06

Об уравнениях состояния никеля и смеси никель–алюминий при высоких давлениях

© Р.К. Бельхеева

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ),
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru

Поступило в Редакцию 11 мая 2025 г.
В окончательной редакции 28 июля 2025 г.
Принято к публикации 7 августа 2025 г.

Описан метод построения уравнения состояния с малым количеством свободных параметров в форме Ми–Грюнайзена для никеля. Показано применение этого уравнения состояния для описания поведения смеси никеля с алюминием. Пористые образцы никеля и смеси никель–алюминий рассматриваются как простые термодинамически равновесные смеси конденсированного вещества и газа (воздуха в порах). Использование логарифмической зависимости коэффициента Грюнайзена от плотности позволило расширить диапазон применимости уравнения состояния на область пониженных плотностей. Рассчитанные с помощью этого уравнения состояния адиабаты Гюгонио и Пуассона для образцов никеля различных начальных пористостей и пористых образцов смеси алюминия и никеля хорошо согласуются с экспериментальными данными. Сделан вывод о применимости предложенного уравнения состояния никеля для описания поведения материала (в том числе в смеси с алюминием) при ударном сжатии (не выше 1 TPa) и изоэнтропическом расширении.

Ключевые слова: уравнение состояния, параметры уравнения состояния, ударная адиабата, изоэнтропа разгрузки, термодинамическое равновесие, коэффициент Грюнайзена.

DOI: 10.61011/JTF.2026.01.62043.110-25

Введение

Потребности современного производства ставят перед наукой такие задачи, как решение проблем динамического компактирования, ударно-волнового синтеза новых материалов и других взрывных технологий. Смеси отличаются большим разнообразием составов и начальных плотностей, отсюда возникает потребность в построении простой модели уравнения состояния, учитывающей состав и вклады компонентов смесей. В [1–11] описаны некоторые модели различной степени сложности для описания термодинамики материалов в широком диапазоне изменения давлений и плотностей при высокоскоростном соударении тел.

Никель является широко используемым материалом при легировании металлов, что характеризует его востребованность в промышленности. В сжатом виде информация о свойствах никеля и его влиянии как легирующей добавки на свойства сплавов и смесей приведена в [12]. Для описания термодинамического поведения смесей и сплавов требуются уравнения состояния.

Целями настоящей работы являются определение параметров простого уравнения состояния никеля и построение уравнения состояния смеси нескольких компонентов на примере смеси никель–алюминий при высоких давлениях.

Описанию термодинамических свойств никеля посвящены работы [13–20], в которых разработаны многофазные уравнения состояния с учетом трех агрегатных состояний вещества (твердого, жидкого и газообразного), и проведен анализ термодинамических свойств металлов, в списке которых присутствует никель. В настоящей работе построено уравнение состояния никеля на основе предложенной ранее модели [21,22], которая отличается от [13–20] простотой и малым количеством свободных параметров, но имеет менее широкую область применимости до давлений не выше 1 TPa. Продемонстрирована возможность использования этого уравнения состояния при описании термодинамических свойств смеси никеля с алюминием (для которого аналогичное уравнение состояния построено в недавней работе [22]) при ударном сжатии. Превращение гранецентрированной кубической (ГЦК) фазы в объемно-центрированную кубическую (ОЦК) фазу, обсуждаемое в теоретических исследованиях [23–26], но не обнаруженное в ударно-волновых экспериментах, в настоящей работе не учитывается.

1. Математическая модель уравнения состояния

Задаче выбора уравнения состояния для конденсированного вещества при описании ударно-волнового нагружения посвящено большое число работ (например, [1–11,13–22,27–30]). В этих работах отмечено, что проблема теоретического расчета уравнения состояния вещества в широком диапазоне давлений и температур методами статистической физики чрезмерно сложна,

поэтому рассматриваются упрощенные модели, отражающие только основные черты явления или процесса, что ограничивает область применимости получаемых уравнений состояния. Среди этих подходов выделяется метод конструирования полуэмпирических моделей, состоящий в задании функциональных зависимостей термодинамических параметров и использовании экспериментальных данных для определения числовых значений коэффициентов. Критерием применимости уравнения состояния является адекватное описание совокупности экспериментальных данных. В [31] при условии одинаковой формы (формы Ми–Грюнайзена) задания уравнения состояния каждой составляющей предложен метод построения уравнения состояния равновесной N-компонентной смеси. В [32] обосновано применение уравнения состояния в форме Ми–Грюнайзена для воздуха.

В [4,33] отмечено, что при описании поведения образцов, подвергнутых ударному сжатию, коэффициент Грюнайзена может быть описан формулой $\gamma = \gamma_0 r^{-l}$ (где $r = \rho/\rho_0$, ρ — плотность; ρ_0 — плотность при нормальных условиях; $l = \text{const}$, $l > 0$). В [34] показано, что при расчете ударных адиабат для материалов с высокой пористостью использование этой зависимости для коэффициента Грюнайзена приводит к его возрастанию при увеличении интенсивности ударной волны. Это является следствием того, что конечная плотность ударно-сжатого образца оказывается меньше нормальной плотности ($r^{-1} = \rho_0/\rho > 1$). На примере меди в [21] показано, что использование степенной зависимости коэффициента Грюнайзена от плотности с показателем $l > 0$ для описания ударного нагружения сильнопористого материала не согласуется с экспериментальными данными. В [34] предложено при описании сильнопористых веществ зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности задавать формулой $\gamma = \gamma_0 r^{l}$ (где $l = \text{const}$, $l > 0$), и проведено сравнение результатов расчетов и экспериментальных данных для образцов меди, железа и никеля с пористостями, превышающими значение 7.2.

В [35] для уравнения состояния нескольких металлов, в числе которых был никель, коэффициент Грюнайзена представлен выражением, которое легко привести к виду $\Gamma(T) = \Gamma_\infty + f(T)$, где

$$f(T) = \frac{\Gamma_0 - \Gamma_\infty}{1 + \beta T},$$

$\Gamma_0, \Gamma_\infty, \beta$ — свободные параметры, T — абсолютная температура. В [36] для уравнения состояния меди при описании коэффициента Грюнайзена использована комбинация из подходов [34,35]: перед слагаемым $f(T)$ в выражении для коэффициента Грюнайзена поставлен множитель $r^{-\alpha}(1 + \beta T_0)$, где T_0 — нормальная температура. Причем в области сжатия свободный параметр α считается положительным, а в области растяжения он заменяется отрицательным свободным параметром δ. В результате получается, что в [36] коэффициент Грюнайзена задается кусочной функцией

$$\Gamma(V, T) = \Gamma_\infty + r^{-\alpha}(1 + \beta T_0) f(T),$$

если $r > 1$ ($\alpha > 0$), и

$$\Gamma(V, T) = \Gamma_\infty + r^{-\delta}(1 + \beta T_0) f(T),$$

если $r < 1$ ($\delta < 0$). Коэффициент Грюнайзена, заданный этими выражениями, является непрерывной функцией объема, но в точке $r = 1$ появляется излом. Как следствие, производная коэффициента Грюнайзена по объему при $r = 1$ терпит разрыв:

$$\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial V}\right)_T \bigg|_{r \to 1, r > 1} \neq \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial V}\right)_T \bigg|_{r \to 1, r < 1},$$

поскольку

$$\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial V}\right)_T \bigg|_{r \to 1, r > 1} = \alpha \rho_0 (1 + \beta T_0) f(T),$$

$$\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial V}\right)_T \bigg|_{r \to 1, r < 1} = \delta \rho_0 (1 + \beta T_0) f(T).$$

Соответственно, давление также является непрерывной функцией, но производная давления по объему претерпевает разрыв в точке $r = 1$. В [34] коэффициент Грюнайзена также задается кусочной функцией, но, поскольку изучалось поведение сильнопористых материалов, для которых в области нагружения плотности образцов не превосходили ρ_0, разрыв производной в точке $r = 1$ ($\rho = \rho_0$), не входящей в область рассмотрения, не повлиял на результаты расчетов.

Понятно, что использование аналитических функций, в частности, для описания зависимости коэффициента Грюнайзена от плотности [11,28,37–42], исключает появление разрывов в термодинамических параметрах. Предложенная в [21] логарифмическая зависимость от плотности модели коэффициента Грюнайзена

$$\gamma = \gamma_0 r^{-\ln r} \tag{1}$$

позволяет обойти казус с разрывом производной давления по объему, поскольку в этом случае давление является гладкой функцией своих переменных. Зависимость (1) расширяет диапазон применимости коэффициента Грюнайзена на область малых плотностей и позволяет адекватно отображать аномальное поведение ударных адиабат при нагружении сильнопористых образцов. Поскольку знак логарифма зависит от величины аргумента, при $r < 1$ показатель становится отрицательным, и значения γ уменьшаются при увеличении интенсивности ударной волны.

В данном исследовании пористая N-компонентная смесь рассматривается как гетерогенная среда, поры в которой заполнены воздухом. Под пористостью (m) понимается отношение нормальной плотности монолита (ρ_{T0}) к начальной плотности пористого образца (ρ_{00}).

Вне рамок рассмотрения в настоящей работе остаются эффекты, связанные с тепловым возбуждением электронной подсистемы, плавлением, испарением и ионизацией. Высокие давления, возникающие при распространении сильных ударных волн, позволяют пренебречь эффектами, связанными с прочностью, и использовать условия равенства давлений фаз в качестве условий совместного движения [43]. При этом когда эффекты относительного движения компонентов несущественны, и смесь находится в термодинамическом равновесии, для системы выполняются условия $P_i = P$, $T_i = T$, $u_i = u$ (где P_i, T_i, u_i — давление, температура и массовая скорость компонента i; P, T, u — давление, температура и массовая скорость смеси в целом). Тогда движение такой среды можно описать как движение одного континуума с особым уравнением состояния, учитывающим свойства компонентов смеси и их массовые доли, что приводит к значительному сокращению числа уравнений. В рамках такого способа описания смеси принято, что уравнения состояния компонентов в среде такие же, как в свободном состоянии. Для простых смесей, не образующих связей в атомарном масштабе, в работе [43] изложены принципы построения модели взаимодействующих и взаимопроникающих континуумов. Способ описания смеси единым континуумом рассмотрен ранее, например, в работах [43–45]. В рамках такого способа описания смеси континуумов, находящихся в термодинамическом равновесии, в [21,34] изложен метод построения уравнения состояния равновесной N-компонентной смеси, и выписаны соотношения для вычисления параметров уравнения состояния смеси A, n, ρ_0, γ_0, c_{V0} через параметры и массовые доли (x_i) составляющих.

В [1] отмечено, что при описании ударно-волновых явлений поведение конденсированных веществ может быть промоделировано уравнением состояния в форме Ми–Грюнайзена, представляющим давление P в виде суммы слагаемых, описывающих холодное сжатие (P_X) и температурную зависимость (P_T):

$$P = P_X + P_T. \tag{2}$$

В настоящей работе слагаемые полного давления (2) представлены выражениями

$$P_X = A\lfloor r^n - 1\rfloor - \gamma r \rho_0 c_{V0} T_0, \tag{3}$$

$$P_T = \gamma r \rho_0 c_{V0} T. \tag{4}$$

Здесь $r = \rho/\rho_0$; ρ_0 — параметр уравнения состояния (в случае конденсированного вещества это его плотность при нормальных условиях); A, n — константы, характеризующие вещество; γ — коэффициент Грюнайзена; c_{V0} — удельная теплоемкость при постоянном объеме (в настоящей работе c_{V0} полагается константой); $T_0 = 293$ K. Параметры n и A связаны соотношением

$$A = \frac{c_0^2 \rho_0}{n},$$

где c_0 — объемная скорость звука при нормальных условиях. В этом случае уравнение состояния (2) принимает вид

$$P = A\lfloor r^n - 1\rfloor + \gamma_0 \rho_0 r^{1-\ln r} c_{V0}(T - T_0).$$

Внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих:

$$E = E_X + E_T, \tag{5}$$

где E_X и E_T — упругая и тепловая части внутренней энергии соответственно,

$$E_X = \frac{A}{(n-1)\rho_0}[r^{n-1} - 1] + \frac{A}{\rho_0}[r^{-1} - 1] - \gamma_0 c_{V0} T_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(\ln r) - c_{V0} T_0, \tag{6}$$

$$E_T = c_{V0} T. \tag{7}$$

Здесь использована функция ошибок

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt,$$

для которой в [37] приведено аппроксимационное выражение, позволяющее вычислять ее значения с достаточно высокой точностью.

В более ранних работах автора [21,31,32,34,46], как и в некоторых других известных работах (например, [47–49]), не заострялось внимание на том, что для термодинамической согласованности уравнений (2) и (5) необходимо выбирать формулы для слагаемых в (2) и (5) так, чтобы они удовлетворяли основному термодинамическому тождеству [1]; слагаемое $\gamma \rho c_{V0} T_0$ необходимо добавить к холодной части давления.

В [21] для описания тепловой части давления с помощью (1) используется только один свободный параметр (γ_0), а для всей модели уравнения состояния — всего два свободных параметра (n и γ_0).

При проведении расчетов для меди в [21] для выражения (1) задавалось $\gamma_0 = 2$. Уравнение состояния с таким коэффициентом Грюнайзена хорошо описывало поведение материалов с малой (менее 3) и большой пористостью (более 5.4, когда проявляется аномальный ход ударных адиабат, при котором образцы в ударной волне сжимаются до плотностей тем меньших, чем выше давление, в некотором диапазоне давлений). В данной работе обсуждается выбор значения γ_0, позволяющего описать весь спектр пористостей.

При использовании выражения (1) при степенях сжатия ρ/ρ_{T0} около 3 значение коэффициента Грюнайзена становится меньшим общепринятого предельного значения, равного 2/3. Чтобы замедлить скорость уменьшения коэффициента Грюнайзена, можно ввести для его описания еще один параметр α:

$$\gamma = \gamma_0 r^{-\alpha \ln r}. \tag{8}$$

Способом, описанным в [21], для уравнения состояния смеси в форме (2)–(4), коэффициент Грюнайзена для которого задан в виде (8), получены соотношения для вычисления параметров уравнения состояния смеси через соответствующие параметры и массовые доли компонентов:

$$n = \frac{S_1 S_3}{S_2^2} - 1,\ A = kA_{\max} - \frac{nS_2}{S_1},$$

$$\rho_0 = \frac{1}{S_1}\left(\frac{A}{P + kA_{\max}}\right)^{1/n},\ \alpha = \frac{1}{\ln(\rho_0 S_1)}\left(\frac{S_1 S_5}{S_2 S_4} - 1\right),$$

$$\gamma_0 = \frac{nS_4}{c_{V0}}(\rho_0 S_1)^{\alpha \ln(\rho_0 S_1)},\ c_{V0} = \sum_{i=1}^{N} x_i c_{V0i}, \qquad (9)$$

где

$$S_1 = \sum_{i=1}^{N} R_i,\ S_2 = \sum_{i=1}^{N} R_i \frac{kA_{\max} - A_i}{n_i},$$

$$S_3 = \sum_{i=1}^{N} R_i (n_i + 1)\left(\frac{kA_{\max} - A_i}{n_i}\right)^2,$$

$$S_4 = \sum_{i=1}^{N} R_i^{-\alpha_i \ln R_i} \frac{\rho_{0i} c_{V0i} \gamma_{0i}}{n_i},$$

$$S_5 = \sum_{i=1}^{n} R_i^{-\alpha_i \ln R_i} \frac{\rho_{0i} c_{V0i} \gamma_{0i}}{n_i} \frac{kA_{\max} - A_i}{n_i}(1 + \alpha_i \ln R_i),$$

$$R_i = \frac{x_i}{\rho_{0i}}\left(\frac{A_i}{P + kA_{\max}}\right)^{1/n_i}.$$

Здесь $A_i, n_i, \rho_{0i}, \gamma_{0i}, \alpha_i, c_{V0i}$ — параметры уравнений состояния (коэффициент сжатия, показатель сжатия, нормальная плотность, постоянные параметры коэффициента Грюнайзена, удельная теплоемкость при постоянном объеме) компонента i; $A_{\max} = \max\{A_1, \ldots, A_N\}$. В [34] показано, что при значении $k = 2$ выполняется условие сходимости при получении соотношений (9). Эти соотношения получены при условии задания уравнений состояния составляющих в одинаковой форме. Выражение для упругой части энергии в этом случае вместо (6) принимает вид

$$E_X = \frac{A}{(n-1)\rho_0}[r^{n-1} - 1] + \frac{A}{\rho_0}[r^{-1} - 1]$$
$$- \gamma_0 c_{V0} T_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha} \ln r) - c_{V0} T_0. \qquad (10)$$

Таким образом, построена простая малопараметрическая модель уравнения состояния термодинамически равновесной N-компонентной смеси (2)–(5), (7)–(10).

Параметры уравнения состояния для смеси, полученные с помощью соотношений (9), зависят от текущего значения давления P. В [46] показано для случая $\alpha = 1$, что уравнение состояния смеси с параметрами, полученными с использованием соотношений (9) при $P = 0$ (при нормальных условиях), адекватно описывает поведение смеси как при нагружении, так и при разгрузке. Результаты расчетов, проведенных с постоянными значениями параметров уравнения состояния смеси, почти не отличаются от результатов расчетов, проведенных с параметрами, зависящими от текущего давления. В настоящей работе все расчеты проведены с постоянными, вычисленными при $P = 0$, значениями параметров уравнения состояния смеси. Для описания ударно-волнового нагружения пористых образцов никеля и пористых образцов смеси никеля и алюминия необходимо получить два свободных параметра (n и γ_0) для уравнения состояния никеля. Параметр α в настоящей работе не подбирался. Возможность подбора этого параметра обусловлена наличием экспериментальных данных при высокоинтенсивном нагружении образцов. Проведено сравнение расчетных ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки для двух заданных значений α с экспериментальными данными.

В [1] отмечено, что при расчете поведения твердых тел при высоких давлениях за начало отсчета давления и внутренней энергии можно принять нулевые значения. Уравнения Гюгонио для первоначально покоящейся среды в случае, когда давление в невозмущенной среде равно нулю, имеют вид

$$\rho_{00} D = \rho(D - u),\ P = \rho_{00} D u,\ E - E_0 = \frac{P}{2}\left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho}\right), \qquad (11)$$

где ρ_{00}, E_0 — соответственно плотность и удельная внутренняя энергия смеси перед фронтом ударной волны; u, P, ρ, E — массовая скорость, давление, плотность и удельная внутренняя энергия среды за фронтом ударной волны; D — скорость фронта ударной волны. Добавление к соотношениям (11) уравнений состояния среды (2)–(5), (7), (8), (10) и формул для вычисления параметров смеси (9) приводит к системе уравнений для неизвестных u, D, E, P, ρ. Задавая значение массовой скорости среды за фронтом ударной волны, из этой системы уравнений можно определить значения всех искомых величин.

Значения параметров, которые были использованы при проведении расчетов ударно-волнового сжатия и изоэнтропической разгрузки образцов, приведены в таблице (для алюминия значения констант взяты из работы [22], для воздуха — [32]).

2. Результаты расчетов и сравнение с экспериментом

В разд. 2 описан способ подбора параметров n и γ_0 для уравнения состояния никеля на основе модели смеси [21,22] и коэффициента Грюнайзена в виде (8) так, чтобы описать поведение этого металла и его смеси с алюминием при ударном сжатии и изоэнтропической разгрузке. Кроме того, использован второй параметр

Параметры уравнений состояния никеля, алюминия и воздуха

Вещество	ρ_{0i}, kg/m^3	c_{0i}, km/s	n_i	c_{V0i}, kJ/(kg · K)	γ_{0i}	α_i
Никель	8875	4.65	4.1	0.442	1.63	1
Никель	8875	4.65	3.70	0.442	1.63	0.5
Алюминий	2712	5.33	3.46	0.8975	1.65	1
Воздух	1.3	0.343	2.20	0.718	0.16	1

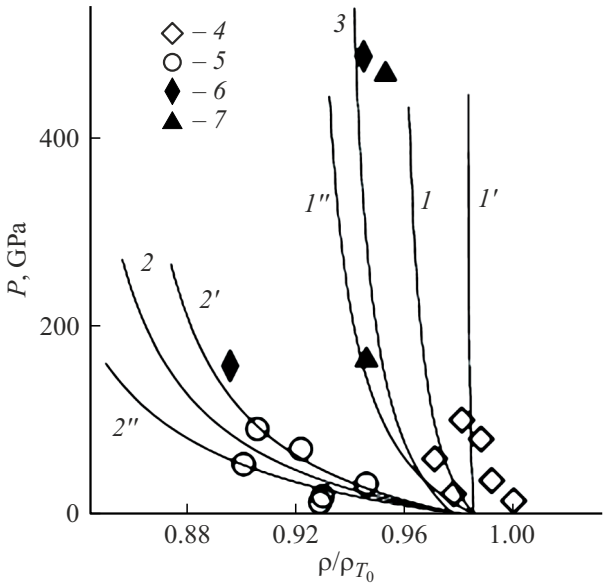

Рис. 1. Давление (P) как функция степени сжатия (ρ/ρ_{T0}) на ударных адиабатах образцов никеля для исходных пористостей $m = 2.305$ (*1, 1′, 1″*), 2.706 (*2, 2′, 2″*) и 3.0 (*3*); $\gamma_0 = 1.63$ (*1, 2*), 1.55 (*1′, 2′*), 1.75 (*1″, 2″*), и 1.1 (*3*); экспериментальные данные: *4* — $m = 2.305$ [50]; *5* — $m = 2.706$ [50]; *6* — $m = 3.0$ [50]; *7* — $m = 3.0$ [51]; $\rho_{T0} = 8.875\,\mathrm{g/cm^3}$.

($\alpha \neq 1$; в [21,22] рассматривался лишь вариант $\alpha = 1$) для описания коэффициента Грюнайзена. При выборе γ_0 следует учесть, что наиболее явно влияние этого параметра проявляется при описании почти вертикальных адиабат в координатах степень сжатия — давление. В этом случае величина $r = \rho/\rho_0$ близка к единице и вклад в давление холодной составляющей P_X почти нулевой. Из имеющихся в наличии экспериментальных данных для никеля выбираются адиабаты для образцов с пористостями $m = 2.305, 2.706, 3.0$. По результатам на рис. 1 видно, что адиабаты, рассчитанные со значением $\gamma_0 = 1.55$, отклонены вправо от экспериментальных точек [50], а со значением $\gamma_0 = 1.75$ — влево. В работе выбирается единственное значение γ_0, которое будет использовано для расчета ударных адиабат для образцов со всеми значениями пористостей, поэтому выбрано значение $\gamma_0 = 1.63$, при котором расчетные ударные адиабаты, отмеченные цифрами без штрихов, согласуются с экспериментальными данными [50] как для $m = 2.305$, так и для $m = 2.706$.

Для того чтобы уточнить значение γ_0 для пористости $m = 3$, приведено выражение для ударной адиабаты, полученное из третьего уравнения системы (11):

$$P = \frac{(h-1)P_X - 2\rho(E_X - E_0)}{h - \rho/\rho_{00}}, \quad h = \frac{2}{\gamma} + 1. \qquad (12)$$

Ясно, что поведение почти вертикально расположенных точек [50,51] для $m = 3$ может быть описано выражением (12), если знаменатель дроби близок к нулю. Учитывая, что при $m = 3$, $\rho \approx \rho_{T0}$, $m = \rho_{T0}/\rho_{00}$, получаем, что значение γ_0 близко к единице. Значение γ_0, равное 1.1, принимается за особое решение. Далее в работе значение γ_0 принимается равным 1.63 для всех пористостей, кроме $m = 3$. Параметры уравнения состояния, вычисленные по формулам (9), зависят от массовых концентраций составляющих и текущего давления. Вследствие этого начальные значения параметра ρ_0 (при $P = 0$) для смеси конденсированного и газообразного веществ с увеличением пористости смещаются влево, что отчетливо наблюдается на рис. 1.

На рис. 2, *a* приведены графики зависимости коэффициента Грюнайзена от степени сжатия, заданного формулой (8), при значениях параметра $\alpha = 1$ и 0.5 на ударной адиабате исходно сплошных образцов никеля. Так как при $\alpha = 0.5$ увеличивается доля тепловой составляющей в давлении (P_T), то соответственно уменьшается доля, приходящаяся на упругое давление (P_X). Этот факт учитывается заданием показателя сжатия n. На рис. 2, *a* предельное правое значение степени сжатия, равное 7.45 ($\rho/\rho_{T0} = 7.45$), для $\alpha = 1$ получено при значениях давления $P \approx 192.9$ TPa, для $\alpha = 0.5$ — при $P \approx 268.4$ TPa.

На рис. 2, *b, c*, 3, 4 показаны результаты расчетов ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки при $\alpha = 1$ и 0.5. Сравнение расчетных адиабат для сплошных образцов, вычисленных со значениями параметров уравнения состояния с $\alpha = 1$ и 0.5, и экспериментальных данных [50–57], проведено на рис. 2, *b, c* в координатах u–D и ρ/ρ_{T0}–P соответственно. Расхождение расчетных кривых увеличивается с ростом интенсивности ударной волны. Сравнение показывает, что до массовых скоростей $u \approx 8$ km/s, степеней сжатия около 2 и давлений 1 TPa, обе кривые почти не различаются между собой и хорошо согласуются с экспериментальными данными [50–57].

Сравнение расчетных и экспериментальных [50,58,59] ударных адиабат для образцов никеля различных пористостей проводится на рис. 3, *a* в координатах u–D, на рис. 3, *b* в координатах ρ/ρ_{T0}–P. Кривые, рассчитанные с помощью предлагаемого уравнения состояния

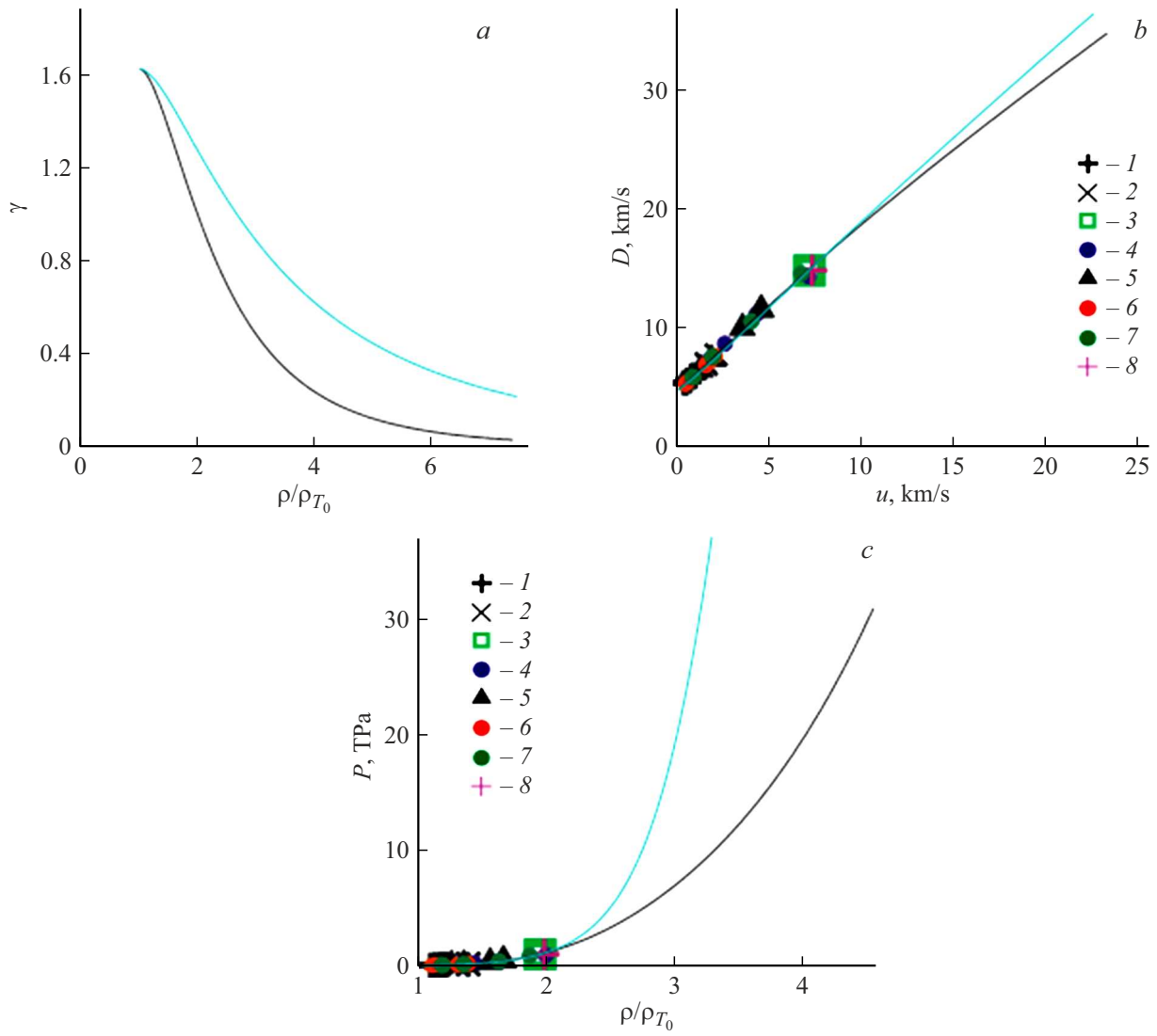

Рис. 2. Ударные адиабаты исходно сплошных образцов никеля при $\alpha = 1$ (черные линии) и 0.5 (голубые линии): *a* — зависимости коэффициента Грюнайзена (γ) от степени сжатия (ρ/ρ_{T0}); *b* — волновая скорость (D) как функция массовой скорости (u); *c* — давление (P) как функция степени сжатия (ρ/ρ_{T0}). Экспериментальные данные: *1* — [52]; *2* — [53]; *3* — [51]; *4* — [54]; *5* — [55]; *6* — [56]; *7* — [57]; *8* — [50].

с коэффициентом Грюнайзена, заданным соотношением (8), хорошо согласуются с экспериментальными данными [50,58,59].

В [60] предложены два потенциала модели погруженного атома для ГЦК и ОЦК-фаз никеля; по свойствам металла на изобаре и ударной адиабате найдены параметры этих потенциалов; рассчитана линия плавления никеля и указаны координаты участка плавления на ударной адиабате для сплошного никеля: для давления 275.8–297.6 GPa, для температуры 4422–4499 K; проведено сравнение с отличными от [60] данными других авторов (см. ссылки в [60]). При ударно-волновом нагружении пористых образцов температуры достигают тем больших значений, чем больше пористость, и плавление в пористых образцах начинается при давлениях меньших 275.8 GPa. Диапазоны изменения давлений и температур при плавлении незначительны по сравнению с достигаемыми значениями этих величин. В [61] показано, что эффект плавления вещества в ударной волне мало заметен на ударных адиабатах для образцов алюминия различной начальной плотности. В настоящей работе принято, что для других веществ, в том числе для никеля, учет плавления также не отражается на форме ударной адиабаты в координатах, указанных на рис. 2, *b, c* и 3. Сравнение расчетных и экспериментальных ударно-волновых данных для сплошных и пористых образцов никеля вплоть до давлений 1 TPa на рис. 2, *b, c* (для сплошных образцов) и рис. 3 позволяет сделать вывод о применимости предлагаемого уравнения состояния никеля в указанном диапазоне давлений.

Изоэнтропы разгрузки, приведенные на рис. 4 в координатах u–P, показывают хорошее совпадение результатов расчетов и экспериментальных данных [62] за исключением точек при давлении $P < 0.1$ GPa, т. е. в области

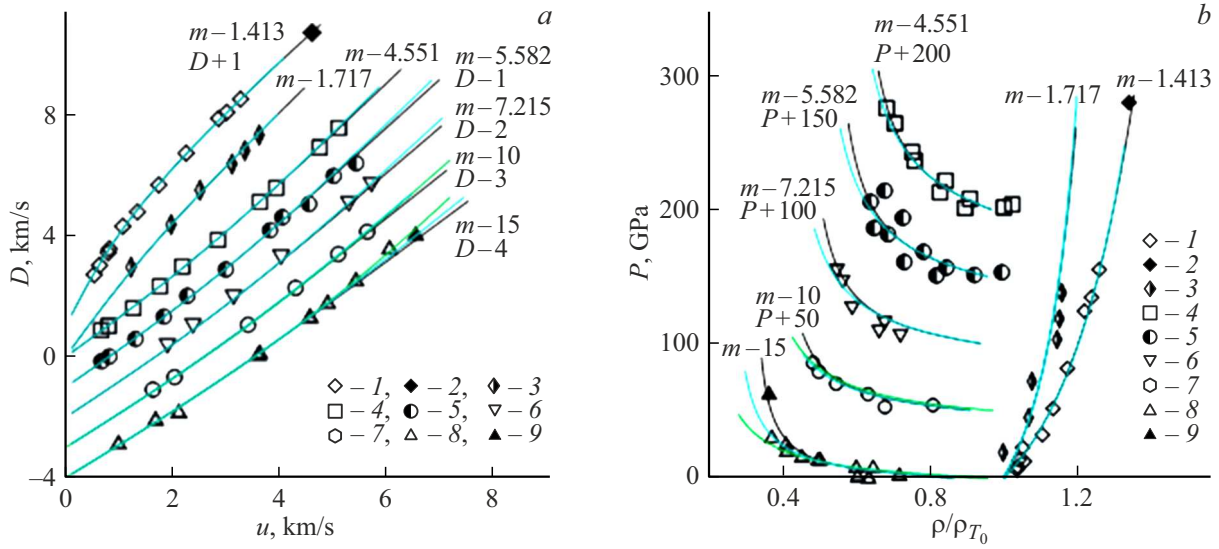

Рис. 3. Ударные адиабаты образцов никеля различной пористости при $\alpha = 1$ (черные линии) и 0.5 (голубые линии), а также по модели [34] (зеленые линии): *a* — волновая скорость (D) как функция массовой скорости (u); *b* — давление (P) как функция степени сжатия (ρ/ρ_{T0}). Рядом с кривыми поставлены значения пористостей и величины сдвига волновой скорости и давления. Экспериментальные данные, *m*: *1* — 1.413 [50]; *2* — 1.427 [50]; *3* — 1.717 [50]; *4* — 4.551 [50]; *5* — 5.582 [50]; *6* — 7.215 [50]; *7* — 10 [58]; *8* — 15 [58]; *9* — 15 [59].

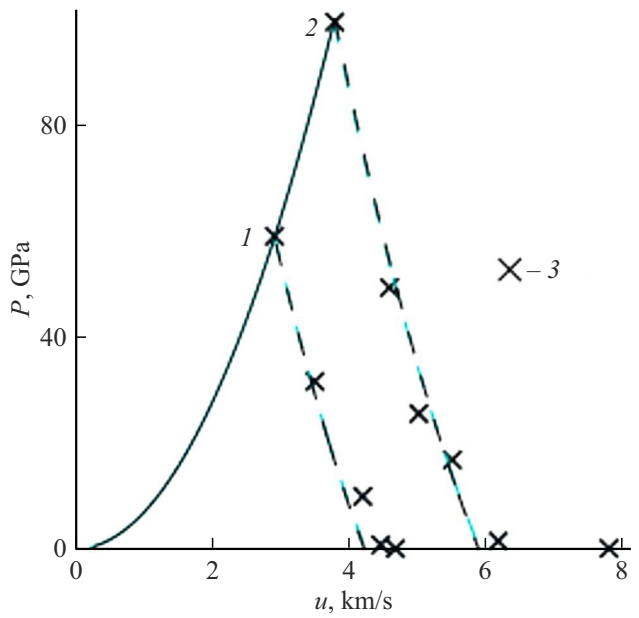

Рис. 4. Давление (P) как функция массовой скорости (u) на ударной адиабате (сплошная линия) и изоэнтропах разгрузки (штриховые линии) ударно-сжатых образцов никеля начальной пористости $m = 2.305$ при $\alpha = 1$ (черные линии) и 0.5 (голубые линии). Экспериментальные данные: *3* — [62]. В точке *1* — $u = 2.91$ km/s, $P = 59$ GPa, в точке *2* — $u = 3.78$ km/s, $P = 99.4$ GPa.

фазового перехода жидкость–пар, не учитываемого в представленной простой модели.

В [63] в предположении, что данные экспериментов достаточно точны, для небольших значений r ($0.945 < r < 1.371$) промежуток сжатий за фронтом ударной волны разбивается на подынтервалы шириной $\Delta r = 0.04$, и из базы экспериментальных данных [64,65] выбираются данные, относящиеся к этим узким интервалам. Считая, что коэффициента Грюнайзена $\gamma = V(\partial P/\partial E)_V$, по коэффициентам наклона $(\partial P/\partial E)_V$, построенных по экспериментальным данным для пористостей $1 \le m \le 3$ кривых в координатах $\Delta E - P$, где ΔE — скачок энергии, P — давление в ударной волне, производится оценка коэффициента

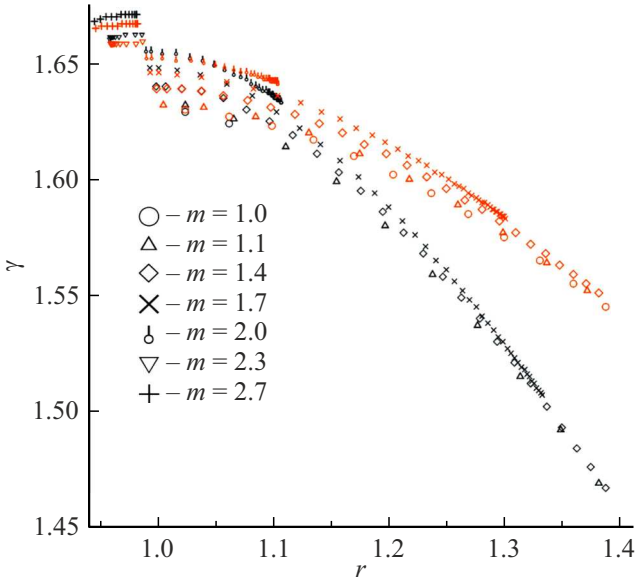

Рис. 5. Расчетные зависимости коэффициента Грюнайзена от степени сжатия в ударной волне для $\alpha = 1$ (черные символы) и 0.5 (красные символы).

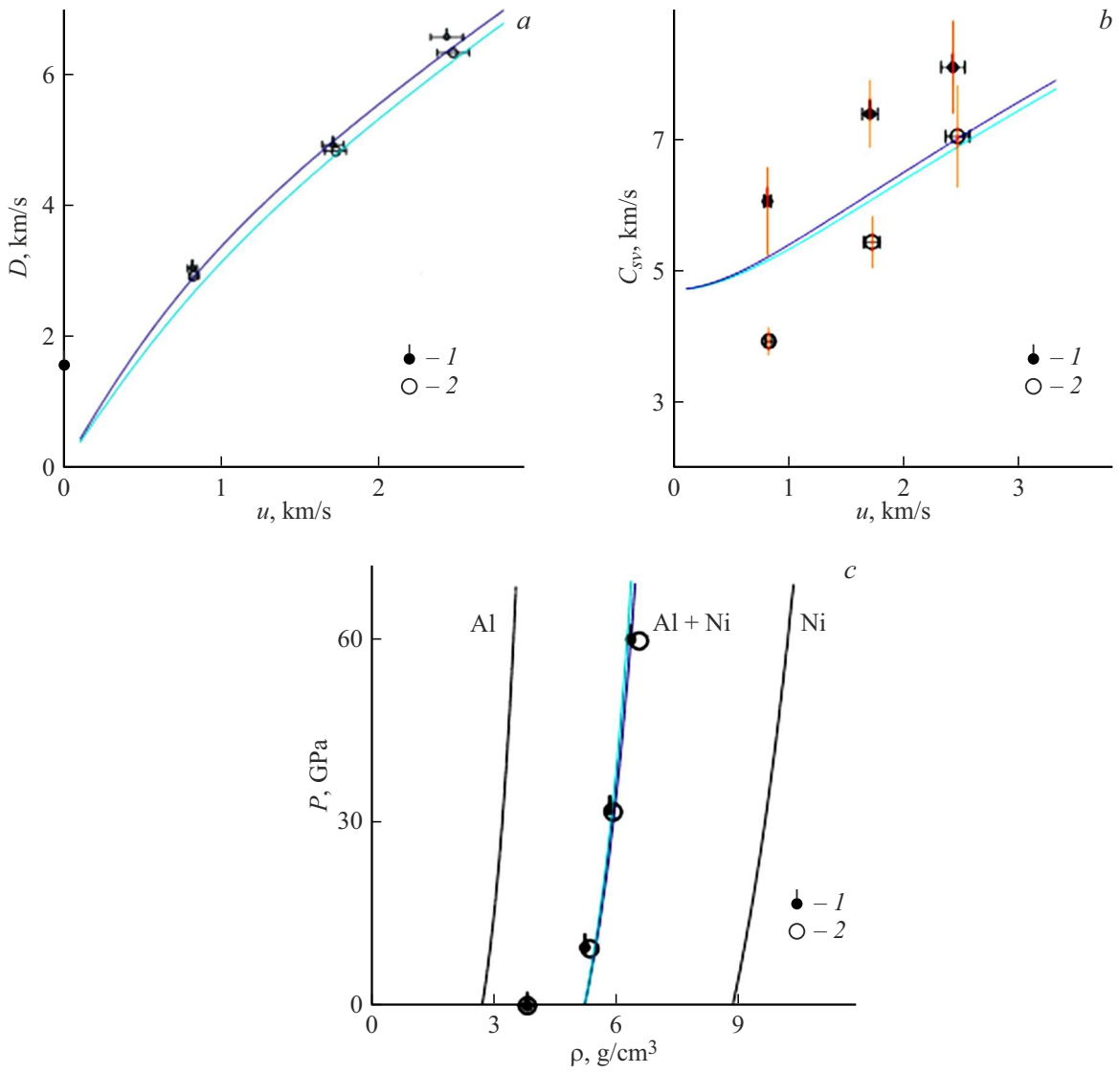

Рис. 6. Ударные адиабаты образцов смеси Al(0.315)Ni(0.685) с $\rho_{00} = 3.75$ (голубые линии) и 3.92 g/cm^3 (синие линии), а также для образцов алюминия (Al) и никеля (Ni) с начальной пористостью $m = 1.35$ (черные линии): *a* — волновая скорость (D) как функция массовой скорости (u) (*1, 2* — экспериментальные данные [67]); *b* — скорость звука (C_{vs}) как функция массовой скорости (u) (*1, 2* — экспериментальные данные [68]); *c* — давление (P) как функция плотности (ρ) (*1, 2* — экспериментальные данные [67]).

Грюнайзена в ударной волне. По совокупности данных в этих диапазонах пористостей и сжатий в [63] коэффициент Грюнайзена изменяется в промежутке $1.64 > \gamma > 0.97$, по молекулярно-динамическим результатам [66] — $1.64 > \gamma > 0.6$. Результаты расчетов [63] заметно отличаются от [66], с ростом пористости расхождение увеличивается.

На рис. 5 приведены зависимости коэффициента Грюнайзена, полученные в настоящей работе для соответствующих диапазонов сжатия и пористости. По оценке [63], для пористостей, меньших 1.744, коэффициент Грюнайзена меняется в диапазоне $1.61 \geq \gamma \geq 0.91$, на рис. 5 в этом диапазоне $1.65 > \gamma > 1.45$ с $\alpha = 1$ и $1.65 > \gamma > 1.55$ с $\alpha = 0.5$. Для пористостей $m \geq 2$ по оценке [63] $1.6 > \gamma > 0.97$, в настоящей работе для пористости $m = 2$ коэффициент Грюнайзена меняется в диапазоне $1.66 > \gamma > 1.63$ с $\alpha = 1$ и $1.66 > \gamma > 1.64$ с $\alpha = 0.5$.

В работах [67,68] экспериментально исследована ударная сжимаемость смеси микро- и нанодисперсных порошков алюминия (массовая доля $x_{\mathrm{Al}} = 0.315$) и никеля (массовая доля $x_{\mathrm{Ni}} = 0.685$), измерена скорость звука за фронтом ударной волны с целью установления возможности протекания реакции с образованием алюминида никеля. Сравнение полученных опытных данных и результатов расчетов, полученных с использованием предлагаемого уравнения состояния смеси, приведено на рис. 6. Для уравнения состояния никеля использовались

параметры при $\alpha = 1$. В [67,68] начальные плотности спрессованных из порошка образцов принимали значения $3.75-3.92\,\mathrm{g/cm^3}$. На рис. 6 приведены расчетные ударные адиабаты для смеси Al(0.315)Ni(0.685). На рис. 6, *c* приведены также ударные адиабаты для образцов никеля и алюминия с пористостью $m = 1.35$, что соответствует начальной пористости образцов смеси алюминия и никеля в эксперименте [67,68].

Графики на рис. 6, *a, c* показывают хорошее согласие расчетных кривых и экспериментальных данных [67]. Отличия на рис. 6, *b* обусловлены плавлением образцов в опытах [68]. В [68] отмечено, что микро- и нанодисперсные образцы никеля начинают плавиться при $P = 30$ и 37 GPa, оказываются полностью расплавленными; образцы алюминия начинают плавиться при $P = 47$ и 60 GPa, оказываются полностью расплавленным. В этом различие между расчетными результатами автора (не учитываются фазовые переходы) и данными [67,68].

Заключение

На примере никеля показан способ подбора параметров для малопараметрического уравнения состояния в форме Ми–Грюнайзена, достоверно описывающего поведение сплошных и пористых образцов никеля и смеси никель–алюминий при ударном сжатии и изоэнтропической разгрузке. Новое выражение (8) для коэффициента Грюнайзена (с дополнительным параметром α) позволяет расширить диапазон применения предложенной ранее модели до параметров, достигаемых при нагружении образцов больших значений исходной пористости (до $m \approx 15$). Результаты сравнения расчетных и экспериментальных ударных адиабат для образцов никеля различных исходных пористостей показывают хорошее описание в рамках предложенного уравнения состояния (и выбранными параметрами n и γ) поведения никеля (в том числе в смеси с алюминием) в ударных волнах с интенсивностью не выше 1 TPa.

Благодарности

Автор благодарит В.В. Якушева за предоставленные данные экспериментов.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений* (Наука, М., 1966)
[2] R.G. McQueen, S.P. Marsh, J.W. Taylor, J.N. Fritz, W.J. Carter. In: R. Kinslow (editor). *High Velocity Impact Phenomena* (Academic Press, NY., 1970), p. 293.
[3] P. Caldirola, H. Knoepfel (editors). *Physics of High Energy Density* (Academic Press, NY., 1971)
[4] А.В. Бушман, В.Е. Фортов. УФН, **140** (2), 177 (1983). [A.V. Bushman, V.E. Fortov. Phys. Usp., **26** (6), 465 (1983). DOI: 10.1070/PU1983v026n06ABEH004419]
[5] S. Elieser, A.K. Ghatak, H. Hora. *An Introduction to Equations of State: Theory and Applications* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1986)
[6] А.В. Бушман, Г.И. Канель, А.Л. Ни, В.Е. Фортов. *Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий* (ОИХФ АН СССР, Черноголовка, 1988)
[7] А.В. Бушман, И.В. Ломоносов, В.Е. Фортов. *Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии* (ИХФЧ РАН, Черноголовка, 1992)
[8] В.М. Фомин, А.И. Гулидов, Г.А. Сапожников, И.И. Шабалин. *Высокоскоростное взаимодействие тел* (СО РАН, Новосибирск, 1999)
[9] В.Е. Фортов, Л.В. Альтшулер, Р.Ф. Трунин, А.И. Фунтиков (ред.). *Ударные волны и экстремальные состояния вещества* (Наука, М., 2000)
[10] K.V. Khishchenko, A.E. Mayer. Int. J. Mech. Sci., **189**, 105971 (2021).
[11] К.В. Хищенко. ТВТ, **61** (3), 477 (2023). DOI: 10.31857/S0040364423050071
[12] И.Л. Кнунянц (ред.). *Химическая энциклопедия в пяти томах* (Советская энциклопедия, М., 1988), т. 3.
[13] I.V. Lomonosov, V.E. Fortov, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov. AIP Conf. Proc., **505**, 85 (2000).
[14] P.R. Levashov, V.E. Fortov, K.V. Khishchenko, I.V. Lomonosov. AIP Conf. Proc., **505**, 89 (2000).
[15] I.V. Lomonosov, V.E. Fortov, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov. AIP Conf. Proc., **620**, 111 (2002).
[16] G.I. Kerley. *Equations of State for Be, Ni, W, and Au. Report SAND2003-3784* (Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 2003)
[17] K.V. Khishchenko. *34th European Physical Society Conference on Plasma Physics, July 2–6, 2007, Warsaw, Poland*. Europhysics Conference Abstracts, **31F**, P-2.121 (2007)
[18] А.Б. Медведев, Р.Ф. Трунин. УФН, **182**, 829 (2012). [A.B. Medvedev, R.F. Trunin. Phys. Usp., **55**, 773 (2012).]
[19] I.V. Lomonosov, V.K. Gryaznov. Contrib. Plasma Phys., **56** (3–4), 302 (2016).
[20] C.J. Prisbrey, P. Söderlind, C.J. Wu. AIP Conf. Proc., **3066**, 500012 (2024.)
[21] Р.К. Бельхеева. ТВТ, **59** (4), 514 (2021). [R.K. Belkheeva. High Temp., **60** (1), 26 (2022). DOI: 10.1134/S0018151X21040040]
[22] Р.К. Бельхеева. ЖТФ, **95** (7), 1303 (2025). DOI: 10.61011/JTF.2025.07.60652.54-25
[23] Y. Mishin, D. Farkas, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos. Phys. Rev. B, **59** (5), 3393 (1999).
[24] J. Choi, S. Yoo, S. Song, J.S. Park, K. Kang. J. Mech. Sci. Technol., **32** (7), 3273 (2018).
[25] Д.К. Белащенко. ТВТ, **58** (1), 61 (2020). DOI: 10.31857/S0040364420010032 [D.K. Belashchenko. High Temp., **58** (1), 64 (2020). DOI: 10.1134/S0018151X20010034]
[26] N.A. Smirnov. J. Appl. Phys., **134** (2), 025901 (2023).

[27] В.К. Копышев, А.Б. Медведев. *Обзор принципиальных идей моделей уравнений состояния во ВНИИЭФ.* В сб. *Высокие плотности энергии* (РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, 1997), с. 271–283.
[28] Д.Н. Николаев, А.А. Пяллинг, К.В. Хищенко, В.Я. Терновой, В.Е. Фортов. Хим. физика, **19** (10), 98 (2000).
[29] Р.Ф. Трунин. *Исследования экстремальных состояний конденсированных веществ методом ударных волн. Уравнения Гюгонио* (РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, 2006)
[30] M.E. Povarnitsyn, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov. Int. J. Impact Eng., **33** (1–12), 625 (2006).
[31] Р.К. Бельхеева. ПМТФ, **53** (4), 3 (2012).
[32] Р.К. Бельхеева. ПМТФ, **48** (5), 53 (2007).
[33] Л.П. Орленко. *Физика взрыва и удара* (Физматлит, М., 2008)
[34] Р.К. Бельхеева. ТВТ, **53** (3), 367 (2015). DOI: 10.7868/S0040364415020052 [R.K. Belkheeva. High Temp., **53** (3), 348 (2015). DOI: 10.1134/S0018151X15020054]
[35] С.А. Кинеловский, К.К. Маевский. Вестник НГУ. Серия: Физика, **4** (4), 71 (2009).
[36] С.Д. Гилев. ФГВ, **54** (4), 107 (2018).
[37] А.Ю. Семенов, С.А. Абросимов, И.А. Стучебрюхов, К.В. Хищенко. ТВТ, **61** (4), 542 (2023).
[38] К.В. Хищенко. ТВТ, **35** (6), 1002 (1997).
[39] K.V. Khishchenko. J. Phys.: Conf. Ser., **121**, 022025 (2008).
[40] K.V. Khishchenko. J. Phys.: Conf. Ser., **653**, 012081 (2015).
[41] T.V. Popova, A.E. Mayer, K.V. Khishchenko. J. Appl. Phys., **123**, 235902 (2018).
[42] Н.Н. Середкин, К.В. Хищенко. ТВТ, **62** (4), 513 (2024). DOI: 10.31857/S0040364424040052
[43] Р.И. Нигматулин. *Основы механики гетерогенных сред* (Наука, М., 1978)
[44] Г.М. Ляхов. *Основы динамики взрывных волн в грунтах и горных породах* (Недра, М., 1974)
[45] С.З. Дунин, В.В. Сурков. ПМТФ, **5**, 106 (1979).
[46] Р.К. Бельхеева. ТВТ, **61** (5), 693 (2023). DOI: 10.31857/S0040364423050022
[47] С.А. Кинеловский, К.К. Маевский. ТВТ, **54** (5), 716 (2016). DOI: 10.7868/S0040364416050161 [S.A. Kinelovskii, K.K. Maevskii. High Temp., **54** (5), 675 (2016). DOI: 10.1134/S0018151X16050163]
[48] К.К. Маевский, С.А. Кинеловский. ТВТ, **56** (6), 876 (2018). DOI: 10.31857/S004036440003564-4 [S.A. Kinelovskii, K.K. Maevskii. High Temp., **56** (6), 853 (2018). DOI: 10.1134/S0018151X18060172]
[49] К.К. Маевский. ЖТФ, **91** (5), 815 (2021). DOI: 10.21883/JTF.2021.05.50694.293-20 [K.K. Maevskii. Tech. Phys., **66** (5), 749 (2021). DOI: 10.1134/S1063784221050145]
[50] Р.Ф. Трунин, Г.В. Симаков, Ю.Н. Сутулов, А.Б. Медведев, Б.Д. Рогозкин, Ю.В. Федоров. ЖЭТФ, **96** (3), 1024 (1989).
[51] С.Б. Кормер, А.И. Фунтиков, В.Д. Урлин, А.Н. Колесникова. ЖЭТФ, **42** (3), 686 (1962).
[52] J.M. Walsh, M.H. Rice, R.G. McQueen, F.L. Yarger. Phys. Rev., **108**, 196 (1957).
[53] R.G. McQueen, S.P. Marsh. J. Appl. Phys., **31**, 1253 (1960).
[54] Л.В. Альтшулер, А.А. Баканова, Р.Ф. Трунин. ЖЭТФ, **42** (1), 717 (1962).
[55] W.H. Isbell, F.H. Shipman, A.H. Jones. *Laboratory Report MSL Material Science 68-13* (General Motors Tech. Center, Warren, MI, 1968)
[56] S.P. Marsh (editor). *LASL Shock Hugoniot Data* (University of California Press, Berkeley, CA, 1980)
[57] Л.В. Альтшулер, А.А. Баканова, И.П. Дудоладов, Е.А. Дынин, Р.Ф. Трунин, Б.С. Чекин. ПМТФ, (2), 3 (1981).
[58] Р.Ф. Трунин, Г.В. Симаков. ЖЭТФ, **103** (6), 2180 (1993).
[59] В.К. Грязнов, М.В. Жерноклетов, И.Л. Иосилевский, Г.В. Симаков, Р.Ф. Трунин, Л.И. Трусов, В.Е. Фортов. ЖЭТФ, **114** (4), 1242 (1998).
[60] Д.К. Белащенко. ТВТ, **58** (1), 61 (2020). DOI: 10.31857/S0040364420010032 [D.K. Belashchenko. High Temp., **58** (1), 64 (2020). DOI: 10.1134/S0018151X20010034]
[61] I.V. Lomonosov. Laser Part. Beams, **25** (4), 567 (2007). DOI: 10.7868/S0040364417040111
[62] Л.Ф. Гударенко, О.Н. Гущина, М.В. Жерноклетов, А.Б. Медведев, Г.В. Симаков. ТВТ, **38** (3), 437 (2000).
[63] Д.К. Белащенко. ЖФХ, **94** (10), 1450 (2020). DOI: 10.31857/S0044453720100064
[64] P.R. Levashov, V.E. Fortov, K.V. Khishchenko, I.N. Lomov, I.V. Lomonosov. AIP Conf. Proc. **429**, 47 (1998).
[65] P.R. Levashov, K.V. Khishchenko, I.V. Lomonosov, V.E. Fortov. AIP Conf. Proc., **706**, 87 (2004).
[66] D.K. Belashchenko. *Liquid Metals. From Atomistic Potentials to the Properties, Shock Compression, Earth's Core and Nanoclusters* (Nova Science Publishers, Hauppauge, NY., 2018)
[67] В.В. Якушев, С.Ю. Ананьев, А.В. Уткин, А.Н. Жуков, А.Ю. Долгобородов. ФГВ, **54** (5), 45 (2018). DOI: 10.15372/FGV20180506
[68] В.В. Якушев, С.Ю. Ананьев, А.В. Уткин, А.Н. Жуков, А.Ю. Долгобородов. ФГВ, **55** (6), 108 (2019). DOI: 10.15372/FGV20190615