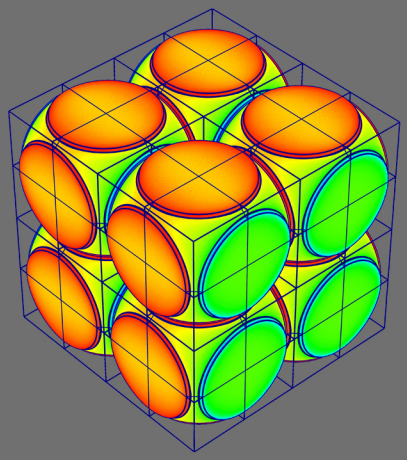
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Бельхеева Р.К. Моделирование малопараметрического уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для алмаза и смесей алмаз-металл. Математическое моделирование и численные методы, 2024, № 1, с. 3–17.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/329/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.216.210
01.02.2026 13:56:44

УДК 532.593+536.711 DOI: 10.18698/2309-3684-2024-1-317

Моделирование малопараметрического уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для алмаза и смесей алмаз-металл

© Р.К. Бельхеева

НГУ, Новосибирск, 630090, Россия

Построена модель малопараметрического уравнения состояния алмаза, найдены параметры этого уравнения, позволяющие достоверно описать поведение сплошных и пористых образцов алмаза и смеси алмаз-металл. Пористое вещество и пористая смесь конденсированных компонентов рассматривались как термодинамически равновесные смеси. Проведенное сравнение расчетных и экспериментальных ударных адиабат показало применимость предложенного двухпараметрического уравнения состояния в широком диапазоне давлений и температур.

Ключевые слова: *пористая смесь, термодинамическое равновесие, параметры уравнения состояния, коэффициент Грюнайзена, ударная адиабата*

Введение. Углерод является очень распространенным природным материалом. Вещества из углерода имеют как аморфную (кокс, сажа), так и кристаллическую (графит, алмаз) структуру, при этом они обладают богатым спектром свойств, зачастую диаметрально противоположных, например, идеальной прозрачностью и способностью поглощать всю направленную лучистую энергию. Материалы из углерода применяют как в качестве теплоизоляторов, так и в качестве проводников тепла. Алмаз можно назвать уникальным по физическим и химическим свойствам. Это самый твердый и износостойкий материал, у него самые низкие коэффициенты теплового расширения и сжимаемости и самые высокие коэффициенты упругости, поверхностного натяжения, износостойкости. Алмаз обладает высокой химической резистентностью, но алмазные резцы не применяют при обработке сталей, поскольку в результате взаимодействия происходит образование карбидов. Большая часть природных алмазов используется для технических целей. Алмазы используются для производства инструментов для резки, сверления, бурения скважин в твердых породах, шлифовки и полировки материалов, вытягивания проволоки, медицинских инструментов. Спектр применения инструментов армированных техническими алмазами очень широк, и потребности промышленности и науки многократно превосходят добычу природных алмазов. Искусственные алмазы превосходят натуральные по требуемым характеристикам, поскольку при производстве синтетических алмазов учитывается будущая область их применения и алмазный материал создается с заранее заданными

свойствами. Отсюда возникает все возрастающая потребность производства искусственных алмазов с регламентированными свойствами. Для производства алмазов первоначально создаются математические модели технологического процесса. При математическом моделировании различных физических процессов кроме законов сохранения необходимы уравнения состояния материалов, подвергающихся воздействию. Эти уравнения должны как можно точнее описывать поведение материалов в области плотностей, давлений и температур, возникающих в опытах.

Целью данной работы является получение параметров уравнения состояния алмаза для уравнения состояния вида Ми-Грюнайзена, наиболее часто используемого при описании импульсных воздействий на среду.

Доступность компьютерной техники и развитие компьютерных технологий позволяет получать широкодиапазонные многопараметрические уравнения состояния [1–3]. Такие уравнения обладают большой точностью при описании поведения материала, но имеют и недостатки. В числе последних необходимость нахождения большого количества подгоночных параметров, при вычислении которых появляются неоднозначные решения. Малопараметрические уравнения состояния [4–6] могут оказаться менее точными, иметь более узкий диапазон применимости, но их преимуществом является ясность и прозрачность физических результатов.

В [7] изложены основы описания термодинамически равновесных гетерогенных смесей. Термодинамически равновесными считаются смеси, давления, температуры и скорости движения составляющих и самой смеси в которых считаются соответственно равными. В [7] рассмотрен случай описания равновесной двухфазной смеси обычным и уравнениями однофазной среды для газовзвеси с малой объемной концентрацией дисперсной фазы. В [8] описан способ построения уравнения состояния для смеси нескольких компонентов, находящихся в термодинамическом равновесии, при условии, что уравнения состояния каждой составляющей и смеси представлены в форме Ми-Грюнайзена. В [9] представлена модель для коэффициента Грюнайзена, изменение которого описывается логарифмической зависимостью от плотности, что дает правдивое описание его поведения в ударной волне как для сплошных веществ, так и для сильнопористых веществ, которые при ударно-волновом нагружении ведут себя аномально. В [9] приведены зависимости, по которым вычисляются параметры уравнения состояния смеси через параметры и массовые концентрации компонентов. Массовые концентрации компонентов в рассматриваемых работах считаются постоянными, т.к. не учитываются фазовые переходы. В [10] показано, что поведение воздуха адекватно описывается уравнением состояния вида Ми-Грюнайзена при сильном импульсном нагружении.

Математическая модель. Уравнение состояния связывает некоторой зависимостью термодинамические параметры, например, давление-температура-плотность или давление-плотность-внутренняя энергия. Вид зависимости выбирается из практических соображений. При описании ударно-волновых процессов принято использовать уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена. Уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена представляет общее давление P вещества в виде суммы давления, описывающего сжатие вещества P_X и давления, описывающего температурную зависимость P_T, $P = P_X + P_T$. Первое слагаемое в данной работе описывается уравнением типа Тета:

$$P_X = A\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^n - 1\right],$$

второе – выражением $P_T = \gamma\rho E_T$, где ρ — плотность среды; ρ_0 — параметр уравнения состояния (в случае конденсированного вещества это его плотность при нормальных условиях); константы, характеризующие сжимаемость вещества: A — коэффициент сжимаемости, n — показатель сжимаемости; γ — коэффициент Грюнайзена; E_T — тепловая энергия. Коэффициент Грюнайзена задается выражением

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

использование этой зависимости приводит к тому, что коэффициент Грюнайзена уменьшается при увеличении давления нагружения как в случае $\rho/\rho_0 > 1$ при нормальном поведении ударной волны, так и в случае $\rho/\rho_0 < 1$ при аномальном ее поведении, что регулируется знаком логарифма. Полная внутренняя энергия также представляется суммой двух слагаемых $E = E_X + E_T$, где E_X — упругая часть энергии, связанная с упругой составляющей давления зависимостью

$$E_X = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_X}{\rho^2}\, d\rho,$$

тепловая часть внутренней энергии задается соотношением $E = c_v(T - T_0)$, где c_v — удельная теплоемкость; T — температура; T_0 — начальная температура. Тогда выражения для давления и полной внутренней энергии принимают вид:

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

$$E = \frac{A}{\rho_0}\left\{\frac{1}{n-1}\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{n-1} - 1\right] + \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)\right\} + c_v (T - T_0) \qquad (1)$$

В [8, 9] получены выражения для вычисления параметров уравнения состояния N-компонентной смеси:

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

$$\gamma_0 = \frac{n}{c_v}\left(\rho_0 R_1\right)^{\ln(\rho_0 R_1)} R_4, \qquad (2)$$

где

$$c_v = \sum_{i=1}^{N} c_{vi} x_i, R_1 = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii0}}\left(\frac{A_i}{P + kA_N}\right)^{1n_i},$$

$$R_2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii0}}\left(\frac{A_i}{P + kA_N}\right)^{1n_i} \frac{kA_N - A_i}{n_i},$$

$$R_3 = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii0}}\left(\frac{A_i}{P + kA_N}\right)^{1/n_i} (n_i + 1)\left(\frac{kA_N - A_i}{n_i}\right)^2,$$

$$R_3 = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii0}}\left(\frac{A_i}{P + kA_N}\right)^{1/n_i} (n_i + 1)\left(\frac{kA_N - A_i}{n_i}\right)^2,$$

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

Здесь $A_1 < \ldots A_N$, x_i, ρ_{ii} — соответственно массовые концентрации и истинные плотности компонентов, индекс i относится к i–му компоненту, индекс 0 относится к начальному состоянию. Для получения этих выражений использовалось разложение в ряд Тейлора функции, выражающей плотность каждой составляющей и смеси

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

полученной из первого уравнения (1) по переменным P и T, и выражения для плотности смеси, компоненты которой не образуют связи на атомарном уровне

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\rho_{ii}}.$$

Коэффициент k используется для построения общей области сходимости для всех рядов. Значение $k = 2$ гарантирует выполнение условия сходимости [8].

Полученное уравнение состояния смеси в форме Ми-Грюнайзена, параметры которого выражаются через параметры и массовые концентрации компонентов соотношениями (2), удовлетворяет условиям непрерывности и гладкости зависимостей в области существования компонентов, сформулированным в [11].

Уравнения Гюгонио для первоначально покоящейся среды в имеют вид

$$\rho_{00} D = \rho (D - u), \quad P = \rho_{00} D u, \quad E - E_0 = \frac{P}{2}\left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho}\right), \tag{3}$$

где ρ_{00}, E_0 — соответственно плотность и внутренняя энергия единицы массы смеси перед фронтом ударной волны; u, P, E — массовая скорость, давление и энергия среды за фронтом ударной волны; D — скорость фронта ударной волны. Начальное давление, равное атмосферному, пренебрежимо мало по сравнению с давлениями, достигаемыми в ударных волнах, поэтому оно принимается равным нулю. Добавление к соотношениям Гюгонио уравнений состояния среды (1) с параметрами, определяемыми приведенными выше соотношениями (2), приводит к системе уравнений для неизвестных u, D, P, E, ρ. Задавая значение массовой скорости среды за фронтом ударной волны, из этой системы уравнений можно определить значения всех искомых величин.

Численный алгоритм решения задачи. Для каждого заданного значения массовой скорости за фронтом ударной волны u:

1. Задается интервал $[r_{min}, r_{max}]$, число узлов n, шаг $dr = (r_{max} - r_{min}) / n$.

2. Для $r = r_{min} + i \cdot dr$, $i = 1, \ldots, n$ вычисляются значения P_H и P_{US}, где P_H — значение давления, вычисленное с помощью соотношений Гюгонио (3), P_{US} — значение давления, вычисленное с помощью уравнения состояния (1). Температура на ударной адиабате вычисляется из формулы

$$E_T = \frac{2E_X - P_X\left(1\rho_{00} - 1\rho\right)}{\gamma\left(\rho\rho_{00} - 1\right) - 2},$$

полученной из соотношений Гюгонио (3). Параметры уравнения состояния вычисляются с помощью соотношений (2).

3. Из заданного интервала $[r_{min}, r_{max}]$ выбирается значение rr, при котором одновременно величины

$$\left|1 - \frac{P_H}{P_{US}}\right| \text{ и } \left|1 - \frac{P_{US}}{P_H}\right|$$

минимальны. В задаче $P_H \neq 0$ и $P_{US} \neq 0$.

4. Далее задаются новые значения $r_{min} = rr - 3 \cdot dr$ и $r_{max} = rr - 3 \cdot dr$ и алгоритм повторяется с пункта 1.

Таким образом, путем сгущения сетки алгоритм повторяется до достижения заданной точности

$$\left|1 - \frac{P_H}{P_{US}}\right| < \varepsilon \text{ и } \left|1 - \frac{P_{US}}{P_H}\right| < \varepsilon$$

где $\varepsilon = 10^{-6}$.

Расчеты и сравнение с экспериментом. В таблице приведены значения параметров уравнений состояния материалов, для которых проводились расчеты. Подчеркивается, что в проведенных расчетах ударных адиабат для сплошных и пористых образцов алмаза и смесей алмаз-металл использовались одни и те же параметры уравнений состояния компонентов для всех значений пористости.

На рис. 1 приведена ударная адиабата сплошного алмаза в координатах массовая скорость вещества за фронтом ударной волны — скорость ударной волны. Положения экспериментальных точек на расчетных ударных адиабатах демонстрируют хороший подбор параметров уравнения состояния для математической модели. Такое же хорошее совпадение экспериментальных и расчетных данных показывает рис. 2, на котором приведены ударные адиабаты в координатах относительная плотность за фронтом ударной волны — давление за фронтом ударной волны. Здесь ρ_{T0} — начальная плотность конденсированного вещества.

Таблица 1

Параметры уравнений состояния веществ

Вещество	$\rho_{ii0}, кг/м^3$	$A_i, Па$	n_i	$c_{vi}, кДж/(кг \cdot К)$	γ_{i0}
Воздух	1.3	$0.695 \cdot 10^{-3}$	2.20	0.718	0.16
Алмаз	$3.515 \cdot 10^3$	$2.144 \cdot 10^{11}$	2.5	0.510	0.7
Медь	$8.93 \cdot 10^3$	$3.295 \cdot 10^{10}$	4.25	0.382	2.0

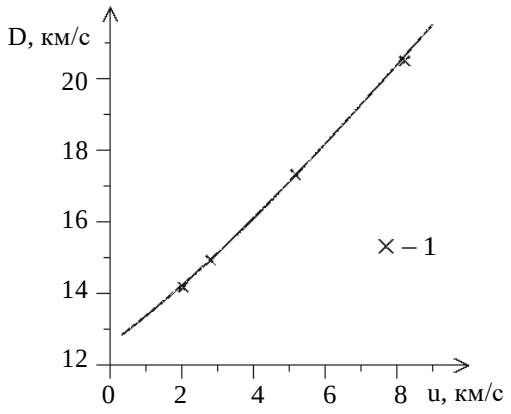


Рис. 1. Ударные адиабаты сплошного алмаза в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны — скорость фронта ударной волны: сплошная кривая — расчетная адиабата; эксперименты 1 — [12]

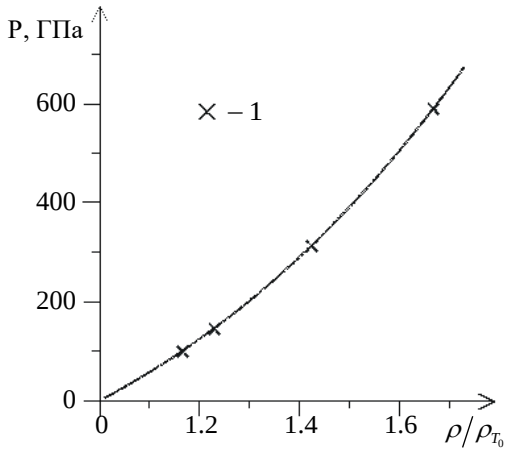


Рис. 2. Ударные адиабаты сплошного алмаза в координатах относительная плотность за фронтом ударной волны — давление за фронтом ударной волны: обозначения как на рис. 3

Параметры уравнения состояния подбираются так, чтобы соблюдалось возможно лучшее соответствие расчетных и экспериментальных данных. В данной работе подбирается пара параметров уравнения состояния n и γ_0, влияние второй из этих величин наиболее ясно выявляется при высоких температурах, возникающих в материале. Чтобы наиболее точно описать тепловой вклад в уравнение состояния, необходимо провести сравнение расчетных и экспериментальных данных, описывающих поведение в ударных волнах пористых образцов. Это расширяет область применимости уравнения состояния. На рис. 3 в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны — скорость фронта ударной волны и рис. 4 в координатах относительная плотность за фронтом ударной волны — давление за фронтом ударной волны приведены ударные адиабаты образцов алмаза невысокой пористости, рядом со сплошными кривыми, являющимися расчетными, проставлены значения пористостей. Пористость определяется отношением плотности конденсированного вещества к плотности пористого вещества. Рис. 3 демонстрирует хорошее совпадение расчетов и результатов опытов. На рис. 4 разброс данных расчетов и экспериментов более значимое, но надо помнить, что в экспериментах, как правило, производят измерения скорости ударной волны и массовой скорости за фронтом ударной волны. Остальные величины — давление, плотность, температуру — как правило, получают пересчетами, в которых используют соотношения Гюгонио и уравнения состояния, выбранные экспериментаторами. Аналогично случаю сплошного алмаза можно сделать вывод о хорошем описании предлагаемым уравнением состояния поведения образцов алмаза невысокой пористости при импульсном нагружении.

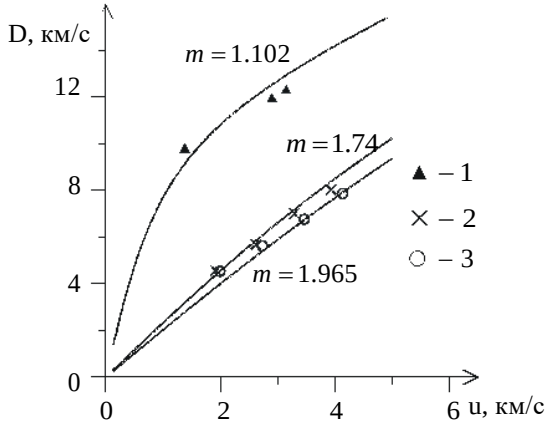


Рис. 3. Ударные адиабаты пористого алмаза в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны: сплошная кривая – расчетная адиабата; эксперименты 1 – [13] $m = 1.102$; 2 – [14] $m = 1.738$; 3 – [14] $m = 1.961$

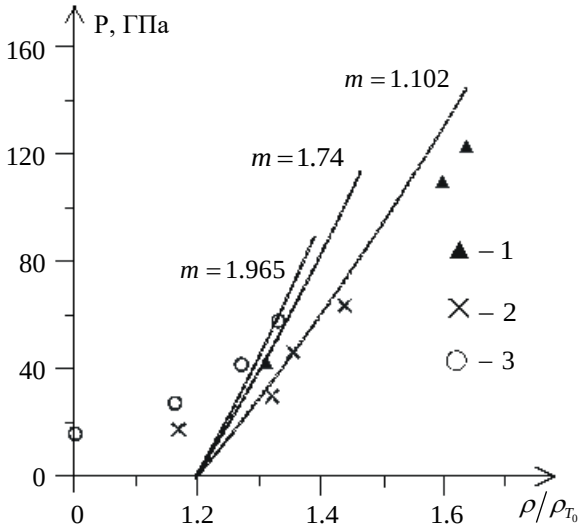


Рис. 4. Ударные адиабаты пористого алмаза в координатах относительная плотность за фронтом ударной волны – давление за фронтом ударной волны: обозначения как на рис. 3

Рис. 5 и рис. 6 демонстрируют сравнение расчетных и опытных данных ударно-волнового нагружения образцов алмаза повышенной пористости. На этих рисунках приведены две пары расчетных кривых: для алмаза с пористостью $m = 6.277$ и графита с пористостью $m = 4.861$, обоим образцам соответствует одинаковое массовое содержание углерода $x_C = 0.0998048$. Расположение экспериментальных точек для образцов алмаза с пористостями $m = 5.754$ и $m = 6.277$ приводит к выводу о произошедшем фазовом переходе алмаза в графит в результате действия высоких температур. Известно [16–20], что при температуре порядка $T \sim 1000 \div 2000°C$ при атмосферном давлении происходит графитизация алмаза, эта температура тем ниже, чем меньше размеры частичек спрессованного порошка. Графитизация происходит и при высоких давлениях, что подтверждается скачкообразным обратным переходом алмаза в графит в волне разрежения. При высокой пористости образцы материалов, подвергающиеся воздействию ударных волн, претерпевают сильный разогрев. В [19] исследована зависимость графитизации от давления. В [20] приведены кинетические линии графитизации на фазовой диаграмме углерода. Согласно этим данным, для значений пористостей образцов алмаза, используемых в опытах, температуры достигли критических значений, и произошла частичная или полная графитизация алмаза. Следует отметить, что для адиабаты графита нагружение было рассчитано из нормального состояния перед фронтом волны. Изменение внутренней энергии,

появляющееся при фазовом переходе, не учитывалось. Этот факт дает расхождение при сравнении расчетных (для графита) и опытных данных, особенно на рис. 6. На рис. 5 и рис. 6 приведены экспериментальные точки, полученные при ударно-волновом нагружении образцов графита с пористостью $m = 4.861$ (обозначены цифрой 3 на графиках). Хорошо виден излом на адиабате, соответствующий фазовому переходу графита в алмаз в волне нагружения.

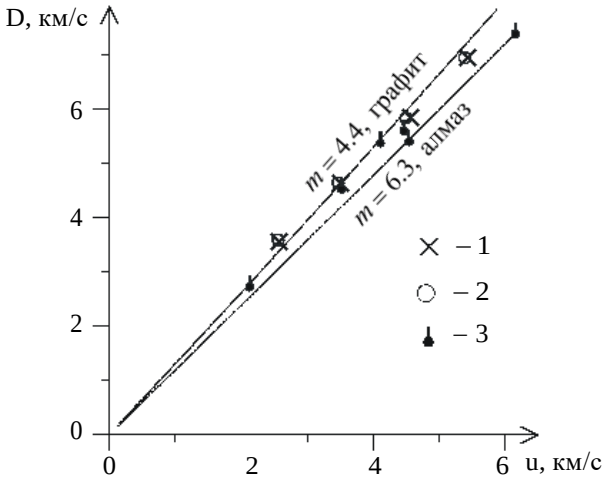


Рис. 5. Ударные адиабаты алмаза и графита в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны: сплошные кривые – расчетные адиабаты; эксперименты: алмаз 1 – [14] $m = 6.277$; 2 – [15] $m = 5.754$; графит 3 – [13] $m = 4.861$

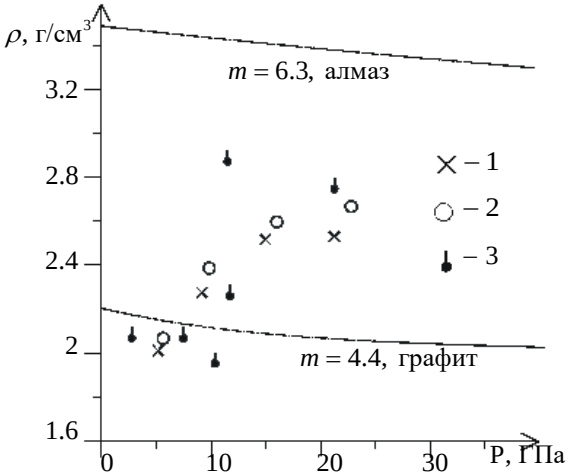


Рис. 6. Ударные адиабаты алмаза и графита в координатах давление за фронтом ударной волны – плотность за фронтом ударной волны: обозначения как на рис. 5

Значительное различие экспериментальных и расчетных данных на рис. 6 обусловлено различной степенью графитизации алмаза и неучетом скачкообразного изменения энергии и плотности при фазовом переходе.

Для апробирования модели уравнения состояния многокомпонентной среды, предложенной в [8, 9] проведены расчеты ударно-волнового нагружения пористых смесей медь-алмаз. Результаты сравнения расчетных и опытных данных приведены на рис. 7 и рис. 8. Расчеты проводились для образцов меди, алмаза и смеси медь-алмаз с пористостями $m = 1.194$. Массовое содержание меди в смеси — 71.8, алмаза — 28.2, пористость образцов в опытах варьировалась в пределах $m = 1.194 \div 1.234$. Положение опытных точек на графике 5, где приведены наиболее достоверные экспериментальные данные, демонстрирует адекватность модели уравнения состояния. Более заметное расхождение расчетов и экспериментов на рис. 8 обусловлено непрямым получением данных для точек и вариативностью значений пористости образцов.

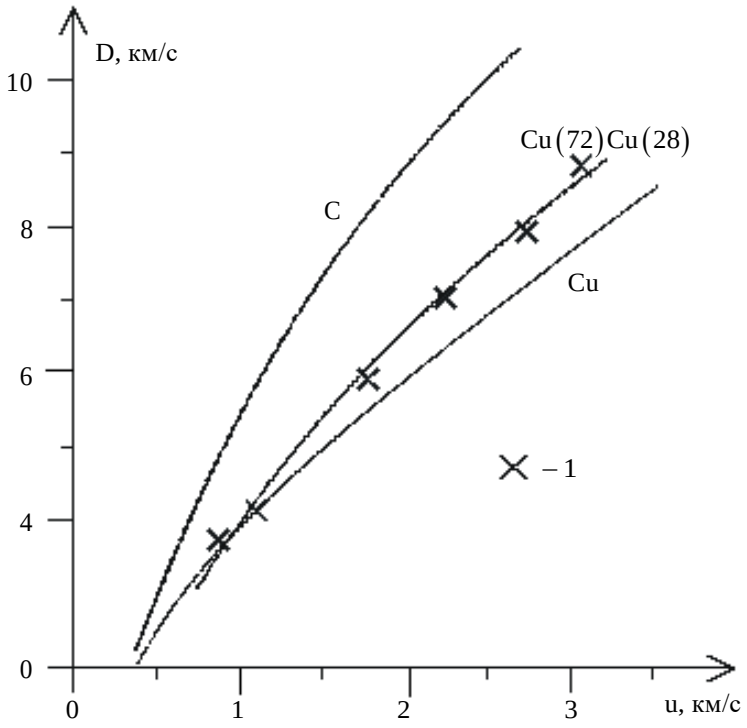


Рис. 7. Ударные адиабаты алмаза, меди и смеси медь-алмаз в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны: сплошные кривые – расчетные адиабаты $m = 1.194$; эксперименты 1 – [15] $m = 1.194 \div 1.234$

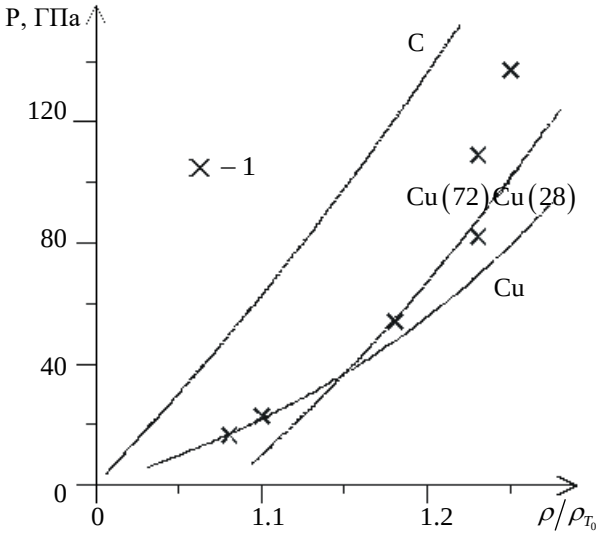


Рис. 8. Ударные адиабаты алмаза, меди и смеси медь-алмаз в координатах относительная плотность за фронтом ударной волны – давление за фронтом ударной волны: обозначения как на рис. 7

Заключение. Построено двухпараметрическое уравнение состояния в форме Ми-Грюнайзена, коэффициент Грюнайзена которого представлен в виде логарифмической зависимости от плотности, что позволяет адекватно описывать поведение как сплошных, так и пористых образцов алмаза при ударно-волновом нагружении. Достоинство этой модели состоит в простоте, ясности и предсказуемости физических результатов. Проведенное сравнение экспериментальных данных и результатов расчетов для сплошных и пористых образцов алмаза и смеси медь-алмаз позволяет сделать вывод о применимости предлагаемой модели уравнения состояния.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ломоносов И.В., Фортова С.В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния веществ для численного моделирования высокоэнергетических процессов. *ТВТ*, 2017, том 55, № 4, с. 596–626.

[2] Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. Multi-phase Equation of State for Carbon over Wide Range of Temperatures and Pressures. *International Journal Thermophys*, 2005, vol. 26, no. 2, pp. 479-491. DOI: 10.1007/s10765-005-4510-0

[3] Lomonosov I.V. Multi-phase Equation for Aluminum. Laser and Particle Beams, 2007, vol. 25, no. 4, pp. 567-584. DOI:10.1063/1.2833176

[4] Молодец А.М. Уравнение состояния твердых химических элементов. *Докл.* РАН, 1997, т. 353, № 5, с. 610-612.

[5] Хищенко К.В. Уравнение состояния магния в области высоких давлений. *Письма в ЖТФ*, 2004, т. 30, № 19, с. 65-71.

[6] Маевский К.К. Численное моделирование термодинамических параметров углерода. ТВТ, 2021, т. 59, № 5, с. 701-706.

[7] Нигматулин Р. И. *Основы механики гетерогенных сред*. Москва, Наука, 1978, 336 с.

[8] Бельхеева Р.К. Построение уравнения состояния пористой смеси конденсированных компонентов. *ПМТФ*, 2012, том. 53, № 4, с. 3-15.

[9] Бельхеева Р.К. Модель коэффициента Грюнайзена для широкого диапазона плотностей на примере меди. *ТВТ*, 2021, т. 59, № 4, с. 514–519.

[10] Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения пористой смеси при больших давлениях и температурах. *ПМТФ*, 2007, Т. 48, № 5, с. 53-60.

[11] Валько В. В., Ломоносов И. В., Острик А. В., Фортов В.Е., Хищенко К.В. *Широкодиапазонные уравнения состояния конструкционных материалов. Физика ядерного взрыва. В 5 томах. Том 2. Действие взрыва*. Москва, Физматлит, 2010, с. 140–228.

[12] Павловский М.Н. Ударное сжатие алмаза. *ФТТ*, 1971, т. 13, № 3, с. 893-895.

[13] Marsh S.P. *LASL Shock Hugoniot Data*. University of California Press, Berkeley, 1980, 658 p.

[14] Khishchenko K. V., Fortov V. E., Lomonosov I. V., Pavlovskii M. N., Simakov G. V., Zhernokletov M. V. Shock compression, adiabatic expansion and multi-phase equation of state of carbon, *Shock Compression of Condensed Matter-2001*, AIP, New-York, pp. 759-762.

[15] Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. *Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ*. Саров, РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001, 532 с.

[16] Шульженко А.А., Гаргин В.Г., Шишкин В.А. *Поликристаллические материалы на основе алмаза*. Киев, Наукова думка, 1989, 192 с.

[17] Хоменко А.А., Ганкевич Л.Г. Промежуточные преобразования структуры углерода при термической обработке синтетического алмаза. *Синтетические алмазы*, 1974, № 1, с. 9-14.

[18] Малоголовец В.Г., Гатилова Е.Г. Окисление высокодисперсных синтетических алмазов кислородом воздуха. *Синтетические алмазы*, 1973, № 4, с. 11-13.

[19] Horton R.M., Horton M.D. The high-pressure graphitization of diamond. HTHP, 1972, vol. 4, no. 1, pp. 39–48.

[20] Даниленко В.В. *Синтез и спекание алмаза взрывом*. Москва, Энергоатомиздат, 2003, 272 с.

Статья поступила в редакцию 04.09.2023

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Бельхеева Р.К. Моделирование малопараметрического уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для алмаза и смесей алмаз-металл. *Математическое моделирование и численные методы,* 2024, № 1, с. 3–17.

Бельхеева Румия Катдусовна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Математическое моделирование» ММФ НГУ. e-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru.

Modeling of the low-parameter equation of state in the Mie-Grüneisen form for diamond and diamond-metal mixtures

© R.K. Belkheeva

Novosibirsk State University, Novosibirsk, 630090, Russia

A model of the low-parameter equation of state of diamond was constructed, and the parameters of this equation were found, which allow to describe reliably the behavior of solid and porous diamond samples and diamond-metal mixture. Porous substance and porous mixture of condensed components were considered as thermodynamically equilibrium mixtures. The comparison of calculated and experimental shock adiabats showed the applicability of the proposed two-parameter equation of state in a wide range of pressures and temperatures.

***Keywords**: porous mixture, thermodynamic equilibrium, parameters of the equation of state, Grüneisen coefficient, shock adiabat*

REFERENCES

[1] Lomonosov I.V., Fortova S. V. Wide-range semiempirical equations of state of matter for numerical simulation on high-energy processes. *High Temperature*, 2017, vol. 55, is. 4, pp. 585–610.

[2] Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. Multi-phase Equation of State for Carbon over Wide Range of Temperatures and Pressures. *International Journal Thermophys*, 2005, vol. 26, no. 2, pp. 479-491. DOI: 10.1007/s10765-005-4510-0

[3] Lomonosov I.V. Multi-phase Equation for Aluminum. *Laser and Particle Beams*, 2007, vol. 25, no. 4, pp. 567-584. DOI:10.1063/1.2833176

[4] Molodets A.M. Uravnenie sostoyaniya tverdyh himicheskih elementov [Equation of the state of solid chemical elements]. *Proceedings of the Academy of Sciences*, 1997, vol. 353, no. 5, pp. 610-612.

[5] Khishchenko K.V. Uravnenie sostoyaniya magniya v oblasti vysokih davlenij [Magnesium equation in high pressure]. Technical Physics Letters, 2004, vol. 30, no. 19, pp. 65-71.

[6] Mayevskiy K.K. Numerical simulation of thermodynamic parameters of carbon. High Temp, 2022, vol. 60, no. 2, pp. 194-199. DOI: 10.1134/S0018151X2105014X

[7] Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred [Fundamentals of Mechanics of Heterogeneous Media]*. Moscow, Nauka, 1978, 336 p.

[8] Belkheeva R.K. Construction of the equation of state of a porous mixture of condensed components. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2012, vol. 53, no. 4, pp. 3-15.

[9] Belkheeva R.K. Model of the Grüneisen coefficient for a wide rang of densities on the example of copper. *High Temperature*, 2021, vol. 59, no. 4, pp. 514–519.

[10] Belkheeva R.K. Thermodynamic equation of state to describe the behavior of a porous mixture at high pressures and temperatures. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2007, vol. 48, no. 5, pp. 53-60.

[11] Valko V.V., Lomonosov I.V., Ostrik A.V., Fortov V.E., Khishchenko K.V.. *Wide-range equations of state of structural materials. Physics of Nuclear*

Explosion. В 5 томах. Volume 2. Explosion Action. Moscow, Fizmatlit, 2010, pp. 140–228.

[12] Pavlovskiy M.N. Shock compression of diamond. *Physics of the Solid State*, 1971, vol. 13, no. 3, pp. 893-895.

[13] Marsh S.P. *LASL Shock Hugoniot Data*. University of California Press, Berkeley, 1980, 658 p.

[14] Khishchenko K. V., Fortov V. E., Lomonosov I. V., Pavlovskii M. N., Simakov G. V., Zhernokletov M. V. Shock compression, adiabatic expansion and multi-phase equation of state of carbon, *Shock Compression of Condensed Matter-2001*, AIP, New-York, pp. 759-762.

[15] Trunin R.F., Gudarenko L.F., Zhernokletov M.V., Simakov G.V.. *Experimental data on shock-wave compression and adiabatic expansion of condensed substances*. Sarov, RFNC-VNIIEF, 2001, 532 p.

[16] Shulzhenko A.A., Gargin V.G., Shishkin V.A. *Polikristallicheskie materialy na osnove almaza [Polycrystalline materials based on diamond]*. Kiev, Naukova Dumka, 1989, 192 p.

[17] Khomenko A.A., Gankevich L.G. Promezhutochnye preobrazovaniya struktury ugleroda pri termicheskoj obrabotke sinteticheskogo almaza [Interim transformations of carbon structure during heat treatment of synthetic diamond*]*. *Sinteticheskie almazy [Synthetic diamonds]*, 1974, no. 1, pp. 9-14.

[18] Malogolovets V.G., Gatilova E.G. Okislenie vysokodispersnyh sinteticheskih almazov kislorodom vozduha [Oxidation of highly dispersed synthetic diamonds with oxygen air]. *Sinteticheskie almazy [Synthetic diamonds]*, 1973, no. 4, pp. 11-13.

[19] Horton R.M., Horton M.D. The high-pressure graphitization of diamond. HTHP, 1972, vol. 4, no. 1, pp. 39–48.

[20] Danilenko V.V.. *Sintez i spekanie almaza vzryvom [Synthesis and sintering of diamond explosion]*. Moscow, Energoatomizdat [Energoatomizdat], 2003, 272 p.

Belkheeva R.K., Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Mathematical Modeling, Novosibirsk State University. e-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru.