

温稠密钛电导率计算

付志坚 贾丽君 夏继宏 唐可 李召红 权伟龙 陈其峰

A simple and effective simulation for electrical conductivity of warm dense titanium

Fu Zhi-Jian Jia Li-Jun Xia Ji-Hong Tang Ke Li Zhao-Hong Quan Wei-Long Chen Qi-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 065201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.065201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.065201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

稀疏膨胀过程中几何位形对于电子非局域热传导的影响

Influence of spatial geometrical curvature on nonlocal electron heat transport in expanding plasmas

物理学报.2015, 64(19): 195201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.195201>

氙等离子体输运性质计算

Calculation of transport coefficients of a xenon plasma

物理学报.2014, 63(20): 205201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.205201>

低温等离子体中 H₂(D₂ 和 T₂) 的振动分布

Vibrational distribution of H₂ (D₂ and T₂) molecules in low temperature plasma

物理学报.2014, 63(12): 125201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.125201>

三维柱腔内辐射输运的一维模拟

One-dimensional simulation of radiation transport in three-dimensional cylinder

物理学报.2013, 62(1): 015210 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.015210>

双温度氦等离子体输运性质计算

Calculation of two-temperature transport coefficients of helium plasma

物理学报.2012, 61(19): 195203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.195203>

温稠密钛电导率计算*

付志坚^{1)2)†} 贾丽君³⁾ 夏继宏¹⁾ 唐可¹⁾ 李召红¹⁾ 权伟龙²⁾ 陈其峰²⁾

1) (重庆文理学院电子电气工程学院, 重庆 402160)

2) (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国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

3) (重庆文理学院图书馆, 重庆 402160)

(2015年8月24日收到; 2015年11月6日收到修改稿)

温稠密物质是惯性约束核聚变、重离子聚变、Z箍缩动作过程中物质发展和存在的重要阶段. 其热力学性质和辐射输运参数在聚变实验和内爆驱动力学模拟过程中有至关重要的作用. 本文通过建立非理想 Saha 方程, 结合线性混合规则的理论方法模拟了温稠密钛从 10^{-5} — 10 g·cm⁻³, 10^4 K 到 3×10^4 K 区间的粒子组分分布和电导率随温度密度的变化, 其中粒子组分分布由非理想 Saha 方程求解得到. 线性混合规则模型计算温稠密钛的电导率时考虑了包括电子、原子和离子之间的多种相互作用. 钛的电导率的计算结果与已有的爆炸丝实验数据相符. 通过电导率随温度密度变化趋势判断, 钛在整个温度区间, 密度 0.56 g·cm⁻³ 时发生非金属相到金属相相变. 对于简并系数和耦合系数的计算分析, 钛等离子体在整个温度和密度区间逐渐从弱耦合、非简并状态过渡到强耦合部分简并态.

关键词: 温稠密钛, 线性混合规则, 电导率

PACS: 52.20.Hv, 52.25.Fi, 52.25.Jm

DOI: 10.7498/aps.65.065201

1 引言

温稠密物质 (warm dense matter, WDM) 是指介于固态和经典理想等离子体之间的一种物质形态. 它所对应的温度区间一般是在 0.1 — 100 eV 之间, 而其体系密度约在 0.001 — 10 倍的常态密度之间. 这一体系具有部分简并、强耦合、非理想的典型特征. 从 20 世纪末以来, 对于温稠密物质输运性质的关注越来越多^[1-6]. 这是因为温稠密物质输运性质的信息对于受控热核聚变以及天体物理研究有非常重要的意义, 是这些领域中需要标定的基本参数之一. 现在已有多种温稠密物质的状态方程和输运性质通过理论建模和实验得到研究. 如, 铝^[4,7-13]、铜^[1-3,14-21]、锌^[1,18,22-24]、

钨^[1,18,21,25-27]. 而钛作为一种重要的过渡金属, 在这个区域的输运性质无论是实验还是理论研究都相对比较少. 实验上, Saleem^[28] 把钛丝放到一个细玻璃管中, 通过对其加高电压, 从而产生一个很大的电流脉冲把钛丝加热汽化成钛等离子体, 测得钛在 10^{-1} — 3 g·cm⁻³、温度在 20000 K 的电导率; Renaudin 等^[4] 在一个封闭腔体内加强电场产生并测量了温稠密钛在 0.2 g·cm⁻³、温度在 10^4 — 3×10^4 K 的电导率; DeSilva 和 Vunnil^[1] 利用爆炸丝实验方法获得温稠密钛在 0.002 — 0.5 倍固态密度和内能在 2 — 30 kJ·g·m⁻¹ 的电导率. 本文建立了一种简单而有效的模拟温稠密钛的电导率的计算方法, 这种方法能够快速有效地获得钛在温稠密区的电离度和电导率, 从而能为气炮等动高压

* 国家自然科学基金 (批准号: 11074266, 11071025)、中国工程物理研究院科技发展基金 (批准号: 2013 A0101001)、中国工程物理研究院冲击波物理和爆轰物理国家重点实验室基金 (批准号: 9140 C670103150 C67289)、重庆市教育委员会科学技术研究项目 (批准号: KJ131222, KJ121209)、中国博士后科学基金 (批准号: 2015 M572497) 和重庆文理学院项目 (批准号: R2012DQ05) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jianzhifu@126.com

测量温稠密物质输运性质提供理论预估. 该方法分为两个部分: 第一部分, 通过非理想Saha方程计算温稠密钛的各级粒子组分分布和平均电离度; 第二部分, 建立一个线性混合规则计算温稠密钛的电导率的方法. 在第二部分方法中, 为计算电导率, 我们考虑了电子、原子、离子之间的相互作用. 在这之前的研究中已有对于铜等离子体电导率的成功应用^[2], 但是在对铜的计算中, 对于电子和原子动量散射截面设置为固定值. 对于温稠密钛, 这种动量散射截面是不适合的. 为此, 我们重新增加了适合钛的电子和原子的动量散射截面^[29]. 本文通过非理想Saha方程结合线性混合规则, 并考虑了恰当的电子、原子动量散射截面来计算温稠密钛的粒子组分分布和电导率, 希望能够为实验提供有益的参考.

2 理论方法

2.1 粒子组分分布的计算

首先, 耦合系数和简并系数是表征等离子体状态的两个基本参量. 离子-离子之间的耦合系数表示离子的平均静电势能与平均动能的比值. 简并系数表示热能与费米能的比率, 这个系数通过估计量子统计效应的重要性来决定体系是否存在于费米简并区^[30-34].

$$\Gamma_{ii} = \frac{Z_{\text{eff}}^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T} \left(\frac{4\pi \sum_{i=1}^Z n_i}{3} \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$\Theta = \frac{2m_e}{k_B T h^2} (3\pi^2 n_e)^{-\frac{2}{3}}, \quad (1)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数, T 代表温度, ϵ_0 是真空介电常数, n_i 表示第 i 级离子的粒子数密度, n_e 是自由电子的粒子数密度, m_e 是电子质量, h 是约化普朗克常数, Z_{eff} 是钛离子的有效电荷数^[9,35,36]. 一般定义 $\Gamma_{ii} \ll 1$ 表示体系处于近理想等离子体区域, $\Gamma_{ii} \leq 1$ 是弱耦合等离子体区域, $\Gamma_{ii} > 1$ 是强耦合等离子体区域^[32,34]. $\Theta > 1$ 表示体系处于非简并区, $\Theta < 1$ 表示体系处于简并区并且量子效应是重要的^[34].

在局域热动平衡条件下, 对于单元素等离子体的非理想Saha方程可表示为

$$\frac{n_i n_e}{n_{i-1}} = 2 \frac{U_i}{U_{i-1}} \left[\frac{2\pi m_e k_B T}{h^2} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{I_i^{\text{eff}}}{k_B T}\right)$$

$$(i = 1, \dots, Z), \quad (2)$$

其中, U_i 表示第 i 级离子的配分函数, h 是普朗克常数. 有效电离能 $I_i^{\text{eff}} = I_i - \Delta I_i$ 表示从第 i 级到第 $i+1$ 级电离过程的电离能, 而 ΔI_i 表示电离过程中的电离能降低,

$$\Delta I_i = \frac{(i+1)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_i^*}, \quad (3)$$

其中 e 是电子的电荷量, i 表示离子的电离级数, R_i^* 是用德拜长度 λ_D ^[37] 和离子球半径 a_i 共同表征的特征半径^[2],

$$R_i^* = \sqrt{\lambda_D^2 + \left(\frac{2}{3}a_i\right)^2}. \quad (4)$$

而德拜长度 λ_D 和离子球半径 a_i 由下面的公式表示:

$$\lambda_D = \left[\frac{k_B T \epsilon_0}{e^2 n_H \left(Z_{\text{av}} + \sum_{i=1}^Z \alpha_i \times i^2 \right)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$a_i = \left[\frac{3(i+1)}{4\pi n_H (1 + Z_{\text{av}})} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (5)$$

(5) 式中, Z_{av} 是平均电离度, n_H 表示所有重粒子的粒子数密度, $\alpha_i = n_i/n_H$ 表示第 i 级离子所占的摩尔百分比.

利用电荷守恒和粒子数守恒条件,

$$\sum_{i=0}^Z \alpha_i = 1,$$

$$\sum_{i=0}^Z i \alpha_i = Z_{\text{av}}. \quad (6)$$

并结合非理想Saha方程((2)式), 就可以计算得到温稠密钛的平均电离度和各级粒子的粒子组分分布.

另外, 内部配分函数 U_i 表示为

$$U_i = \sum_{i=1}^{\infty} g_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right), \quad (7)$$

其中 g_i 是统计权重, E_i 表示第 i 级离子的激发态能级. 为了使粒子组分计算达到收敛, 体系所需要的激发态能级由 $E_i \leq I_i^{\text{eff}} = I_i - \Delta I_i$ 决定. 对于钛的激发态能级, 我们采用 NIST 数据库的数据^[38].

2.2 电导率的计算

温稠密钛的电导率通过一个线性混合规则计算得到, 在这个线性混合规则中同时考虑了电子与电子和电子与离子的库仑相互作用以及电子

与原子之间的相互作用. 线性混合规则的表述如下 [9,39]:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_{ei}} + \frac{1}{\sigma_{en}}, \quad (8)$$

其中, σ_{ei} 和 σ_{en} 分别表示与电子-离子和电子-原子碰撞有关的电导率部分.

而与电子-离子碰撞相关的电导率表示为

$$\sigma_{ei} = \frac{T^{1.5}}{38Z_{av}^{ion}} \frac{\gamma_e(Z_{av}^{ion})}{\ln \Lambda}, \quad (9)$$

在这里, Z_{av}^{ion} 表示离子的平均电离度, $\ln \Lambda$ 是一个库仑对数项, 它与电子-离子的经典碰撞散射截面积分有关 [40,41]. 另外, $\gamma_e(Z_{av}^{ion})$ 可以写成 [42]

$$\gamma_e(x) = \frac{3\pi}{32} \left(1 + \frac{153x^2 + 509x}{64x^2 + 345x + 288} \right). \quad (10)$$

而电子与原子之间的电导率部分可以表示为

$$\sigma_{en} = \sqrt{\frac{\pi}{8k_B m_e}} \frac{z_{av} e^2}{T^{0.5} \alpha_0 \bar{Q}_{en}}, \quad (11)$$

其中 α_0 是钛原子的粒子组分分布, \bar{Q}_{en} 表示利用伯恩近似计算得到的电子与原子的动量传输散射截面 [29], 可以表示为

$$\begin{aligned} \bar{Q}_{en} &= \pi^3 (\alpha_D / 2r_0 a_B)^2 [A_\kappa^2 + 3B_\kappa \kappa r_0 \\ &\quad + 7.5C_\kappa (\kappa r_0)^2 - 3.4D_\kappa (\kappa r_0)^3 \\ &\quad + 10.6668E_\kappa (\kappa r_0)^4]^{-1}, \\ \kappa &= 1/\lambda_D, \\ k &= \frac{\sqrt{8m_e k_B T / \pi}}{\hbar}, \\ r_0 &= \sqrt[4]{\alpha_D a_B / 2Z^{1/3}}, \\ A_\kappa &= 1 + 2\kappa r_0 + \frac{7}{\pi^2} (\kappa r_0)^2 + \frac{\pi}{7} (\kappa r_0)^3, \\ B_\kappa &= \exp(-18\kappa r_0), \\ C_\kappa &= \frac{1 + 22\kappa r_0 - 11.3(\kappa r_0)^2 + 33(\kappa r_0)^4}{1 + 6\kappa r_0 + 4.7(\kappa r_0)^2 + 2(\kappa r_0)^4}, \\ D_\kappa &= \frac{1 + 28\kappa r_0 + 13.8(\kappa r_0)^2 + 3.2(\kappa r_0)^3}{1 + 8 + 10(\kappa r_0)^2 + (\kappa r_0)^3}, \\ E_\kappa &= 1 + 0.1\kappa r_0 + 0.3665(\kappa r_0)^2. \end{aligned} \quad (12)$$

以上公式中, α_D 是偶极化率, a_B 是玻尔半径, κ 是屏蔽长度的倒数, k 是电子波数, r_0 是截断半径.

3 结果与讨论

等离子体的耦合系数 Γ_{ii} 和简并系数 Θ 是表征等离子体状态的两个基本参数. $\Gamma_{ii} \leq 1$ 表示等离

子体处于弱耦合区, $\Gamma_{ii} > 1$ 表示等离子体处于强耦合区; 而 $\Theta \leq 1$ 表示等离子体处于部分简并或简并区, $\Theta > 1$ 表示等离子体处于非简并区, 等离子体中粒子的量子效应不明显. 图 1 给出了钛等离子体的耦合系数和简并系数在 10^{-5} — 10 g·cm $^{-3}$ 和 10^4 — 3×10^4 K 的密度温度区间随温度和密度的变化趋势. 从图 1 中可以看到, 在这一区域既存在弱耦合的钛等离子体, 又存在强耦合的钛等离子体. 根据耦合系数大于 1 表示等离子体为强耦合等离子体的判据, 钛等离子体在整个温度区间和密度高于 0.22 g·cm $^{-3}$ 变成强耦合等离子体. 而且当密度高于 0.56 g·cm $^{-3}$ 时, 体系的库仑相互作用变得更强, 与此对应的耦合系数 Γ_{ii} 从 10 增加到 216. 同时, 根据简并系数小于 1 表示等离子体处于简并区的判据, 当密度高于 0.35 g·cm $^{-3}$ 时钛等离子体处于简并区, 而密度低于 0.35 g·cm $^{-3}$ 时钛等离子体处于非简并或部分简并区. 并且在这一温度和密度区间, 温度对于简并系数和耦合系数的影响要弱于密度. 在整个温度区间密度低于 0.22 g·cm $^{-3}$ 时钛等离子体耦合系数小于 1, 表明钛等离子体处于弱耦合区. 而在密度高于 0.22 g·cm $^{-3}$ 时耦合系数大于 1 并逐渐增加, 表明体系库仑相互作用逐渐增强, 钛等离子体逐渐进入到强耦合区. 以密度在 0.22 g·cm $^{-3}$ 附近为界限, 钛等离子体逐渐从弱耦合等离子体态过渡到强耦合等离子体态. 与此同时, 在整个温度区间但密度低于 0.35 g·cm $^{-3}$ 时钛等离子体的简并系数大于 1, 这表明体系处于非简并区; 而当密度高于 0.35 g·cm $^{-3}$ 时钛等离子体体系的简并系数小于等于 1, 体系中热电子具有与费米能级相当的能量, 体系中量子统计效应逐渐显现出来, 这表明钛等离子体处于部分简并区. 所以以密度在 0.35 g·cm $^{-3}$ 附近为界, 钛等离子体逐渐从非简并等离子体向部分简并等离子体过渡. 另外, 等离子体的简并效应对于离子数密度低于 10^{24} cm $^{-3}$ 是可以忽略的 [43], 当体系的离子数密度高于上述密度时, 简并效应对于体系粒子之间的相互作用影响很大, 从而不能将之忽略. 对于本文模拟的温稠密钛等离子体, 对应最大密度 10 g·cm $^{-3}$ 的体系中的总粒子数为 1.25×10^{23} cm $^{-3}$, 而且在这一温度密度区间钛的最大电离度是 4, 模拟体系离子数密度远低于 10^{24} cm $^{-3}$, 所以在计算中忽略简并效应.

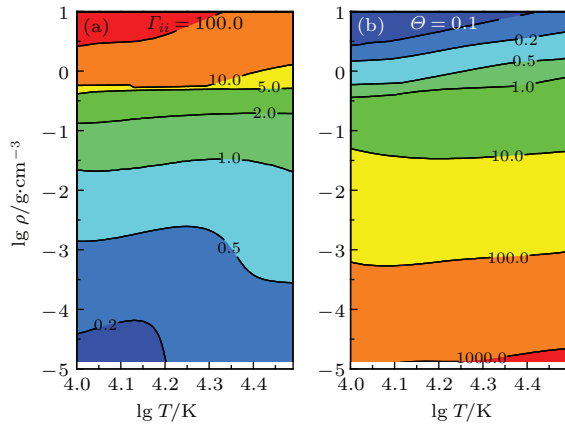


图1 (网刊彩色) 钛的耦合系数(a)和简并系数(b)随温度与密度的变化

Fig. 1. (color online) The coupling and degeneracy parameters of titanium plasma as a function of density and temperature.

为了获得详细的电离过程信息, 我们计算了钛等离子体的电离度和各级粒子组分在不同温度下随密度的分布. 如图2所示, 在整个温度密度区间钛等离子体发生了4次电离. 体系中产生Ti, Ti⁺, Ti⁺², Ti⁺³, Ti⁺⁴以及电子共6种粒子.

在10⁻⁵—0.1 g·cm⁻³密度区间, 随着密度的增加, 总的电离度是减小的. 这是由于在密度从10⁻⁵—0.1 g·cm⁻³区间, 随着密度增加, 钛离子结合电子复合成为钛原子的可能性变得更大, 同时化学平衡向钛离子结合电子成钛原子的方向进行, 也就是Ti←Ti⁺+e⁻. 因此电离度逐渐变小, 并且体系总的电离度在0.1 g·cm⁻³附近达到极小值. 当密度进一步增加时, 总的电离度增加, 钛等离子体逐渐发生三级电离和四级电离. 与此同时, 钛离子之间的排斥相互作用也在增加, 粒子间的平均动能增加导致体系压力增加, 最终随着密度增加钛离子结合电子成为原子的概率变小, 这时化学平衡转向反应正方向Ti→Ti⁺+e⁻, Ti⁺→Ti⁺²+e⁻, Ti⁺²→Ti⁺³+e⁻, Ti⁺⁴→Ti⁺³+e⁻. 因此电离度变大, 而此时压致电离处于主导地位. 在密度为10 g·cm⁻³时, 钛等离子体达到最大电离度4. 对于整个温度区间, 在密度小于1 g·cm⁻³时, 体系仍然存在钛原子, 钛等离子体是部分电离等离子体, 而当密度高于1 g·cm⁻³时, 钛原子近似被全部电离.

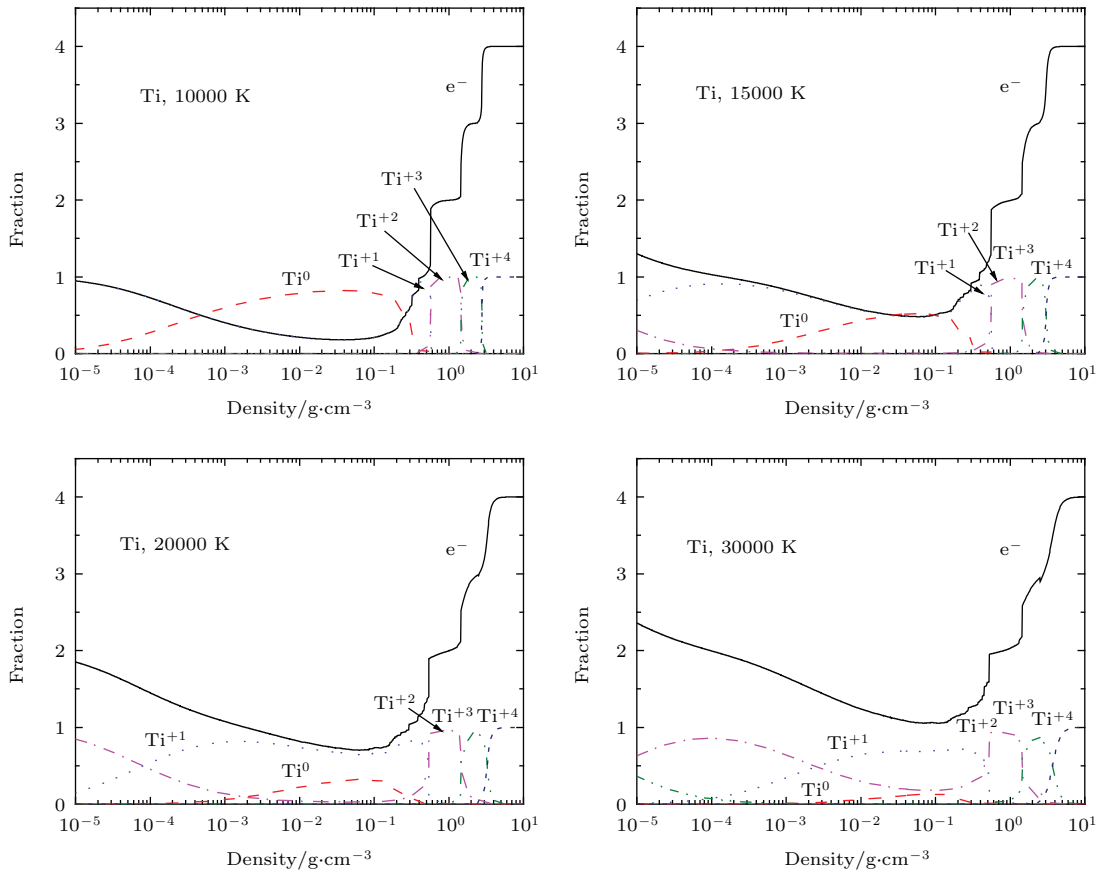


图2 钛等离子体的粒子组分和电离度在不同温度下随密度的变化

Fig. 2. The plasma composition and ionization degree of titanium plasma as a function of density at different temperatures.

通过上述电离度和各级带电粒子的组分分布, 就可以计算体系中的电导率. 电导率是表征体系导电能力的参数. 对于绝缘体和半导体来说, 其电导率相对较小, 电导率随着温度的升高而增加; 而在金属中, 由于存在自由电子, 电导率相对较大, 电导率随着温度的升高而减小. 在图 3 中, 我们计算得到了钛的电导率在不同温度下随密度的变化情况, 并且与 Saleem [28] 爆丝实验的电导率数据做了比较. Saleem 的实验是通过 LRC 放电回路给一个放入玻璃毛细管的钛丝施加一个高电压, 从而产生一个极高的电流脉冲, 使得钛丝在几百纳秒内从固体到汽化变成等离子体, 利用扫描相机记录长度为 l 的钛丝从熔化到汽化产生均匀膨胀圆柱形等离子体在直径为 $D(t)$ 随时间变化历史剖面、电压 $V(t)$ 和电流 $I(t)$ 随时间变化历史, 从而再由 $D(t)$ 导出质量和密度随时间的变化, 与此同时, 用光谱仪记录等离子体熔化过程中 420—500 nm 的发射光谱, 按 Planck 辐射拟合出等离离子体温度, 由电压 $V(t)$ 和电流 $I(t)$ 导出电阻 $R(t)$, 再由 $R(t)$ 导出 $\sigma = 4l/\pi D^2(t)R(t)$. 比较显示我们计算的电导率结果与爆丝实验数据较为符合. 从图 3 中可以看到, 在温度低于 30000 K 的电导率等温线上, 电导率有一个极小值, 并且极小值的位置随着温度升高向低密度方向移动, 而在温度 30000 K 时, 电导率是单调递增的. 电导率在密度低于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时随着温度增加而增加. 电导率随温度增加而增加的变化趋势与绝缘体或半导体的电导率随温度的变化规律相符, 并且在低于这一密度时钛电导率相对较小, 低于 $10^5 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$, 这表明在密度低于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时钛等离子体是非金属相. 另一方面, 钛的电导率在密度高于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时随着温度的升高而减小. 而电导率随温度增加而减小的变化趋势与金属的电导率随温度的变化规律相符, 在密度高于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时电导率是逐渐增加的并且高于 $10^5 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$, 这可以表明在密度高于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时温稠密钛是金属相. 这也就是说在温度低于 30000 K, 密度分别大于和小于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时, 电导率随温度的变化呈现相反的趋势. 这个现象与温稠密等离子体区域的非金属相-金属相相变有关. 这种相变是温稠密等离子体特有的一种现象, 在相变前后, 等离子体的电导率会有数量级上的差距, 会导致等离子体体系宏观导电性上发生变化. 而且上述现象也在其他温稠密等离

子体中发生, 如氢 [44]、氦 [45]、铝 [17,18] 等. 因此在温度低于 30000 K 时, 钛等离子体在密度时发生非金属相-金属相相变, 此时对应的电导率是 $1.5 \times 10^5 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$.

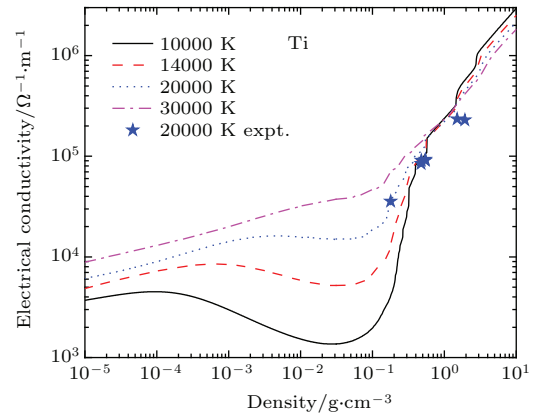


图 3 (网刊彩色) 温稠密钛电导率在不同温度下随密度的变化, 与 Saleem [28] 爆丝实验的电导率数据比较

Fig. 3. (color online) The electrical conductivity of titanium plasma as a function of density at different temperatures against the available explosive wire experiment in a glass capillary at $2 \times 10^4 \text{ K}$ by Saleem [28].

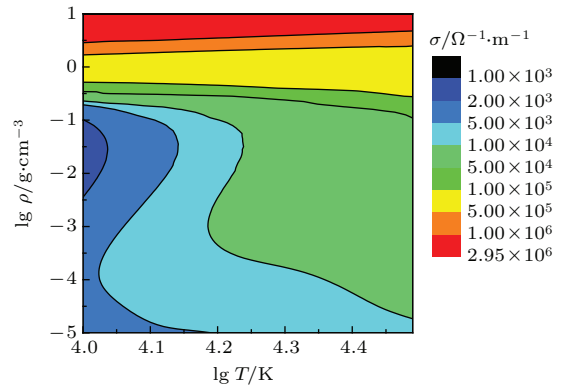


图 4 (网刊彩色) 温稠密钛电导率随温度和密度的分布

Fig. 4. (color online) The contour of electrical conductivity of titanium as a function of density and temperature.

图 4 中给出了钛等离子体在 10^{-5} — $10 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 和 10^4 — $3 \times 10^4 \text{ K}$ 密度温度区间的电导率随温度和密度变化的分布. 在整个区间, 电导率从 10^3 增加到 $10^6 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$. 从图中看出, 在密度低于 $0.35 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时, 电导率随温度的增加而增加; 同时, 在密度高于 $0.35 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时, 电导率随温度增加的变化越来越小; 当密度高于 $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时, 电导率随温度的增加而逐渐变小. 在图中较低的温度和中等密度区间, 钛等离子体的电导率在 10^3 到 $10^4 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$ 量级, 可以视为钛等离子体处于半

导体相, 而随着温度和密度升高电导率逐渐达到 $10^5 \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 量级, 这时钛已经变成导电的流体, 所以电导率随温度和密度的分布图也表明在温稠密钛中存在非金属相-金属相的转变.

4 结 论

通过考虑电子之间、电子与原子之间和电子与离子之间多种相互作用的线性混合规则, 我们计算了温稠密钛的电导率, 并与已有的爆丝实验数据相符合. 耦合系数和简并系数的计算表明, 钛等离子体在较低的温度和密度区间是非简并和弱耦合的, 而随着密度的增加, 温稠密钛逐渐转变为简并的强耦合的等离子体. 我们通过非理想 Saha 方程计算得到了各级粒子组分和平均电离度随温度和密度的变化趋势, 钛在整个温稠密区最高发生 4 次电离. 通过电导率对于温度和密度的计算, 温稠密钛会在密度为 $0.56 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 发生非金属相-金属相相变. 综上, 本文模型可以合理模拟钛在温稠密区的电导率, 进而为轻气炮等动高压测量金属在温稠密电导率提供理论预估.

参考文献

- [1] DeSilva A, Vunni G 2011 *Phys. Rev. E* **83** 037402
- [2] Zaghoul M 2008 *Phys. Plasmas* **15** 042705
- [3] Cl  rouin J, Renaudin P, Laudernet Y, Noiret P, Desjarlais M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 064203
- [4] Renaudin P, Blancard C, Faussurier G, Noiret P 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 215001
- [5] Fan D, Huang Z C, Huang J K, Wang X X, Huang Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 108102 (in Chinese) [樊丁, 黄自成, 黄健康, 王新鑫, 黄勇 2015 物理学报 **64** 108102]
- [6] Chen Y Q 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 205201 (in Chinese) [陈艳秋 2014 物理学报 **63** 205201]
- [7] Faussurier G, Blancard C, Renaudin P, Silvestrelli P 2006 *Phys. Rev. B* **73** 75106
- [8] Recoules V, Crocombette J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 104202
- [9] Kim D, Kim I 2003 *Phys. Rev. E* **68** 56410
- [10] Recoules V, Renaudin P, Cl  rouin J, Noiret P, Z  rah G 2002 *Phys. Rev. E* **66** 056412
- [11] Desjarlais M, Kress J, Collins L 2002 *Phys. Rev.* **E66** 025401
- [12] Krisch I, Kunze H 1998 *Phys. Rev. E* **58** 6557
- [13] Mostovych A, Chan Y 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 5094
- [14] DeSilva A, Kunze H 1994 *Phys. Rev. E* **49** 4448
- [15] DeSilva A, Katsouros J 1998 *Phys. Rev. E* **57** 5945
- [16] Tkachenko I, Fernandez de Cordoba P 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2222
- [17] Redmer R 1999 *Phys. Rev. E* **59** 1073
- [18] Kuhlbrodt S, Redmer R 2000 *Phys. Rev. E* **62** 7191
- [19] Grinenko A, Gurovich V T, Saypin A, Efimov S, Krasik Y E, Oreshkin V 2005 *Phys. Rev. E* **72** 066401
- [20] Barysevich A E, Cherkas S L 2011 *Phys. Plasmas* **18** 052703
- [21] Sheftman D, Krasik Y E 2010 *Phys. Plasmas* **17** 112702
- [22] Haun J, Kunze H, Kosse S, Schlanges M, Redmer R 2002 *Phys. Rev. E* **65** 46407
- [23] Haun J, Kosse S, Kunze H, Schlanges M, Redmer R 2001 *Contrib. Plasma Phys.* **41** 275
- [24] Haun J 2000 *Contrib. Plasma Phys.* **40** 126
- [25] Kloss A, Motzke T, Grossjohann R, Hess H 1996 *Phys. Rev. E* **54** 5851
- [26] Likalter A 1997 *Phys. Scr.* **55** 114
- [27] Saleem S, Haun J, Kunze H 2001 *Phys. Rev. E* **64** 56403
- [28] Saleem S 2001 *Ph. D. Dissertation* (Bochum: Ruhr-Universitat)
- [29] Desjarlais M 2001 *Contrib. Plasma Phys.* **41** 267
- [30] Redmer R, Ropke G, Beule D, Ebeling W 1999 *Contrib. Plasma Phys.* **39** 25
- [31] Adams J, Reinholz H, Redmer R, Mintsev V, Shilkin N, Gryaznov V 2007 *Phys. Rev. E* **76** 36405
- [32] Redmer R 1997 *Phys. Rep.* **282** 35
- [33] Recoules V, Lambert F, Decoster A, Canaud B, Cl  rouin J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 075002
- [34] Glenzer S, Redmer R 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1625
- [35] Kress J, Cohen J, Kilcrease D, Horner D, Collins L 2011 *Phys. Rev. E* **83** 026404
- [36] Kress J, Cohen J, Horner D, Lambert F, Collins L 2010 *Phys. Rev. E* **82** 036404
- [37] Zaghoul M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 026702
- [38] NIST Atomic Spectra Bibliographic Databases, Kramida A, Ralchenko Y, Reader J <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm/> [2014-9-10]
- [39] Kim D, Kim I 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 173
- [40] Zaghoul M, Bourham M, Doster J 2000 *Phys. Lett. A* **266** 34
- [41] Zaghoul M, Bourham M, Doster J, Powell J 1999 *Phys. Lett. A* **262** 86
- [42] Bespalov I M, Polishchuk A Y 1989 *Sov. Tech. Phys. Lett.* **15** 39
- [43] Salzmann D, Krumbein A 1978 *J. Appl. Phys.* **49** 3229
- [44] Reinholz H, Redmer R, Nagel S 1995 *Phys. Rev. E* **52** 5368
- [45] Kietzmann A, Holst B, Redmer R, Desjarlais M, Mattsson T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 190602

A simple and effective simulation for electrical conductivity of warm dense titanium*

Fu Zhi-Jian^{1)2)†} Jia Li-Jun³⁾ Xia Ji-Hong¹⁾ Tang Ke¹⁾ Li Zhao-Hong¹⁾
 Quan Wei-Long²⁾ Chen Qi-Feng²⁾

1) (School of Electrical and Electronic Engineering, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China)

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

3) (Chongqing University of Arts and Sciences Library, Chongqing 402160, China)

(Received 24 August 2015; revised manuscript received 6 November 2015)

Abstract

A linear mixture rule has been used to calculate the electrical conductivity of warm dense titanium plasmas in the density and temperature ranges of 10^{-5} – 10 g·cm⁻³ and 10^4 – 3×10^4 K, in which the interactions among electrons, atoms, and ions are considered systemically. In the first place, the coupling and degeneracy parameters of titanium plasma are shown as a function of density and temperature in the warm dense range. The warm dense titanium plasmas span from weakly coupled, nondegenerate region to strongly coupled, degenerate domain in the whole density and temperature regime. The titanium plasma becomes strongly coupled plasma at higher than 0.22 g·cm⁻³ and almost in the whole temperature range where the coupling parameter $\Gamma_{ii} > 1$. In particular, the Coulomb interactions become stronger at higher than 0.56 g·cm⁻³ where $10 < \Gamma_{ii} < 216$. At the same time, the titanium plasma is in the degenerate regime at higher than 0.35 g·cm⁻³ where the degeneracy parameter $\Theta < 1$, and is in the nondegenerate or partial degenerate regime at lower than 0.35 g·cm⁻³ where $\Theta \geq 1$. The influence of temperature on the coupling and degeneracy parameters is less than that of the density, and the plasma composition is calculated by the nonideal Saha equation felicitously. Thus the ionization degree decreases with increasing density at lower density, which is due to the thermal ionization in that regime where the free electrons have sufficiently high thermal energy. Meanwhile, the ionization degree increases with the increase of density at higher than 0.1 g·cm⁻³, in which the pressure ionization takes place in the region where the electrons have sufficiently high density and the collisions increase rapidly. There is a minimum for the ionization degree at about 0.1 g·cm⁻³, while the maximum ionization degree reaches 4 at 10 g·cm⁻³. In the whole temperature regime, the titanium plasma is mostly in the partial plasma domain at lower than 1 g·cm⁻³, and becomes completely ionized at higher than 1 g·cm⁻³. The calculated conductivity is in reasonable agreement with the experimental data. At a fixed temperature, there is a minimum in each of the ionization curves at lower than 3×10^4 K. And the position of the minimum is shifted towards decreasing density with increasing temperature. The conductivity monotonously increases as the density increases at a temperature of 3×10^4 K. At a constant density, the conductivity increases with increasing temperature for lower than 0.56 g·cm⁻³, while it decreases with increasing temperature for higher than 0.56 g·cm⁻³. This behavior is connected with the nonmetal to metal transition in a dense plasma regime. So the nonmetal to metal transition in

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11074266, 11071025), the Scientific Research Fund of Chongqing Municipal Education Commission of China (Grant Nos. KJ131222, KJ121209), the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2013 A0101001), the Foundation of Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, CAEP (Grant No. 9140 C670103150 C67289), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No.2015 M572497), and the Chongqing University of Arts and Sciences Foundation, China (Grant No. R2012DQ05).

† Corresponding author. E-mail: jianzhifu@126.com

dense titanium plasma occurs at about $0.56 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ and its corresponding electrical conductivity is $1.5 \times 10^5 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$. Finally, the contour of electrical conductivity of titanium plasma is shown as a function of density and temperature in the whole range. Its electrical conductivity spans a range from 10^3 to $10^6 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$. It can be seen that the titanium plasma gradually approaches the semiconducting regime as temperature increases. When the order of magnitude of the electrical conductivity reaches $10^5 \text{ }\Omega^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$, the plasma almost becomes conducting fluid in the higher density range. This also demonstrates that a nonmetal-metal transition has taken place in the warm dense titanium plasma.

Keywords: warm dense titanium, linear mixture rule, electrical conductivity

PACS: 52.20.Hv, 52.25.Fi, 52.25.Jm

DOI: [10.7498/aps.65.065201](https://doi.org/10.7498/aps.65.065201)