

МЕХАНИКА

MECHANICS

Научная статья

УДК 532.593+536.711

doi: 10.17223/19988621/90/5

**Малопараметрическое уравнение состояния графита
для описания поведения сплошных и пористых образцов
в ударных волнах и волнах разгрузки**

Румия Катдусовна Бельхеева

*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия,
rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru*

Аннотация. Построено малопараметрическое уравнение состояния, определены его параметры, позволяющие описывать поведение графита для широкого диапазона плотностей и температур. Смесь графита с металлами и пористый графит рассматриваются как простые термодинамически равновесные смеси. Для коэффициента Грюнайзена используется логарифмическая зависимость от плотности. Рассчитанные с использованием этой модели ударные адиабаты для смесей графита с металлами и для образцов графита с различными начальными пористостями, кривые повторного сжатия и изоэнтропы разгрузки оказываются близкими к имеющимся экспериментальным данным.

Ключевые слова: ударная адиабата, изоэнтропа разгрузки, термодинамическое равновесие, однотемпературное приближение, односкоростное приближение, коэффициент Грюнайзена

Для цитирования: Бельхеева Р.К. Малопараметрическое уравнение состояния графита для описания поведения сплошных и пористых образцов в ударных волнах и волнах разгрузки // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 50–63. doi: 10.17223/19988621/90/5

Original article

**Low-parametric equation of state for graphite describing solid
and porous samples under shock and unloading waves**

Rumiya K. Bel'kheeva

*Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation,
rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru*

Abstract. This study is aimed to obtain the parameters of the graphite equation of state represented as the Mie–Grüneisen equation of state. Graphite with metals and the porous

graphite are considered as simple thermodynamically equilibrium mixtures. The equilibrium state is determined by the conditions of equal pressure, temperature, and velocity of the components in the mixture. Thus, the motion of the multicomponent medium can be described as the motion of a continuum with a special equation of state that takes into account the properties of the mixture components and their concentration, which significantly reduces the number of equations. For the Grüneisen parameter, a logarithmic dependence on density is used, which adequately describes the variation in the Grüneisen parameter for both normal and anomalous behavior of shock adiabats.

The increasing scope of the equation of state is a result of comparing experimental data with calculations for the following: 1) shock-wave loading of porous materials to cover the range of higher temperatures; 2) double compression of the samples to cover the range of increased densities; 3) isentropic expansion of samples to cover the range of low densities; and 4) sound velocities, which characterize the compressibility of matter, slope of the Poisson adiabat on the shock adiabat, and propagation velocity of the weak shock waves and unloading waves through the compressed matter.

The comprehensive analysis confirms that the proposed model of the equation of state for graphite is applicable to practical applications.

Keywords: shock adiabat, unloading isentrope, thermodynamic equilibrium, one-temperature approximation, one-velocity approximation, Grüneisen parameter

For citation: Bel'kheeva, R.K. (2024) Low-parametric equation of state for graphite describing solid and porous samples under shock and unloading waves. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 50–63. doi: 10.17223/19988621/90/5

Введение

Ни одну современную отрасль невозможно представить без углеродных материалов. Углерод используется в ракетостроении, авиационной и химической промышленности, металлургии, дорожном строительстве, ювелирном деле. Важнейшей отраслью промышленного производства является черная металлургия, в которой углерод – один из незаменимых компонентов при производстве чугунов, сталей и сплавов. С изменением доли углерода в сплавах с железом значительно меняются свойства стали, содержание углерода влияет на твердость, прочность, пластичность, вязкость.

Для того чтобы описывать поведение смесей и сплавов, содержащих углерод, и изучать влияние углеродных добавок на их свойства, необходимо иметь уравнение состояния углерода, достоверно описывающее поведение самого углерода. Углерод принимает различные формы – аллотропные модификации – кристаллические, аморфные и кластерные. Кристаллические модификации углерода существуют в виде структур с различными правильными решетками атомного типа, это алмаз, графен, графит, карбин, фуллерен, углеродное волокно и др. Алмаз и графит являются наиболее исследованными кристаллическими модификациями углерода. Аморфные модификации углерода – кокс, бурый и каменный уголь, сажа – содержат разупорядоченную структуру монокристаллического графита и всегда включают в себя некоторую долю примесей. Цель данной работы – получение параметров уравнения состояния графита, при этом не будет производиться детализация разновидностей графита.

Математическая модель уравнения состояния пористой смеси

Потребности современной практики – получение материалов с заданными свойствами, динамическое компактирование веществ и другие взрывные технологии – обуславливают появление новых моделей уравнения состояния. Уравнения состояния веществ служат для описания поведения материалов и используются для замыкания систем уравнений движения при математическом моделировании различных процессов. Наиболее часто при построении уравнений состояния используются данные по ударному сжатию конденсированных веществ. Для того чтобы расширить область применения уравнений состояния, дополнительно используют экспериментальные данные по ударно-волновому нагружению пористых материалов, двукратному сжатию образцов, скоростям звука и изоэнтропическому расширению образцов. Совокупное использование всех этих данных позволяет построить уравнение состояния вещества, которое в полной мере способно описать его поведение.

При построении уравнения состояния используются упрощенные модели, которые описывают основные характеристики изучаемого процесса или явления. Уравнения состояния функционально связывают термодинамические переменные – давление, плотность и температуру (или энергию), а параметры уравнения состояния определяют с помощью экспериментальных данных. При математическом моделировании ударно-волновых явлений для описания поведения конденсированных веществ чаще всего используется уравнение состояния в форме уравнения Ми–Грюнайзена

$$P = P_X + P_T. \quad (1)$$

Для упругой составляющей давления используется уравнение Тета $P_X = A[(\rho/\rho_0)^n - 1]$, тепловая составляющая давления задается соотношением $P_T = \gamma \rho E_T$. Здесь ρ – плотность среды, ρ_0 – параметр уравнения состояния (в случае конденсированного вещества это его плотность при нормальных условиях), A , n – константы, характеризующие вещество, γ – коэффициент Грюнайзена, E_T – тепловая энергия. Использование единственной подгоночной константы n – показателя сжимаемости – делает это уравнение простым в использовании, а связь между давлением и плотностью – наглядной. Второй параметр – коэффициент сжимаемости вещества A – задается зависимостью $A = c_0^2 \rho_0/n$, где c_0 – объемная скорость звука при нормальных условиях.

Внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих:

$$E = E_X + E_T. \quad (2)$$

Упругие слагаемые давления и энергии P_X и E_X связаны зависимостью

$$E_X = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_X - \gamma \rho c_v T_0}{\rho^2} d\rho, \text{ тепловой вклад во внутреннюю энергию задается соотношением}$$

$E_T = c_v(T - T_0)$, где c_v – удельная теплоемкость, T – температура, T_0 – нормальная температура.

При описании тепловой части давления P_T особое внимание уделяется коэффициенту Грюнайзена. Считается, что величина γ уменьшается с ростом интенсивности ударных волн, поэтому, как правило, в большинстве работ, посвященных ударно-волновому нагружению, коэффициент Грюнайзена описывается зависимостью $\gamma \sim \rho^{-l}$ ($l > 0$). Применение этой формулы при математическом

моделировании экспериментов по ударно-волновому нагружению сплошных материалов при очень высоких давлениях не дает приемлемого описания. При расчете ударных адиабат для материалов с высокой пористостью использование этой зависимости приводит к тому, что коэффициент Грюнайзена возрастает с ростом интенсивности ударной волны. Это вызвано тем, что конечная плотность ударно-сжатого высокопористого вещества оказывается меньше начальной нормальной плотности, отношение ρ_0/ρ становится большим единицы ($\rho_0/\rho > 1$). Такое поведение коэффициента Грюнайзена противоречит наблюдениям. В работах [1–3] отмечается необходимость учета влияния на коэффициент Грюнайзена и температуры, и плотности при значительных сжатиях. В [4] приведен способ описания зависимости коэффициента Грюнайзена от температуры. Логарифмическая зависимость коэффициента Грюнайзена от относительной плотности

$$\gamma = \gamma_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{\ln \frac{\rho}{\rho_0}}{\rho_0}}, \quad (3)$$

предложенная в [5], позволяет обойти затруднения, вызванные не отвечающему требуемому поведению коэффициента Грюнайзена. В этом случае коэффициент Грюнайзена будет уменьшаться как с увеличением плотности вещества в ударной волне, так и с ее уменьшением при аномальном поведении ударных адиабат, так как знак логарифма зависит от величины аргумента, и при $\rho_0/\rho > 1$ показатель становится отрицательным.

Для описания тепловой части давления при использовании выражения (3) подбирается только один подгоночный внешний параметр γ_0 . В этом случае уравнение состояния (1) приводится к виду:

$$P = A \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right] + \gamma_0 \rho_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1 - \frac{\rho}{\rho_0}} c_v (T - T_0), \quad (4)$$

в котором используются только два внешних параметра n и γ_0 . Как правило, малопараметрические уравнения состояния имеют более узкий диапазон применимости, но более наглядно демонстрируют физические результаты. В данном случае использование для коэффициента Грюнайзена зависимости (3) приводит к увеличению диапазона применимости уравнения состояния (4) как для больших значений давлений, так и для больших значений пористости. Многие предлагаемые в настоящее время уравнения состояния [6–10] характеризуются широким диапазоном применимости и хорошей точностью описания экспериментальных данных. Это достигается за счет привлечения большого количества подгоночных параметров. При этом нахождение численных значений этих параметров представляет собой отдельную сложную вычислительную задачу, которая часто не имеет однозначного решения.

В настоящей работе пористые материалы и пористые многокомпонентные смеси считаются простыми гетерогенными средами. Это означает, что компоненты в смеси не образуют химические связи и не взаимодействуют на атомарном уровне. Поры герметичны и заполнены воздухом. Плавления и выделения газобразных продуктов из конденсированных сред под действием ударной волны не происходит, возможные полиморфные превращения не рассматриваются. За по-

ристость принимается отношение плотности конденсированной среды к плотности пористой среды. Совпадение давлений, температур и массовых скоростей в составляющих смеси является условием термодинамического равновесия. В этом случае возможно гетерогенную среду рассматривать как однородную среду, в уравнении состояния которой учтены вклады составляющих и их концентрации, что многократно сокращает число уравнений в математической модели. Основы построения движения модели гетерогенной среды изложены в работе [11]. В [12, 13] приведен способ описания движения гетерогенной среды как однородной в случае, когда единым образом заданы уравнения состояния компоненты и смеси. В [14] показано, что уравнения состояния вида (1) применимо для описания поведения воздуха при сильных импульсных нагрузках. В [13] приведены соотношения, с помощью которых параметры уравнения состояния N -компонентной смеси A, c_0, n, γ_0 вычисляются через соответствующие параметры уравнений состояния и массовые концентрации компонентов для простых многокомпонентных смесей:

$$n = \frac{R_1 R_3}{R_2^2} - 1, \quad A = kA_N - \frac{nR_2}{R_1}, \quad \rho_0 = \frac{1}{R_1} \left(\frac{A}{P + kA_N} \right)^{1/n},$$

$$\gamma_0 = \frac{n}{c_v} (\rho_0 R_1)^{\ln(\rho_0 R_1)} R_4,$$

где

$$R_1 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i}, \quad R_2 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i} \frac{kA_N - A_i}{n_i},$$

$$R_3 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + kA_N} \right)^{1/n_i} (n_i + 1) \left(\frac{kA_N - A_i}{n_i} \right)^2, \quad R_4 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i \gamma_{i0} c_{vi}}{n_i} \left(\frac{P + kA_N}{A_i} \right)^{1/n_i} \frac{1}{n_i^2} \ln \frac{A_i}{P + kA_N}.$$

Здесь $A_1 < \dots < A_N$, в [13] показано, что значение параметра k , равное двум, удовлетворяет условию сходимости для всех компонентов.

Отсюда следует, что, подобрав два параметра – показатель сжимаемости и начальное значение коэффициента Грюнайзена n, γ_0 – для каждого компонента и воспользовавшись выражениями, приведенными выше, можно получить параметры для уравнения состояния типа Ми–Грюнайзена и описать поведение смеси.

Верификация этой модели проводится путем сравнения расчетных ударных адиабат, адиабат двукратного сжатия, скоростей звука, изоэнтроп разгрузки и адиабат для смесей графита с металлами с экспериментальными данными. Уравнения Гюгоню в случае первоначально невозмущенной покоящейся среды имеют вид:

$$\rho_{00} D = \rho(D - u), \quad P = \rho_{00} Du, \quad E - E_0 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (5)$$

где c_{00}, E_0 – соответственно плотность и внутренняя энергия единицы массы смеси перед фронтом ударной волны; u, P, E – массовая скорость, давление и удельная внутренняя энергия среды за фронтом ударной волны; D – скорость фронта ударной волны. Замыкание системы добавлением к соотношениям (5) уравнений

состояния среды (2), (4) с коэффициентом Грюнайзена (3) и параметрами, приведенными в [13], задает систему уравнений для неизвестных u , D , P , E , c . Значения всех искомых величин можно вычислить, задав значение массовой скорости среды за фронтом ударной волны.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных

В таблице приведены значения параметров уравнений состояния материалов, для которых проводились расчеты. Подчеркнем, что во всех расчетах были использованы одни и те же числовые значения параметров при всех значениях пористости.

Параметры уравнений состояния воздуха и графита

Вещества	ρ_{i0} , кг/м ³	A_i , Па	n_i	c_{vi} , кДж/(кг·К)	γ_{i0}
Воздух	1.3	$0.695 \cdot 10^{-3}$	2.20	0.718	0.16
Графит	$2.265 \cdot 10^3$	$6.141 \cdot 10^9$	6.2	0.710	0.71
Медь	$8.93 \cdot 10^3$	$3.295 \cdot 10^{10}$	4.25	0.382	2.00
Железо	$7.873 \cdot 10^3$	$3.153 \cdot 10^{10}$	4.3	0.465	1.75

На рис. 1, *a*, *b* приведены расчетные ударные адиабаты графита в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные, полученные на основании экспериментов для образцов пиролитического графита. Здесь ρ_{T0} – плотность сплошного графита при нормальных условиях.

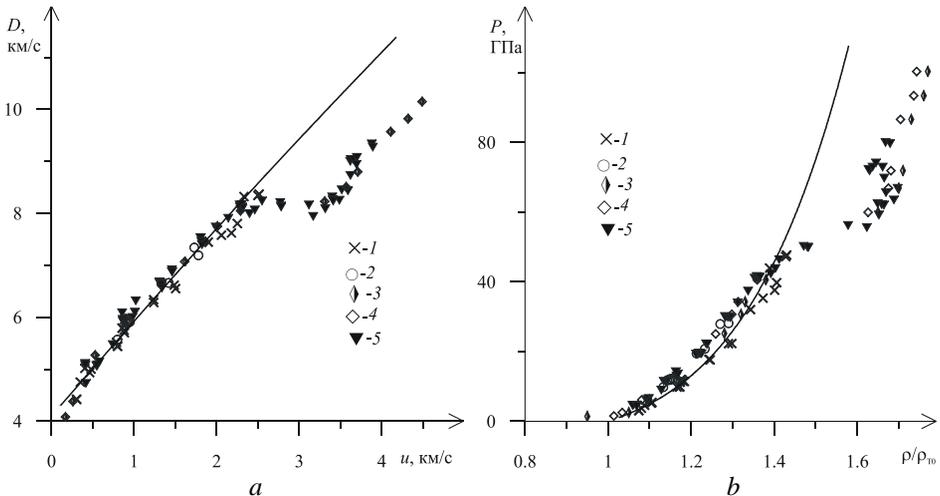


Рис. 1. Ударные адиабаты пиролитического графита в координатах $u-D$ (а) и $\rho/\rho_{T0}-P$ (б): сплошные кривые – расчетная адиабата; эксперименты: 1 – $m = 1.0$ [15]; 2 – $m = 1.03$ [16]; 3 – $m = 1.013$ [17]; 4 – $m = 1.029$ [17]; 5 – $m = 1.03$ [18]

Fig. 1. Shock adiabats in (a) $u-D$ and (b) $\rho/\rho_{T0}-P$ coordinates for pyrolytic graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1) 1.0$ [15]; (2) 1.03 [16]; (3) 1.013 [17]; (4) 1.029 [17]; and (5) 1.03 [18]

Расчеты проводились для сплошного графита. Плотность образцов пиролитического графита была близка к начальной плотности графита при нормальных условиях, пористость образцов в эксперименте колебалась в пределах 1.0–1.03. Пиролитический графит получают осаждением атомов углерода из газовой фазы или разложением материалов, содержащих углерод. Его плотность зависит от способа пиролиза. Особенность пирографита в том, что он является практически беспористым материалом и обладает уникальными свойствами: в нем нет примесей, поэтому его свойства зависят только от структурных перестроек; у него однородная кристаллическая структура; он обладает резкой анизотропией тепловых свойств. Экспериментальные данные приведены до значений массовой скорости за фронтом ударной волны менее 2.5 км/с, так как примерно от значений $u \sim 2$ км/с начинается фазовый переход графита в алмаз и ход адиабаты изменяется.

На рис. 2, *a, b* приведены расчетные ударные адиабаты графита в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные, полученные на основании экспериментов для образцов природного графита.

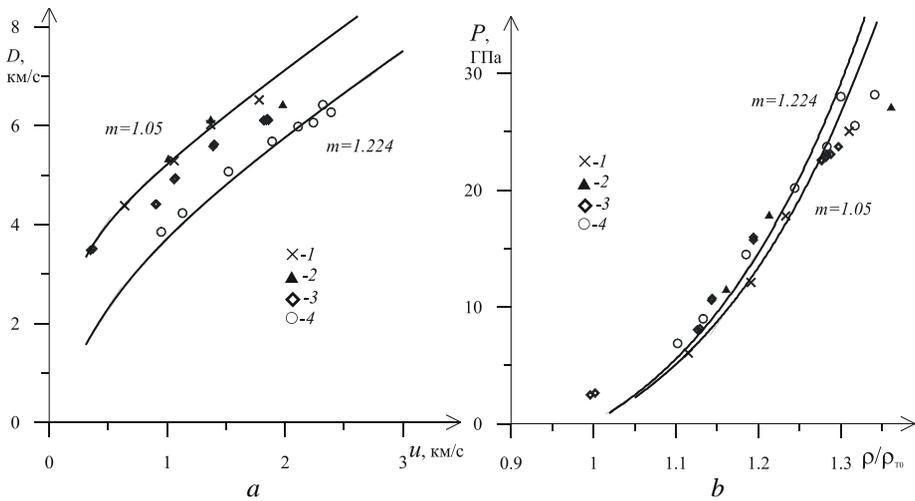


Рис. 2. Ударные адиабаты природного графита в координатах $u-D$ (a) и ρ/ρ_0-P (b): сплошные кривые – расчетные адиабаты; эксперименты 1 – $m = 1.05$ [19]; 2 – $m = 1.06$ [20]; 3 – $m = 1.116$ [20]; 4 – $m = 1.205$ [20]

Fig. 2. Shock adiabats in (a) $u-D$ and (b) ρ/ρ_0-P coordinates for natural graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1)$ 1.05 [19]; (2) 1.06 [20]; (3) 1.116 [20]; and (4) 1.205 [20]

Расчеты проведены для значений пористости $m = 1$ и $m = 1.224$, пористость образцов графита в экспериментах колебалась в диапазоне $m = 1.0 \div 1.224$. Данные по экспериментам приведены до начала излома на адиабате графита. Разброс значений экспериментальных данных в опытах по нагружению различных видов природного графита объясняют влиянием структуры использовавшихся в эксперименте образцов графита и наличием примесей. Однако одни и те же значения параметров уравнения состояния дают хорошее качественное и количественное

соответствие расчетных и экспериментальных данных в широком диапазоне давлений, и это показывает, что приведенная в работе математическая модель уравнения состояния очень хорошо описывает поведение образцов графита различной структуры в ударной волне. Рядом с расчетными адиабатами указаны значения пористости.

Ударное сжатие пористых тел приводит к сильному разогреву материала, и это дает более полную информацию о термодинамических свойствах вещества при высоких давлениях и температурах. На рис. 3, а, б приведены расчетные ударные адиабаты образцов графита различной пористости в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные экспериментов для пористого графита до излома на адиабатах. Рядом с расчетными адиабатами поставлены значения пористости, значки – данные экспериментов.

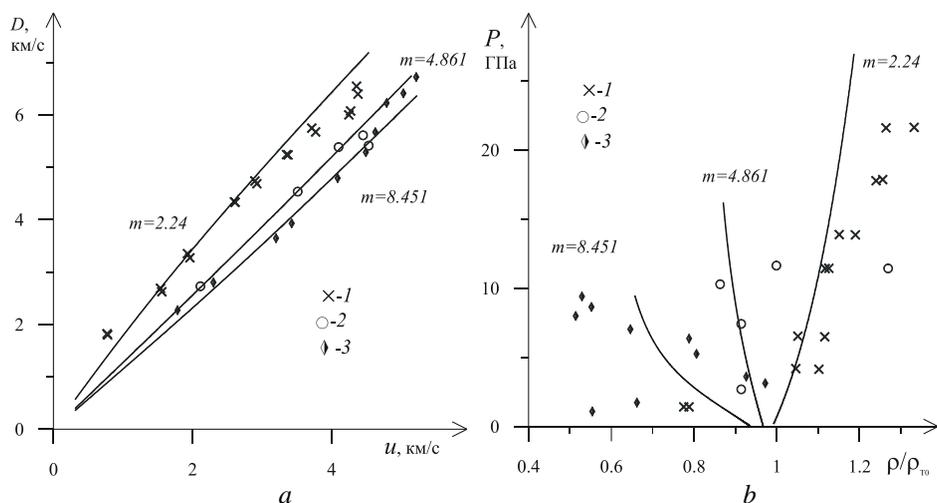


Рис. 3. Ударные адиабаты пористого графита в координатах $u-D$ (а) и ρ/ρ_0-P (б): сплошные кривые – расчетные адиабаты; эксперименты 1 – $m = 2.24$ [18]; 2 – $m = 4.861$ [18]; 3 – $m = 8.451$ [3]

Fig. 3. Shock adiabats in (a) $u-D$ and (b) ρ/ρ_0-P coordinates for porous graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1) 2.24$ [18]; (2) 4.861 [18]; and (3) 8.451 [3]

При проведении ударно-волновых экспериментов наиболее точными и надежными являются измерения скорости ударной волны, которую наиболее легко измерить, и массовой скорости вещества за фронтом ударной волны. Остальные параметры ударной волны находятся подстановкой массовой скорости и скорости ударной волны в уравнения Гюгоню (5). Поэтому наиболее достоверными являются сравнения расчетных и экспериментальных данных на рис. 1, а, 2, а, 3, а, и эти сравнения позволяют сделать вывод о хорошем качественном и количественном соответствии расчетов и экспериментов.

Для полноты исследования проведено сравнение значений скоростей звука, полученных с помощью данной модели, и приведенных в литературе. Скорость звука при используемом в работе коэффициенте Грюнайзена описывается зави-

симостью $C_{s2} = \frac{1}{\rho} \left[n(P_X + A) + \left(\gamma + 1 + 2 \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) P_T \right]$. Рисунок 4 демонстрирует удо-

влетворительное соответствие расчетных кривых и экспериментальных данных для скоростей звука в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость звука на ударной адиабате. Приведенные данные наглядно показывают понижение скорости звука при увеличении пористости материала.

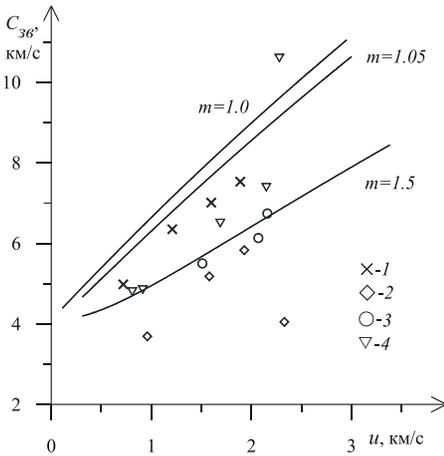


Рис. 4. Скорость звука на ударных адиабатах в сплошных образцах графита в координатах $u-C_{зв}$: сплошные линии – расчетные скорости звука; эксперименты: 1 – $m = 1.16 \div 1.19$ [21]; 2–4 $m = 1.024 \div 1.469$ [19]

Fig. 4. Speed of sound on the shock waves in $u-C_{зв}$ coordinates for solid graphite samples: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1) 1.16 \div 1.19$ [21] and (2) – (4) $1.024 \div 1.469$ [19]

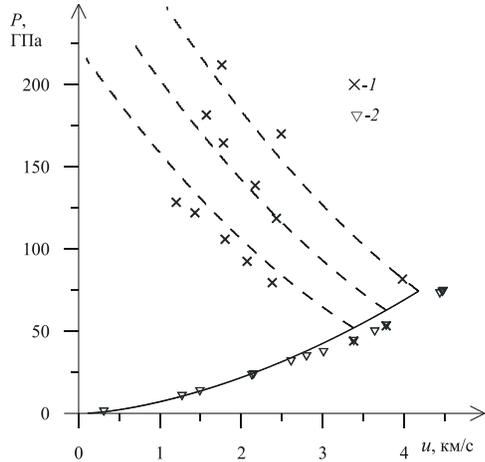


Рис. 5. Ударная адиабата и адиабаты двукратного сжатия в координатах $u-P$ в образцах графита с пористостью 1.211; сплошная линия – ударная адиабата, пунктирные – двукратное сжатие; экспериментальные данные: 1 – адиабаты двойного сжатия [17]; 2 – ударная адиабата однократного нагружения [17]

Fig. 5. Shock adiabat and double shock adiabats in $u-P$ coordinates for porous graphite with a porosity of 1.211, where the solid line indicates a shock wave, and dashed lines indicate double compression adiabats; experimental data are from [17]: (1) double compression adiabats and (2) a single-load adiabat

Для анализа того, как предлагаемая модель уравнения состояния описывает термодинамические свойства вещества в интервале больших значений плотностей, на рис. 5 проводится сравнение расчетных и опытных результатов при двукратном ударно-волновом сжатии образцов графита с пористостью $m = 1.211$. Отклонение расчетных адиабат от экспериментальных данных объясняется наличием фазового перехода. На рисунке приведены результаты измерений при однократном нагружении образцов графита. Наблюдается совпадение расчетов и экспериментов до излома на экспериментальной адиабате, а повторное сжатие в опытах производится из области, содержащей алмаз, и это вызывает отклонение расчетных адиабат от экспериментов. В расчетах не рассматривается наличие фазового перехода.

Для того чтобы верифицировать адекватность описания предлагаемой модели уравнения состояния поведения среды в области пониженных плотностей, на рис. 6 проведено сравнение расчетных и экспериментальных изоэнтроп разгрузки материала, подвергнутого ударно-волновому сжатию. Приведены две расчетные ударные адиабаты для пористостей $m = 1.03$ и $m = 1.211$, экспериментальные точки из опытов по ударно-волновому нагружению образцов пористого графита для $m = 1.03$ (крестики) и $m = 1.211$ (треугольники), изоэнтропы разгрузки. Экспериментальные данные для изоэнтроп обозначены квадратами, в которых стоят цифры. Расчетные изоэнтропы проведены прерывистыми линиями, рядом с кривыми проставлены цифры, корреспондирующие с экспериментальными данными. Наблюдается совпадение расчетных и экспериментальных адиабат до излома на опытных адиабатах. Расчетная и экспериментальная изоэнтропы с номером 1 совпадают, так как разгрузка идет из состояния на адиабате до начала фазового перехода. Расчетные изоэнтропы с номерами 2–4 отклоняются от соответствующих экспериментальных данных, поскольку разгрузка при расчетах идет из положений на адиабате графита, а в экспериментах – из положений на адиабате, соответствующих наличию алмаза в материале.

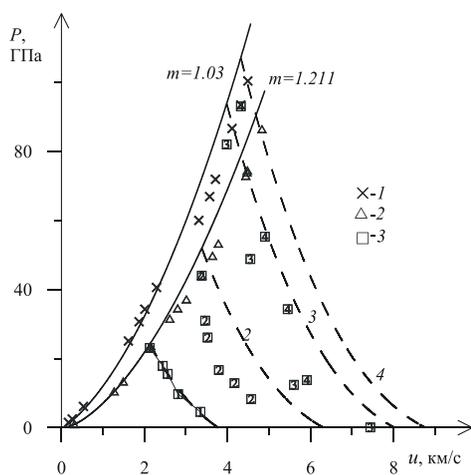


Рис. 6. Ударная адиабата и изоэнтропы разгрузки пористых образцов графита в координатах $u-P$; экспериментальные данные: 1–3 [17]

Fig. 6. Shock adiabat and unloading isentropes in $u-P$ coordinates for porous graphite samples; (1) – (3) are the experimental data from [17]

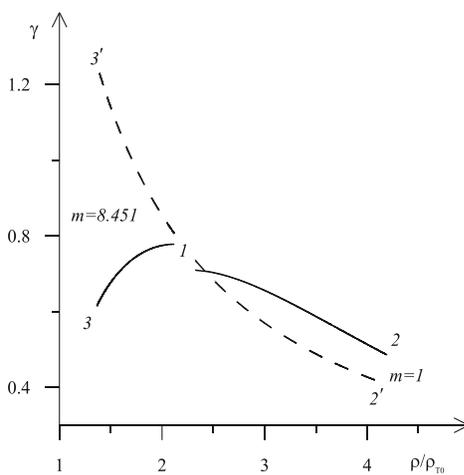


Рис. 7. Зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности
Fig. 7. The Grüneisen parameter as a function of density

В [22] зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности для графита задается линейной зависимостью $c \gamma = 1.71 \text{ г/см}^3$. На рис. 7 проводится сравнение поведения коэффициента Грюнайзена, заданного этим соотношением (штриховые линии), и зависимости (3) (сплошные линии). Для сплошных образцов коэффициент Грюнайзена уменьшается из начального положения 1 до положений 2 и 2', для пористости $m = 8.451$ используемая в настоящей работе зависимость (3) при-

водит к уменьшению коэффициента Грюнайзена до значения в точке 3, а соотношение, используемое в [22], ведет к увеличению коэффициента Грюнайзена до значения в точке 3'.

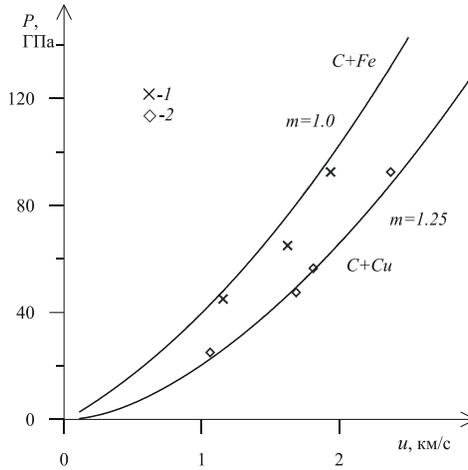


Рис. 8. Ударные адиабаты смесей графита и металлов в координатах u – P ; экспериментальные данные: 1, 2 [23]

Fig. 8. Shock adiabats in u – P coordinates for graphite–metals mixtures; (1) – (2) are the experimental data from [23]

На рис. 8 проводится сравнение расчетных и экспериментальных адиабат для сплошного образца смеси графит–железо и пористого ($m = 1.25$) образца графит–медь. В экспериментах использовали технически чистый графит и порошки меди и железа. Наблюдается хорошее соответствие расчетных и экспериментальных данных.

Вывод

Таким образом, сравнение расчетов, моделирующих ударно-волновое сжатие, двукратное сжатие, изэнтропическое расширение образцов графита и образцов смесей графита с металлами, скоростей звука для образцов графита различной пористости с экспериментами свидетельствует о хорошем качественном и количественном описании опытов моделью. Проведенный всесторонний анализ позволяет сделать вывод о применимости предлагаемой модели уравнения состояния графита.

Список источников

1. Ашкофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела : пер. с англ. М. : Мир, 1979. Т. 2. 422 с.
2. Белащенко Д.К., Воротягин А.В., Гельчинский Б.Р. Компьютерное моделирование алюминия в области высоких давлений // Теплофизика высоких температур. 2011. Т. 49, № 5. С. 676–686. doi: 10.1134/S0018151X11050038
3. Молодец А.М., Молодец М.А. Температурная зависимость функции Грюнайзена химических элементов // Химическая физика. 1997. Т. 16, № 5. С. 122–126.

4. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Модель поведения пористых смесей, включающих в свой состав железо, при ударно-волновом нагружении // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2014. Т. 29, № 3. С. 82–93.
5. Бельхеева Р.К. Модель коэффициента Грюнайзена для широкого диапазона плотностей на примере меди // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59, № 4. С. 514–519. doi: 10.1134/S0018151X21040040
6. Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Каякин А.А. и др. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Ч. 2. Уравнение состояния алюминия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2010. № 3. С. 26–34.
7. Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Каякин А.А., Куделькин В.Г. Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Та, W, Al, Be // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49, № 1. С. 106–120.
8. Ломоносов И.В., Фортова С.В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, № 4. С. 596–626. doi: 10.1134/S0018151X17040113
9. Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. Multiphase Equation of State for Carbon over Wide Range of Temperatures and Pressures // Int. J. Thermophys. 2005. V. 26 (2). P. 479–491.
10. Lomonosov I.V. Multi-phase Equation of State for Aluminum // Laser and Particle Beams. 2007. V. 25. P. 567–584.
11. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М. : Наука, 1978. 336 с.
12. Бельхеева Р.К. Построение уравнения состояния пористой смеси конденсированных компонентов // Прикладная механика и техническая физика. 2012. Т. 53, № 4. С. 3–15.
13. Бельхеева Р.К. Уравнение состояния сильнопористого вещества // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53, № 3. С. 367–377. doi: 10.7868/S0040364415020052
14. Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения пористой смеси при больших давлениях и температурах // Прикладная механика и техническая физика. 2007. Т. 48, № 5. С. 53–60.
15. Coleburn N.L. The compressibility of pyrolytic graphyte // J. Chem. Phys. 1964. V. 40 (73). P. 71–77. doi: 10.1063/1.1729548
16. Doran D.G. Hugoniot equation of state of pyrolytic graphite to 300 kbars // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. P. 844–850. doi: 10.1063/1.1724896
17. Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ // под ред. Р.Ф. Трунина. Саров : РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
18. LASL Shock Hugoniot Data / S.P. Marsh (ed.). Berkeley : University of California Press, 1980.
19. Gust W.H. Phase transition and shock-compression parameters to 120 GPa for three types of graphite and amorphous carbon // Physical Review B. 1980. V. 22 (10). P. 4744–4756. doi: 10.1103/PhysRevB.22.4744
20. McQueen R.G., Marsh S.P. Hugoniots of graphytes of various initial densities and the equation of state of carbon // Behavior of dense media under high dynamic pressures : Proc. of the Symp. on the Behavior of Dense Media under High Dynamic Pressures, Sept. 1967. Paris ; New York : Gordon and Breach, 1968. P. 207–216.
21. Жук А.З., Иванов А.В., Каннель Г.И. // Исследование кинетики фазового перехода графит–алмаз // Теплофизика высоких температур. 1991. Т. 29, № 3. С. 486–493.
22. Boade R.R. Shock compression of Foamed Graphite // J. Appl. Phys. 1968. V. 39 (3). P. 1609–1617. doi: 10.1063/1.1656403
23. Ставер А.М. Исследование термодинамики фазового перехода углерода в алмаз при ударном нагружении смесей углерод + металл // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черноголовка : ОИХФ, 1978. С. 131–136.

References

1. Ashcroft N.W. Mermin N.D. (1976) *Solid State Physics*. Volume 2. New York: Berkeley University.
2. Belashchenko D.K., Vorotyagin A.V., Gelchinskiy B.R. (2011) Komp'yuternoe modelirovanie alyuminiya v oblasti vysokikh davleniy [Computer simulation of aluminum in the high-pressure range]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 49(5). pp. 656–666. doi: 10.1134/S0018151X11050038
3. Molodets A.M., Molodets M.A. (1997) Temperaturnaya zavisimost' funktsii Gryunayzena khimicheskikh elementov [Temperature dependence of the Grüneisen parameter for chemical elements]. *Khimicheskaya fizika – Russian Journal of Physical Chemistry B*. 16(5). pp. 122–126.
4. Kinelovskiy S.A., Maevskiy K.K. (2014) Model' povedeniya poristykh smesey, vklyuchayushchikh v svoj sostav zhelezo, pri udarno-volnovom nagruzhении [A behavior model for porous iron containing mixtures upon shock wave loading]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 29(3). pp. 82–93.
5. Bel'kheeva R.K. (2022) Model' koeffitsienta Gryunayzena dlya shirokogo diapazona plotnostey na primere medi [Model of the Grüneisen coefficient for a wide range of densities on the example of copper]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 60(1). pp. 26–29. doi: 10.1134/S0018151X21040040
6. Gordeev D.G., Gudarenko L.F., Kayakin A.A., Kudel'kin V.E. (2010) Poluempiricheskaya model' uravneniya sostoyaniya metallov s effektivnym uchedom ionizatsii. Chast' 2. Uravnenie sostoyaniya alyuminiya [Semi-empirical model of the equation of state of metals with effective account of ionization. Part 2: Equation of state of aluminum]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Teoreticheskaya i prikladnaya fizika – VANT. Theoretical and Applied Physics*. 3. pp. 26–34.
7. Gordeev D.G., Gudarenko L.F., Kayakin A.A., Kudelkin V.G. (2013) Equation of state model for metals with ionization effectively taken into account. Equation of state of tantalum, tungsten, aluminum, and beryllium. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 49(1). pp. 92–104. doi: 10.1134/s0010508213010103
8. Lomonosov I.V., Fortova S.V. (2017) Shirokodiapazonnye poluempiricheskie uravneniya sostoyaniya veshchestva dlya chislennogo modelirovaniya vysokoenergeticheskikh protsessov [Wide-range semiempirical equations of state of matter for numerical simulation on high-energy processes]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 55(4). pp. 596–626. doi: 10.1134/S0018151X17040113
9. Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. (2005) Multiphase equation of state for carbon over wide range of temperatures and pressures. *International Journal of Thermophysics*. 26(2). pp. 479–491. doi: 10.1007/s10765-005-4510-0
10. Lomonosov I.V. (2007) Multi-phase equation of state for aluminum. *Laser and Particle Beams*. 25(4). pp. 567–584. doi: 10.1017/S0263034607000687
11. Nigmatulin R.I. (1978) *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred* [Fundamentals of mechanics of heterogeneous media]. Moscow: Nauka.
12. Bel'kheeva R.K. (2012) Postroyeniye uravneniya sostoyaniya poristoy smesi kondensirovannykh komponentov [Construction of the equation of state of a porous mixture of condensed species]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 53(4). pp. 3–15. doi: 10.1134/S0021894412040013
13. Bel'kheeva R.K. (2015) Uravnenie sostoyaniya sil'noporistogo veshchestva [Equation of state for a highly porous material]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 53(3). pp. 367–377. doi: [10.7868/S0040364415020052](https://doi.org/10.7868/S0040364415020052)
14. Bel'kheeva R.K. (2007) Termodinamicheskoe uravnenie sostoyaniya dlya opisaniya povedeniya poristoy smesi pri bol'shikh davleniyakh i temperaturakh [Thermodynamic equation of state of a porous mixture at high pressures and temperatures]

- tion of state used to describe the behavior of a porous mixture under high pressures and temperatures]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 48(5). pp. 53–60. doi: 10.1007/s10808-007-0085-9
15. Coleburn N.L. (1964) The compressibility of pyrolytic graphite. *Journal of Chemical Physics*. 40(73). pp. 71–77. doi: 10.1063/1.1729548
 16. Doran D.G. (1963) Hugoniot equation of state of pyrolytic graphite to 300 kbars. *Journal of Applied Physics*. 34. pp. 844–850. doi: 10.1063/1.1724896
 17. Trunin R.F., Gudarenko L.F., Zhernokletov M.V., Simakov G.V. (2006) *Ekspериментal'nye dannye po udarno-volnovomu szhatiю i adiabaticheskomu rasshireniю kondensirovannykh veshchestv* [Experimental data on shock-wave compression and adiabatic expansion of condensed materials]. Sarov: Izdatel'stvo rossiyskogo federal'nogo yadernogo tsentra – VNIIEF.
 18. Marsh S.P. (1980) *LASL Shock Hugoniot Data*. Berkeley: University of California Press.
 19. Gust W.H. (1980) Phase transition and shock-compression parameters to 120 GPa for three types of graphite and amorphous carbon. *Physical Review B*. 22(10). pp. 4744–4756. doi: 10.1103/PhysRevB.22.4744
 20. McQueen R.G., Marsh S.P. (1967) Hugoniots of graphites of various initial densities and the equation of state of carbon. In: *Symposium on the 'Behavior of Dense Media under High Dynamic Pressure*. Paris.
 21. Zhuk A.Z., Ivanov A.V., Kannel G.I. (1991) Issledovanie kinetiki fazovogo perekhoda grafit –almaz [Study of the kinetics of graphite-diamond phase transition]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 29(3). pp. 486–493.
 22. Boade R.R. (1968) Shock compression of foamed graphite. *Journal of Applied Physics*. 39(3). pp. 1609–1617. doi: 10.1063/1.1656403
 23. Staver A.M. (1978) *Issledovanie termodinamiki fazovogo perekhoda ugleroda valmaz pri udarnom nagruzhении smesey uglerod + metall. V kn.: Detonatsiya. Kriticheskie yavleniya. Fiziko-khimicheskie prevrashcheniya v udarnykh volnakh* [Investigation of thermodynamics of carbon-to-diamond phase transition under shock loading of carbon + metal mixtures. In: Detonation. Critical Phenomena. Physical and Chemical Transformations in Shock Waves]. Chernogolovka. pp. 131–136.

Сведения об авторе:

Бельхеева Румия Катдусовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования механико-математического факультета Новосибирского государственного университета (Новосибирск, Россия). E-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru

Information about the author:

Bel'kheeva Rumiya K. (Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru

Статья поступила в редакцию 10.05.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 10.05.2023; accepted for publication 05.08.2024