco M A , Penda' s A M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 144112
- [20] Poirier J P 1991 *Introduction to the Physics of the Earth 's Interior* (England : Cambridge University)
- [21] Li X F , Chen X R , Meng C M , Ji G F 2006 *Solid State Commun.* **139** 197
- [22] Liu K , Zhou X L , Chen X R , Zhu W J 2007 *Physica B* **388** 213
- [23] Fast L , Wills J M , Johansson B , Eriksson O 1995 *Phys. Rev. B* **51** 17431
- [24] Anderson O L 1963 *J. Phys. Chem. Solid.* **24** 909
- [25] Schreiber E , Anderson O L , Soga N 1973 *Elastic Constants and Their Measurements* (New York : McGraw-Hill)
- [26] Murnaghan F D 1994 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **30** 244
- [27] Hao Y J , Cheng Y , Wang Y J , Chen X R 2007 *Chin. Phys.* **16** 217
- [28] Wang Y L , Ai Q , Chen X R , Cai L C 2007 *Chin. Phys.* **16** 3783
- [29] Saha S , Sinha T P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 8828

Elastic constants , electronic structure and optical properties of solid krypton under pressure by first-principles calculations *

Li Xiao-Feng^{1) 2) 3)} Peng Wei-Min²⁾ Shen Xiao-Meng⁴⁾ Ji Guang-Fu^{1) †} Zhao Feng¹⁾

¹⁾ *Laboratory for Shockwave and Detonation Physics , Institute of Fluid Physics , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 621900 , China)*

²⁾ *College of Physics and Electronic Information , Luoyang Normal University , Luoyang 471022 , China)*

³⁾ *College of Physical Science and Technology , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)*

⁴⁾ *School of Materials Science and Engineering , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200240 , China)*

(Received 25 September 2008 ; revised manuscript received 6 October 2008)

Abstract

The elastic constants , electronic structure and optical properties of solid krypton are investigated by first-principles plane-wave pseudo-potential method in the scheme of density functional theory within local density approximation and generalized gradient approximation. The calculated elastic constants under pressure are in good agreement with the experimental and theoretical data. The obtained Debye temperature and sound velocity increase with pressure. The electronic structure and optical properties under pressure are also predicted , the energy band gap decreases , optical absorption coefficient increases and absorption peak widens under pressure. This leads to easy electron transition and solid krypton probably becomes semiconductor.

Keywords : Kr , first-principles , elastic constants , optical properties

PACC : 7115M , 6220D , 6740K

* Project supported by the Science and Technology Foundation of Laboratory for Shockwave and Detonation Physics (Grant No. 9140C6711010805).

† Corresponding author. E-mail : cyfjkl@caep.ac.cn