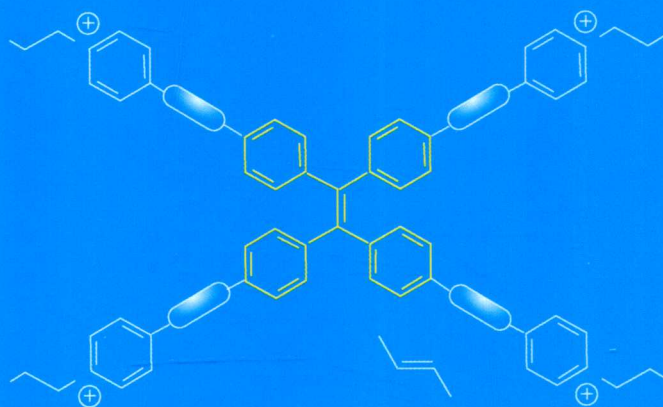


含能材料的 静态压缩特性

[美] Suhithi M. Peiris Gasper J. Piermarini 编
郑贤旭 王彦平 译



STATIC COMPRESSION OF
ENERGETIC MATERIALS



科学出版社

含能材料的静态压缩特性

Static Compression of Energetic Materials

[美] Suhithi M. Peiris Gasper J. Piermarini 编

郑贤旭 王彦平 译

科学出版社

图字: 01-2018-8367 号

内 容 简 介

本书总结概括几十年来典型含能材料在压缩状态下结构、性能、响应特性方面的研究及进展,较为全面地阐述了开展含能材料压缩特性研究所需的实验技术、数值模拟方法及典型的实验结果,详细分析并总结了含能材料在高温高压下的材料合成、结构变化、状态方程、化学反应动力学等基本的物理化学问题。书中有大量的图片与翔实的实验数据,并附有很有参考价值的文献资料目录。

本书适宜作为高压物理、高压化学的研究生教材以及相关学者深入钻研的指导资料,可供从事与含能材料基本物性研究、材料合成与制备、材料结构相变及化学反应动力学有关的高等学校院系、科研部门的研究生、教师和科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

含能材料的静态压缩特性/ (美)S.M.佩里斯(Suhithi M. Peiris), (美)G.J.皮耶马利尼(Gasper J. Piermarini)编; 郑贤旭, 王彦平译. —北京: 科学出版社, 2019.3

书名原文: Static Compression of Energetic Materials

ISBN 978-7-03-060443-9

I. ①含… II. ①S… ②G… ③郑… ④王… III. ①功能材料—静态压缩—研究 IV. ①TB34

中国版本图书馆CIP数据核字(2019)第014089号

责任编辑: 范运年 / 责任校对: 王 瑞
责任印制: 师艳茹 / 封面设计: 蓝正设计

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2019年3月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2019年3月第一次印刷 印张: 18 1/2

字数: 360 000

定价: 198.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

本书是由美国及欧洲的多位长期从事含能材料研究的学者合编而成的，并于2008年由 Springer 出版社出版。书中较为详细地总结了多年来从事含能材料压缩特性研究所需的理论模型、数值模拟方法、实验技术以及相关的实验数据和研究结果，是从事含能材料压缩特性研究为数不多的综述性著作。近年来，国内从事含能材料压缩特性研究的团队和学者日益增多，国家国防科技工业局(国防科工局)专门设立的“国防基础科研科学挑战专题”也将含能材料压缩特性作为重要的研究内容，但国内关于这方面的参考书非常少。译者长期从事含能材料微介观结构演化及化学反应动力学方面的研究，偶然读到这本著作，认为书中的作者都来自长期在含能材料领域从事研究工作的学者，书中的内容较为丰富，凝聚了该领域多年的研究成果，对于从事含能材料研究的人员具有较强的指导意义和参考价值，因此组织翻译此书，希望能够对从事含能材料研究的学者有所帮助。

本书共 8 章，涉及含能材料高压合成、结构变化、状态方程、化学反应动力学等方面的内容。书中主要内容包括高压 DAC 实验技术、多氮含能材料的高压合成、高压下含能材料的状态方程及相图、高压下黏结剂及聚合物的状态方程、含能材料的反应动力学、冲击加载下含能材料分子晶体的结构变化、分子动力学模拟、数值模拟缺陷对含能材料性能的影响等。本书以综述的方式详细介绍研究方法，同时提供翔实的实验数据，对相关研究具有较高的参考价值。当然，由于本书于 2008 年出版，因此并没有收集最近十年的研究成果，读者可以基于书中的团队及作者信息追踪这一领域最新的研究进展。

在本书的翻译过程中赵均、郭文灿、尚海林、于国洋、曾阳阳、何雨等同志做出了积极的贡献，译稿也得到杨延强、张增明、汤成龙等几位老师团队的细心校对，马骁承担了大量的编辑和修图工作。本书的出版得到“国防基础科研科学挑战专题”(Science Challenge Project, No. TZ2016001)的资助，同时得到科学出版社的大力支持。译者谨向上述个人及团体对本书出版所提供的支持与帮助表示衷心的感谢。由于译者翻译水平和经验不足，可能存在诸多翻译不够准确或不当的地方，恳请读者指正。

译 者

2017 年 6 月于四川绵阳

目 录

前言

第 1 章 金刚石对顶砧技术	1
1.1 引言	1
1.2 发明	2
1.3 密封垫技术的采用	12
1.4 DAC 在 X 射线衍射技术中的应用	14
1.5 红宝石荧光压力测量技术	20
1.6 静水压传压介质	23
1.7 一些基本型 DAC	30
1.8 偏振光学显微分析方法	37
1.9 猛炸药、推进剂和发射药的高温高压性能	38
1.9.1 RDX 和硝基甲烷的温度-压力平衡相图	39
1.9.2 热分解速率的压力依赖关系	45
1.9.3 硝基甲烷的分解化学反应机制	55
1.9.4 液体炸药的压缩特性	56
1.10 结论	61
参考文献	61
第 2 章 高氮含能材料的合成	66
2.1 引言	66
2.2 聚合氮	67
2.2.1 cg-N 的拉曼光谱	73
2.2.2 控制实验	75
2.3 分子态氮到聚合氮的转变	75
2.3.1 聚合氮的亚稳性及其回收	79
2.3.2 新型聚合氮合成的前景展望	81
2.4 结论	82
参考文献	82
第 3 章 炸药的状态方程及高压相	87
3.1 引言	87
3.2 状态方程	88

3.2.1 背景介绍	88
3.2.2 研究方法	90
3.2.3 数据	91
3.3 高压相	98
3.3.1 背景介绍	98
3.3.2 方法	99
3.3.3 数据	99
3.4 结论	105
参考文献	108
第4章 黏结剂及相关聚合物的状态方程	112
4.1 引言	112
4.2 状态方程	118
4.2.1 介绍	118
4.2.2 状态方程	119
4.2.3 热力学基础	120
4.2.4 经验和半经验状态方程	123
4.2.5 理论状态方程	129
4.2.6 结论	135
4.3 静态实验方法	135
4.3.1 热力学属性	136
4.3.2 体积膨胀方法	137
4.3.3 金刚石对顶砧方法	143
4.4 动态实验	157
4.4.1 高能炸药驱动的实验	157
4.4.2 炮驱动实验	159
4.4.3 黏结材料的 Hugoniot 数据	159
4.4.4 等熵压缩	165
4.4.5 特别专题: 聚合物在动态压缩下的行为	166
4.5 结论	172
参考文献	173
第5章 反应动力学	181
5.1 引言	181
5.2 动力学模型	181
5.2.1 背景	181
5.2.2 分解动力学	183

5.2.3 方法	185
5.3 数据	185
5.4 结论	193
参考文献	193
第 6 章 对分子晶体中冲击诱导变化的理解	195
6.1 引言	195
6.2 冲击压缩下的含能材料	196
6.2.1 微观机制	196
6.2.2 实验方法	198
6.3 非静水效应的影响	202
6.3.1 冲击压缩下的非静水效应	202
6.3.2 静态压缩下的非静水效应	203
6.3.3 高压下诱导的电子结构	205
6.4 非静水效应的影响	207
6.4.1 RDX 晶体中的 α - γ 相变	208
6.5 PETN 晶体的冲击点火	214
6.5.1 各向异性感度的机制	214
6.5.2 构象变化	215
6.5.3 冲击诱导分解过程	217
6.6 结论	219
参考文献	219
第 7 章 平衡态分子动力学模拟	226
7.1 引言	226
7.2 含能材料在介观尺度下的特性	227
7.3 分子动力学方法	228
7.4 静高压分子动力学模拟材料性质	230
7.5 模拟方法的设计	231
7.6 相互作用势能的发展	232
7.7 分子动力学模拟评估相互作用势	234
7.8 含能材料 MD 模拟中使用的相互作用势	235
7.8.1 反应模型	235
7.8.2 非反应模型	237
7.9 结论	245
参考文献	246

第 8 章 含能材料中的缺陷	257
8.1 当前该领域的现状及其挑战	257
8.2 含缺陷含能材料的结构及性质模拟	261
8.2.1 RDX 中的空位、孔隙及界面	261
8.2.2 包含刃型位错 RDX 晶体的电子结构	263
8.2.3 Fox-7 及 TATB 中分子的取向缺陷	266
8.2.4 Fox-7 及 TATB 中剪切诱导的化学分解	270
8.3 初始化学反应的模拟	273
8.3.1 RDX 中的电子态激发	274
8.3.2 FOX-7 起爆前躯体: 电荷捕获及电子激发	277
8.4 结论	279
参考文献	282

第1章 金刚石对顶砧技术

1.1 引言

通常来说,科学发展要么是突然性的和革命性的,要么需要经过多年演变,显然,金刚石对顶砧(diamond anvil cell, DAC)的发展属于后一种情况。1958年诞生以来,经过50多年的发展,DAC由一种相当粗糙的定性研究装置逐步发展成为精密的定量研究工具。现在,DAC能够稳定地加载静压力,最高可以达到几兆巴。同时,由于它的光学适应性、小的尺寸和轻便性,DAC可以适用于大量的科学测量技术。

在过去的几十年中,随着有关装置改进、装置新应用、实验结果的不断报道,DAC相关的研究在数量和质量上都有极大的增长。目前,DAC已经成为各学科开展各种静高压和温度变量实验的最佳实验装置选择。事实上,对含能材料的静高压和温度变量研究,DAC已是广泛应用且必不可少的研究装置。作者从来没有想到这种简易而优雅的设备,竟然如此广泛地被全世界不同学科的科学研究者应用和接受。因为DAC在科研团体中广为流传,也因为作者察觉到许多使用DAC的科学家却并不了解它的来龙去脉,也许还因为当前试用的DAC有如此多不同的设备改进,所以在本书的开篇,回顾一下DAC发明背后的历史是很有必要的。

众所周知,DAC是由美国国家标准局(NBS)发明的,该局1986年更名为美国国家标准与技术研究所(NIST)。DAC的发展展示了一个科学研究团体罕见的发明过程。相信详细地呈现该发明背后的动机是很有意义的。通过介绍最初简单的和后期更加精密的实验技术及实验结果,使读者了解DAC应用于含能材料研究的优点。将依次讨论以下五个方面的主要内容:①发明DAC的原因以及发明DAC的详细历史;②描述五种基本DAC构型及其在各种研究应用中的优缺点;③在NBS,采用红宝石荧光测量DAC中样品压力方法的开发;④特殊应用中传压介质的开发;⑤高低温加载能力的开发。接下来,将描述NIST和海军水面作战中心(NSWC)几种创新性的DAC应用结果,这些应用对含能材料研究特别有用。一是利用偏光显微技术探测单晶折射率变化,来研究压力诱导的多晶态,并测量相变压力;二是利用傅里叶红外吸收光谱技术,探测高压下热分解反应的相变,并得到动力学数据;三是利用X射线衍射技术(包括单晶和粉末衍射)和能量色散理论,

确认压力诱导多晶态的存在, 识别新相的晶体态。利用以上技术得到了环三亚甲基三硝胺(黑索今, RDX)和硝酸铵(NM)的热分解动力学及化学反应速率以及相行为等实验数据。

1.2 发 明

20 世纪 50 年代晚期, 最早的 DAC (180°光学透射窗口平衡臂型) 在华盛顿特区的 NBS 问世^[1]。在那时候, 本人还是一名就职于构造与微结构部的年轻科研工作者, McMurdie 是部门主管。DAC 正是在本部门发明的, 后来发展成一种精密的科学研究装置。那时候本人的工作还与高压研究无关。本人于 1956~1958 年在美国军队服役两年, 被分配到 Posner 的结晶学实验室发展一种快速 X 射线荧光技术, 目的是定量分析军方使用的牙科用汞合金。因为办公室和测试装置靠近高压实验室, 本人有机会与 DAC 发明团队成员形成亲密的个人关系, 因此, 也可以说本人亲历了 DAC 的发明过程。1961 年前, 第一篇描述 DAC 先驱的文章发表约 2 年后, 本人开始与 Weir 合作, 为 X 射线粉末衍射测量发展一种改良(液压)版平衡臂型 DAC^[2]。

现在回想起来, 四位科学家(Weir、Valkenburg、Lippincott 和 Bunting, 如图 1.1 所示)的合作是一个巧合。他们每个人都有各自的专业知识和科学技能, 这些知识和技能推动了 DAC 的问世。相当有趣的是, DAC 发展早期工作并没有得到 NBS 相关部门的认可和支持。相反, 出于直觉, 四位科学家认为高压是一个高产的研究领域, 自己能够在 DAC 发明中有所作为。刚开始时, 四位科学家是各自研究, 相互之间没有合作交流。

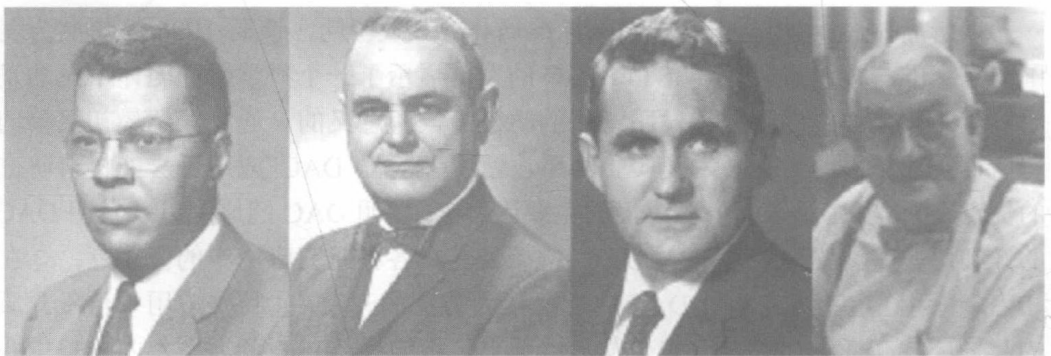


图 1.1 1957 年华盛顿特区国家标准局的四位科学家, 开始合作发展金刚石对顶砧压机
左起分别为: Weir, 1911~1987 年; Valkenburg, 1913~1991 年; Lippincott, 1920~1974 年; Bunting, 1892~1966 年

20 世纪 50 年代中期的早些时候, Weir, 一个训练有素的化学家被分配到皮革研究部, 研究皮革的物理性能对皮衣的影响。他使用活塞/汽缸液压装置改变压

力,通过监测 Hg 的侵入状况测量皮革的孔隙率^[3-5]。他着手这项研究是因为人们认为皮革的孔隙率影响皮衣的质量。Weir 开展这项实验是为了尝试验证这种观点。显然,Weir 在他的本职研究工作上工作效率很高,因此有额外的时间从事个人感兴趣的研究工作。至今 NBS 或 NIST 的许多人仍然在开展业余的个人兴趣研究。在 50 年代,NBS 的科学家开展业余个人兴趣研究是很常见的,只要不影响其本职工作研究和任务,而且某种程度上与之相关。Weir 改进了他的活塞/汽缸液压装置,用于测量许多固体的压缩性能,这其中包括硼硅酸盐玻璃、特氟龙(Teflon)、天然橡胶和合成橡胶的压缩效应,并研究其他现象,如压力诱导的多晶态,如图 1.2 所示。他发表了活塞位移测量结果,其中一些结果具有重要的工业应用价值,而且是首次得到报道^[6-9]。



图 1.2 Weir(左)向 Piermarini 解释他的样品封装方法
该方法在他早期获奖高压工作中采用,图中背景是研究使用的液压机

因为在高压研究中取得的杰出成就,Weir 获得了贸易部银奖。在研究工作中,Weir 对材料在高压下的性能和结构具有强烈的兴趣。他向管理层表示,他想从事高压下材料的性能和结构研究,而不是继续从事皮革研究。因为他的高压研究成果,Weir 进入 McMurdie 研究部继续从事高压研究。在与 NBS 其他科学家交流他的研究成果时,Weir 结识了 Valkenburg(同事称他为 Van),他们对高压研究进行了深入的探讨。

1958 年,美国国家标准局局长 Astin 宣布,目前以及 NBS 新的研究规划中要加强一些高压领域的研究工作。在通告中提到三项与 DAC 相关的内容:①发展得到高压的新方法和新技术;②发展研究高压下材料性能和结构的测试技术;③建立压标^[10]。直到 1959 年,发展 DAC 才正式列入 NBS 的研究计划。

20 世纪 50 年代早中期, Van 也在 McMurdie 研究部工作,主要从事热溶液法合成晶体,特别是以 Morey 爆炸法再结晶得到云母。那时云母作为绝缘体广泛用于真空管内,是一种具有战略意义的材料,被定为国家机密。云母的固体器件在

50 年代中期还没有被商业应用。Van 是一个训练有素的矿物学家，在压力对材料物理与化学性质的影响方面有深入的理解。和 Weir 一样，Van 也有其业余研究。他想发展一种高温高压方法来合成金刚石，但出于种种原因没能实现。他的这种热情源于几年前通用电气公司宣布以高温高压方法成功合成了金刚石，那时候这是科学界一项巨大的技术成就。Van 用一个由活塞/汽缸液压装置和高温 NBS 型自校准四面体砧结合而成的装置，开展他的金刚石合成研究^[11, 12]，如图 1.3 所示。

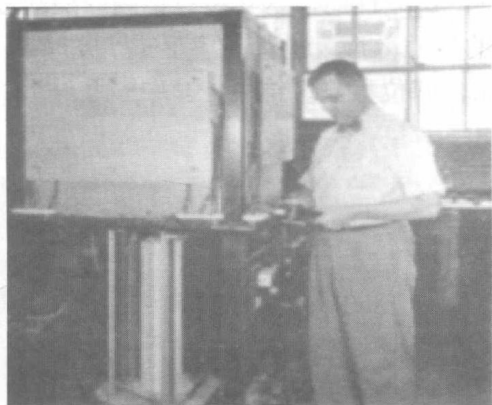


图 1.3 Van 正在云母合成、结晶和重结晶研究工作中调整高温炉的工作参数

据本人回忆，Weir 向 Van 表示他迫切希望加入研究，以便在这个新生的高压领域展开合作。随着固体元件的引入，云母不再是战略材料，Van 的研究项目随之终止。还有早些年 Bridgman 因为高压物理方面的工作被授予诺贝尔奖，这件事可能影响了他们的动机。最后 Weir 说服了 McMurdie 研究部，使之相信他加入 Van 的研究不但会使他们受益，也会使整个研究部受益。因此，从 1957 年开始，Weir 和 Van 开始在同一个实验室共同致力于高压研究。他们与同在 McMurdie 研究部的 Bunting 在一个大的实验室工作，如图 1.4 所示。实验室位于 NBS 工业大楼的



图 1.4 Bunting 的办公地点就在高温炉实验室

二楼,大楼坐落于特区西北部的 van Ness 大街(现已拆除,成了哥伦比亚大学校区)。Bunting、Weir 和 Van 都与 Lippincott 教授在无机材料的红外吸收光谱研究方面有合作。Lippincott 教授是一位来自马里兰大学的客座研究员和顾问,专业知识和技能是吸收光谱,特别是红外光谱,他们合作研究并发表了关于温度诱导二氧化硅和二氧化锆多晶态的研究结果。矿物研究部主任 Earl Schoonover 推动与部门外的组织(如当地大学)开展合作研究。马里兰大学和其他政府部门帮助 NBS 开展新领域的研究工作,就是这样的典型事例。

四位科学家同处一室,各自独立地进行研究工作,并与 Lippincott 在红外光谱方面开展合作。这样的工作条件方便他们开展日常交流,交流日常科学兴趣。在这样相对自由的后卫星时代实验室环境中,研究经费充足。事实上,本人记得一位高层管理人员,矿物研究部主任 Schoonover,曾经对一位实验科学家说过:“不要担心经费来源,专心做你的科研工作。”在这种如今少见的工作条件下,很快他们中有人提出应该发明一种小型化的高压装置,以在高压研究领域取得重大科学突破,这种装置具有 180° 的光学透明窗口,允许开展高压下材料红外吸收光谱测量。这种灵感来源于 Lippincott 的光谱学背景。在他们的交流讨论中,他经常提出这个话题,认为这样的装置是一种探测物质中原子相互作用行为的高效工具。他认为不同于温度,温度不能超过研究中固体热稳定性和热力学零度所施加的限制,(而在这种装置中)唯一的极限是固体破碎或者压力容器本身的压力极限。Lippincott 对这种能够测量和解释压力对红外光谱影响的装置可能感到很兴奋,这是以往从未做过的。他说如果他们成功了,这将是红外光谱研究领域和高压研究领域的一个重大突破。这些已经足够说服四个人(开展这项研究探索)。他们决定发明这样一种装置。不同于之前的个人业余兴趣研究,这次是四位科学家的合作,并且完成这项工作可能需要花费他们一年的业余时间。需要说明的是,他们研究的主要推动力不是发明压标,尽管压力信息对他们也很重要,但高压下固体的红外光谱测量只是一种研究原子相互作用力和化学键的方法。这种光谱技术受限于高压装置,装置必须设计和制造得足够小才能放进样品腔,而且样品腔的红外部分必须对红外辐射透明。

他们第一次尝试不幸失败了。这次尝试基于 1957 年首次发表的一种设计方案^[13]。这种粉末样品压力加载方案,一个汽缸中插入两个对顶活塞,挤压活塞就会压缩两者之间的样品。一个有圆柱状孔的大金刚石单晶用来装样品,开展 X 射线衍射实验。对于红外吸收光谱实验, Van 从史密森研究所免费得到一个 7.5 克拉的 II 型金刚石单晶(低红外吸收)。免费获得的理由是这种坚硬的石头将用于在 NBS 开展的特殊目的的研究中,而且在实验过程中它很可能被损坏。在金刚石上钻了一个直径 0.4mm,贯穿两个抛光表面的孔洞。两个结合紧密的钻棒插入“圆筒”挤压粉末样品。为了提高压力,使用 Weir 制作的简单紧固装置,少量移动钻

棒就会在钻棒末端产生压力,几次加压后金刚石孔洞径向产生了裂纹,裂纹随着后来的压力加载不断扩展,如图 1.5 所示。金刚石最终碎裂成几块,这主要是因为之后的压力加载过程中钻棒轴向对准很难保持,导致裂纹进一步扩展,最终破碎。这种设计的装置实验很快终止,并且也不会有进一步的实验,因为即便出于科研价值的目的,也没有谁或哪一个机构组织会再捐赠这种尺寸的金刚石。

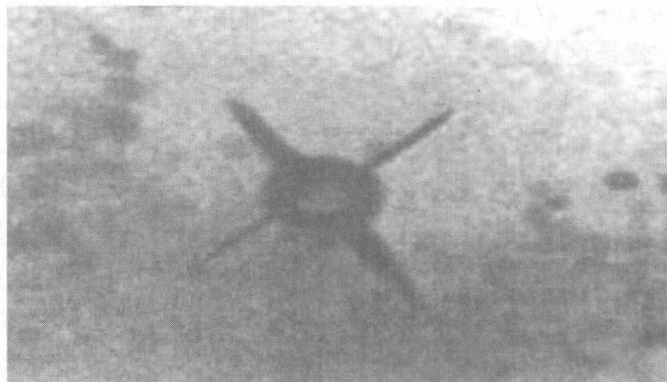


图 1.5 沿金刚石钻孔径向发展的裂纹

这样,他们不得不提出新的装置设计方案。经过多次讨论后,最终达成一致,同意采用 Weir 提出的一种非常简单装置设计方案,该方案采用 Bridgman 对顶砧原理^[14,15]。诺贝尔获奖者,高压研究之父 Bridgman,是使用两个加载平面对顶砧压缩材料先驱,如图 1.6 所示。前面提到,Weir 进行了数年压力对皮革质量的影响研究,掌握了丰富的实验技术知识。他提出的对红外辐射透明的对顶砧,可能是最简单的设计方案,特别是考虑到他们必须利用业余时间来制造这个装置,于是都同意采用这个方案。

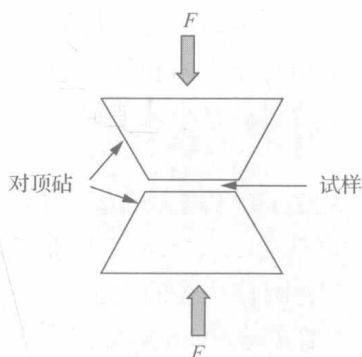


图 1.6 Bridgman 对顶砧的基本构造

加载力 F 推动两个对顶砧(通常是非常硬的材料,如碳化钨)挤压在两者之间小区域内的样品。

加载力通常由液压机产生。对于给定的加载力,砧面面积越小,样品所受压力越大

这几位 NBS 的科学家都知道, 金刚石是对顶砧材料的最佳选择, 因为它具有高硬度、高压压缩强度、高红外透过率。为了获得最佳红外透过率, 特别是在研究原子相互作用力的红外特征谱区域, 他们必须得到稀少的 II 型金刚石或者至少需要金刚石主要表现 II 型特性。而多数金刚石表现出介于 I 型和 II 型金刚石之间的特性。

数量稀少的 II 型金刚石可用于红外显微光谱研究, 是因为它们能够经受住高压加载。采用小巧的对顶砧装置, 仅需要微克量级的样品, 因此非常小的便携装置就可以产生所需的压力加载。但在当时, 他们不知道从哪里得到 II 型金刚石^[16]。这项工作此时还是个人业余研究, 没有经费支持。McMurdie 研究部当然不会同意他们购买金刚石, 特别是这些金刚石在实验过程中将会挤压在一起, 非常可能破碎, 最终像他们早期实验使用的 7.5 克拉金刚石一样。无论如何, 即使没有财政支持, 他们还是得想出办法。这时候 Van 的矿物学背景起到了关键作用, 他想到了一个绝妙的解决方案。经过他的努力, 他从总务管理局 (General Services Administration, GSA) 成功得到 1100 颗切割打磨过的钻石。GSA 保存了大量美国海关从走私犯手中没收的金刚石。不同于现在, GSA 会定期拍卖没收的走私钻石, 在 1957 年拍卖走私钻石是被禁止的, 这些走私钻石堆积在 GSA 的金库中, 被无限期保存。McMurdie 研究部出具了文件, 申明这些钻石将专门用于 NBS 的高压实验, 而且钻石很可能在实验过程中损坏。GSA 同意转交给 NBS 约 1100 颗切割打磨过的钻石, 每颗钻石重约 1/3 克拉。我确信如果没有得到这些免费的钻石, 制造高压装置的努力即使不会被完全终止也肯定会严重受阻。无论如何, 如果没有这些免费钻石, 四位科学家的这项合作研究不会如此容易地深入下去。

Bunting 和 Van 对这 1100 颗钻石进行了红外透过率及其他性能测试, 最后发现仅有 55 颗主要表现出 II 型金刚石特性, 适合用作红外透射实验的对顶砧, 红外透射率测试典型结果如图 1.7 和图 1.8 所示。现在他们有了可用的金刚石, 但还要将金刚石加工成对顶砧, 并且制造出给金刚石砧加载压力的机械装置。Weir 准备利用旧车床、钻床、弓锯、锉刀、旧高速金刚石砂轮, 以及其他可以从他的实验室

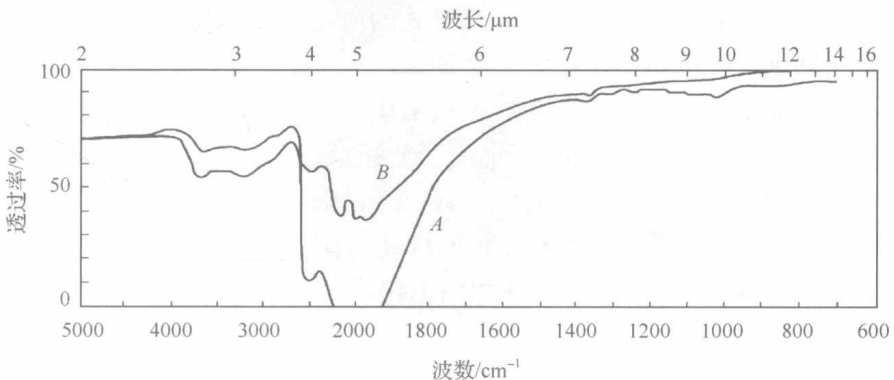


图 1.7 II 型金刚石 (2~4mm 厚) 的典型红外光谱 (A) 和薄 II 型金刚石 (1mm 厚) 的外光谱 (B)

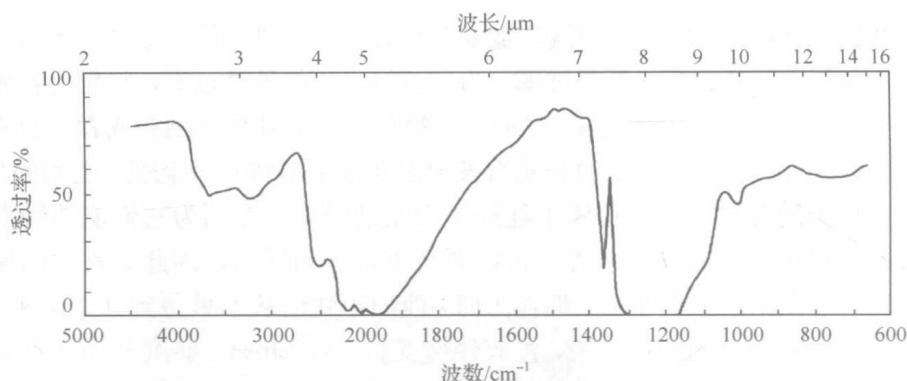


图 1.8 I 型金刚石(2~4mm 厚)的典型红外光谱

得到的工具来完成这两个程序。这些简陋的工具决定了如何设计和制造高压装置。本来想当然地以为简陋工具会极大地阻碍实验进展，结果却带来了极大的好处，因为简陋工具和红外光路的限制，要求装置设计得极为简易。

最早的 DAC 设计结构留在 Weir 手中，Weir 有设计和制造的爱好，他确实也做得很好。Weir 更倾向于自己动手加工，很少送交车间加工，即使这是公事。常听他说：“我没有那么多时间去等，因为这将会花大约 1 周，而且我还得先画一张精确的设计图给车间。我认为我应该自己去完成它。”他就是这样完成的 DAC 装置。因为没有得到金刚石砧成品，所以经过 Van 和 Bunting 挑选的 II 型金刚石还需要加工。打磨尖端或者打磨底面得到一个面积约 0.5mm^2 的小平面，这是最简单的工作。Weir 亲自用镶嵌金刚石颗粒的高速砂轮，将挑选出的 II 型金刚石打磨好，打磨过程中用自制夹具，使打磨的底面保持平行于金刚石台面。几颗金刚石，通常是 10 颗，同时用低熔点焊锡紧固在夹具中，这样可以同时打磨多个金刚石砧。

尽管他们每个人都对夹具的总体设计提出了建议，但最终的决定权还是交给了 Weir，因为毕竟还是得他用能够得到的工具来加工。在他们对平衡臂型 DAC 设计达成一致后，Weir 立刻开始自己制造。这套设计的基本结构一直保持到现在。Weir 仅使用实验室拥有的工具，即一个老式的南弯机床，我记得它有一个很粗糙发出噪声的轴承，一个电钻压机，一个钢锯，一个旧的金刚石高速砂轮，以及其他任何可以完成工作的东西，未完成这项工作。几个星期后，经过数次实验和失败，最终得到这个装置，如图 1.11 所示。通过该装置，他们第一次成功地实现了压力调节，并观察和测量了压力对红外吸收光谱的影响。这个手工制造的简易装置，成为后续 180° 光学透明金刚石对顶砧设计的原型，开创了高压研究的新纪元。这个原型装置的截面示意图如图 1.9 和图 1.10 所示。

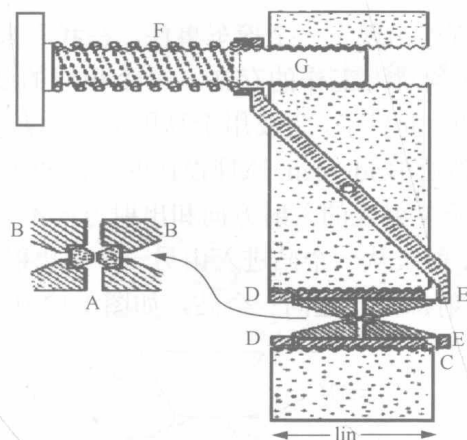


图 1.9 1957/1958 年 Weir 制作的设计简洁的平衡臂型 DAC 示意图

操作时，旋紧螺丝 G 挤压弹簧通过平衡臂施加压力给 E。对顶活塞 B，通过支柱环 D 固定在大工作台面 C 上。

对顶活塞 B 包含了钻石砧 A。施加压力后，金刚石对顶砧就相互挤压。工作台尺寸仅为 1in (1in=2.54cm)，放置在图 1.10 中的小型红外装置中

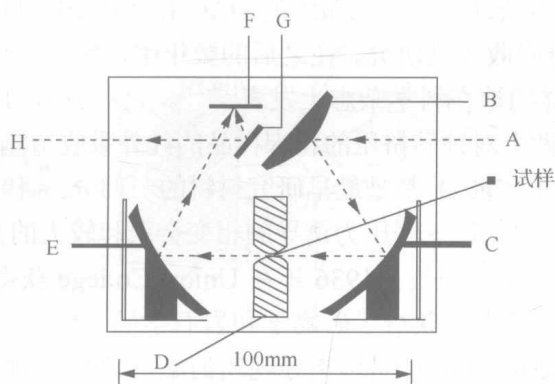


图 1.10 设计的红外光路 (A 到 H)

D-DAC; B-凸透镜; C 和 E-凹面聚焦镜; F 和 G-平面反射镜

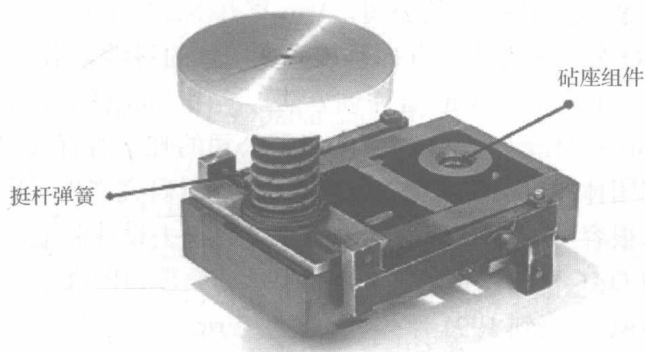


图 1.11 Weir 手工制造的 DAC 实物图

现收藏在 NIST 的 Gaithersburg 博物馆