



# **Определение параметров уравнения состояния конденсированного бора: Интеграция с программным инструментом Cantera**

**Подготовил: Сетаблаев Ф.С.**

**Научный руководитель: Маклашова  
И.В.**

2025год

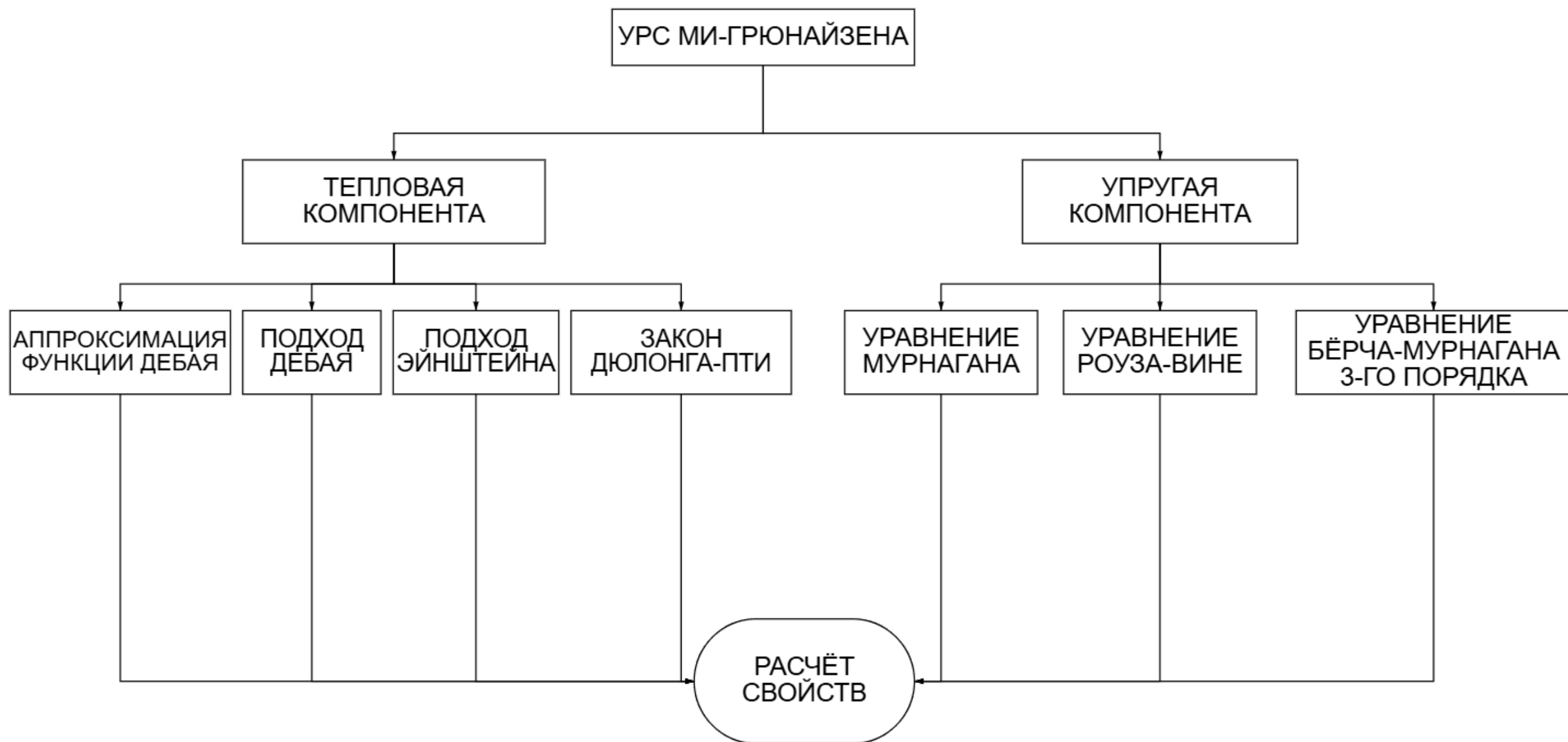


# ПОСТАВНОВКА ЗАДАЧИ

- Подобрать параметры уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для конденсированного бора в широкой области изменения давления и температуры вплоть до высоких давлений (1-60 ГПа)

$$P(V, T) = P_{\Pi}(V) + \frac{\gamma}{V} E_T(V, T)$$

- Обзор экспериментальных значения модуля упругости  $B_0$  и его производной по давлению  $B'$  из литературы
- Подобрать упругую компоненту
- Подобрать тепловую компоненту
- Верифицировать параметры УРС , в том числе в области экстремальных состояний вещества на ударной адиабате
- Обзор возможностей П.О. Cantera
- Расчёт термодинамических свойств конденсированного бора
- Расчёт коэффициентов расширения конденсированного бора



## Модели для упругой компоненты

### 1. Уравнение Мурнагана

$$P_{\Pi}(Z) = \frac{B_0}{B'} (Z^{B'} - 1)$$

### 2. Уравнение Берча-Мурнагана 3-го порядка

$$P_{\Pi}(Z) = \frac{3}{2}B_0(Z^{7/3} - Z^{5/3})(1 - \frac{3}{4}(B' - 4)(Z^{2/3} - 1))$$

### 3. Уравнение Роуза-Вине

$$P_{\Pi}(Z) = 3B_0 \left(\frac{1-\eta}{\eta^2}\right) e^{\frac{3}{2}(B'-1)(1-\eta)}$$

где  $\eta = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{1}{3}} = Z^{-\frac{1}{3}}$

## Модели для тепловой компоненты

### 1. Модель Дебая

$$U = 9RT \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{\frac{T_D}{T}} \frac{x^3 dx}{\exp(x)-1}$$

### 2. Модель Эйнштейна

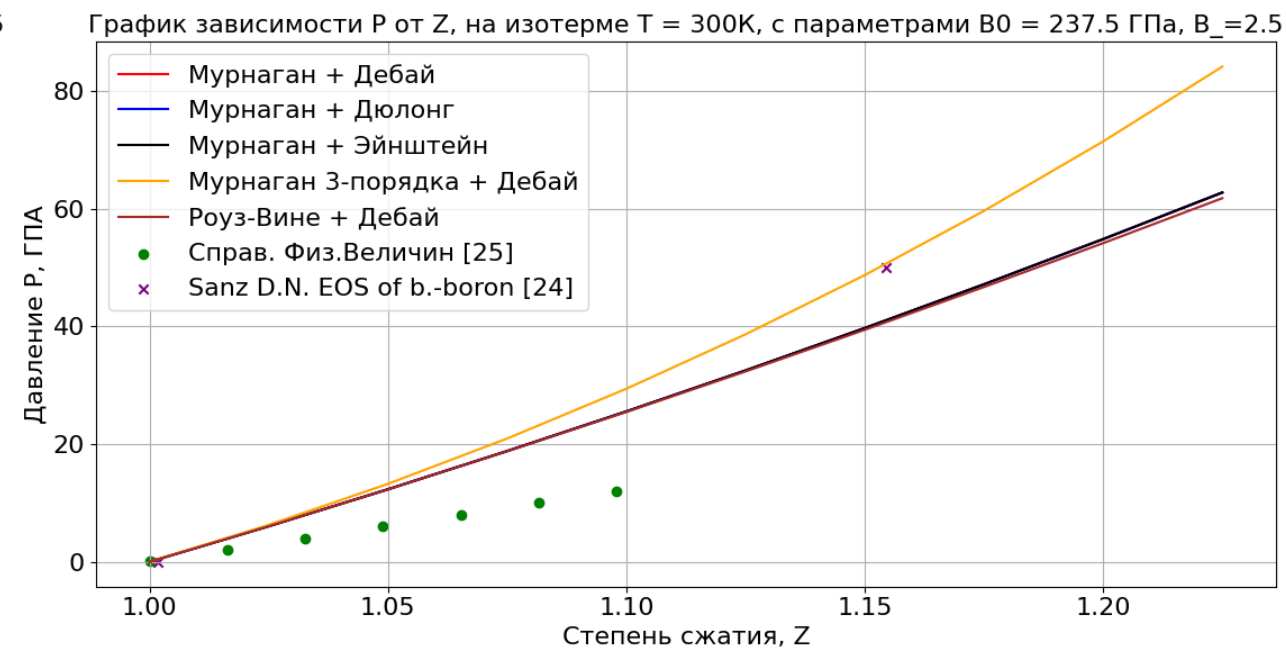
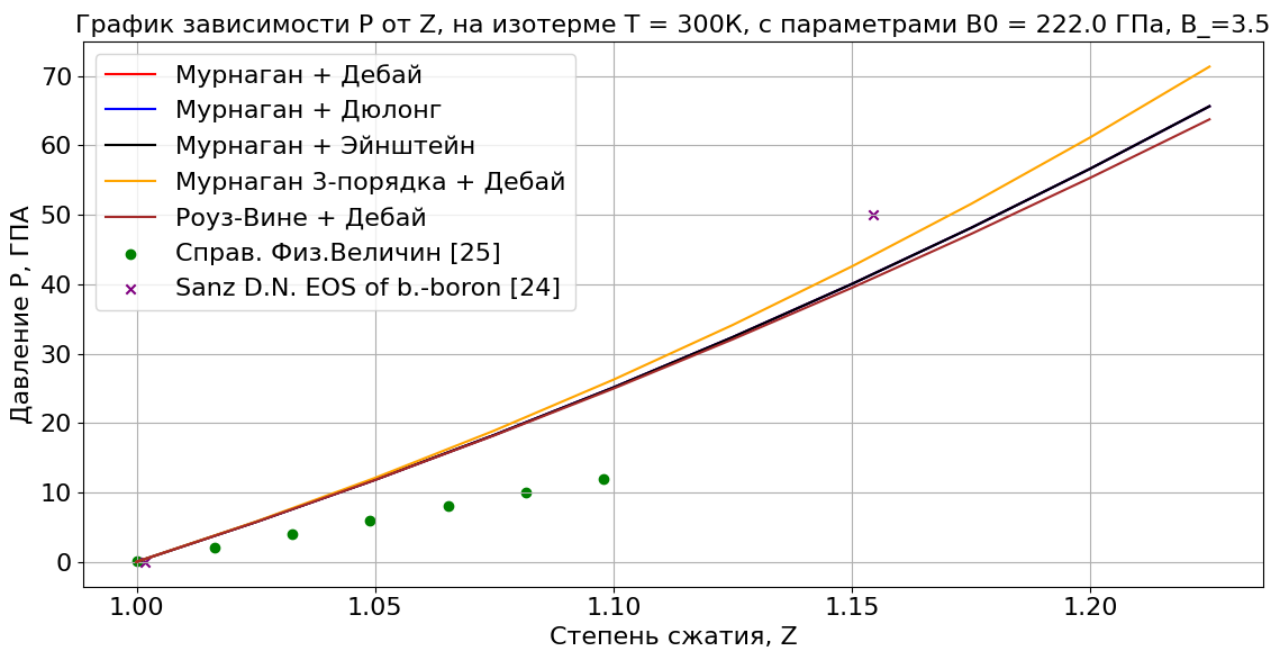
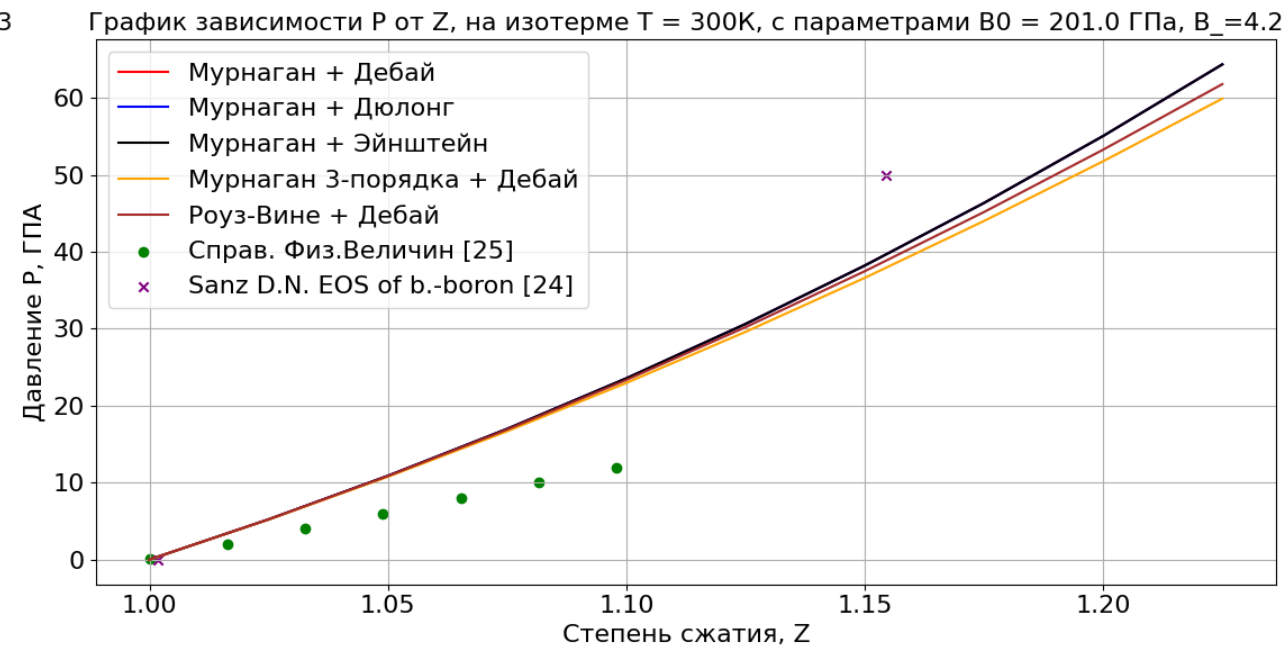
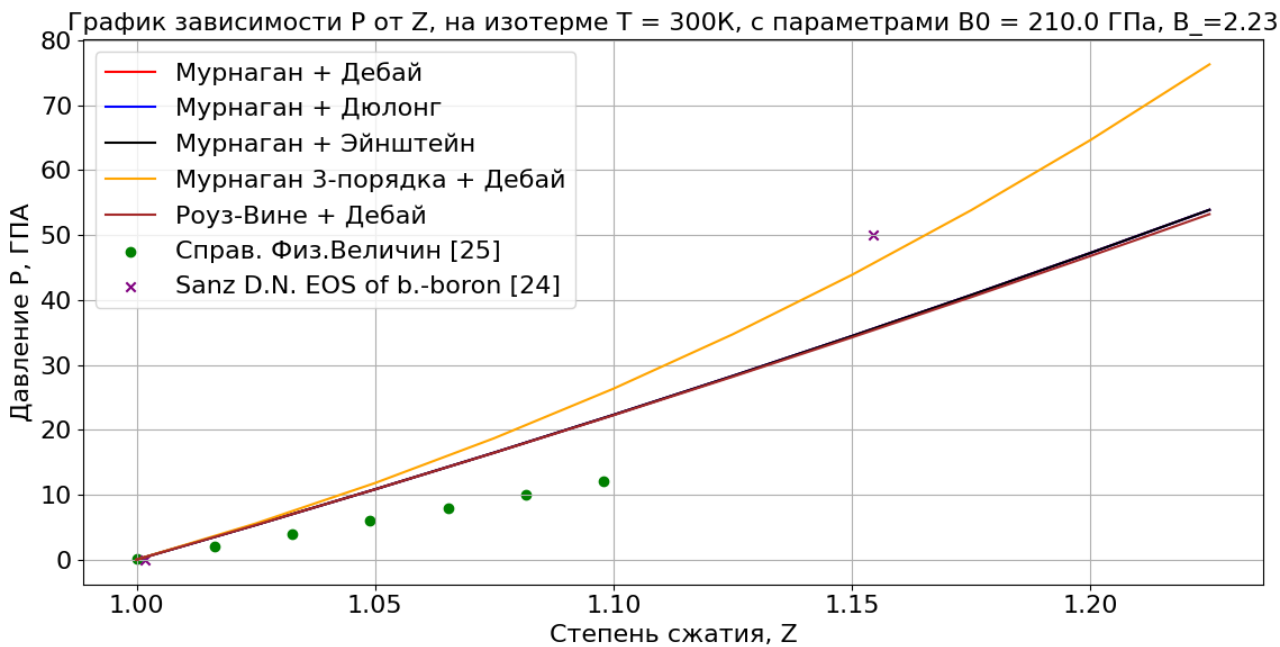
$$C_V = 24.93 \cdot \left(\frac{1250}{T}\right)^2 \frac{\exp(1250/T)}{(\exp(1250/T) - 1)^2}$$

### 3. Аппроксимация функции Дебая

$$C_V = \left(1 - \frac{e^{-\frac{T-199.90}{99.82}}}{5}\right)$$

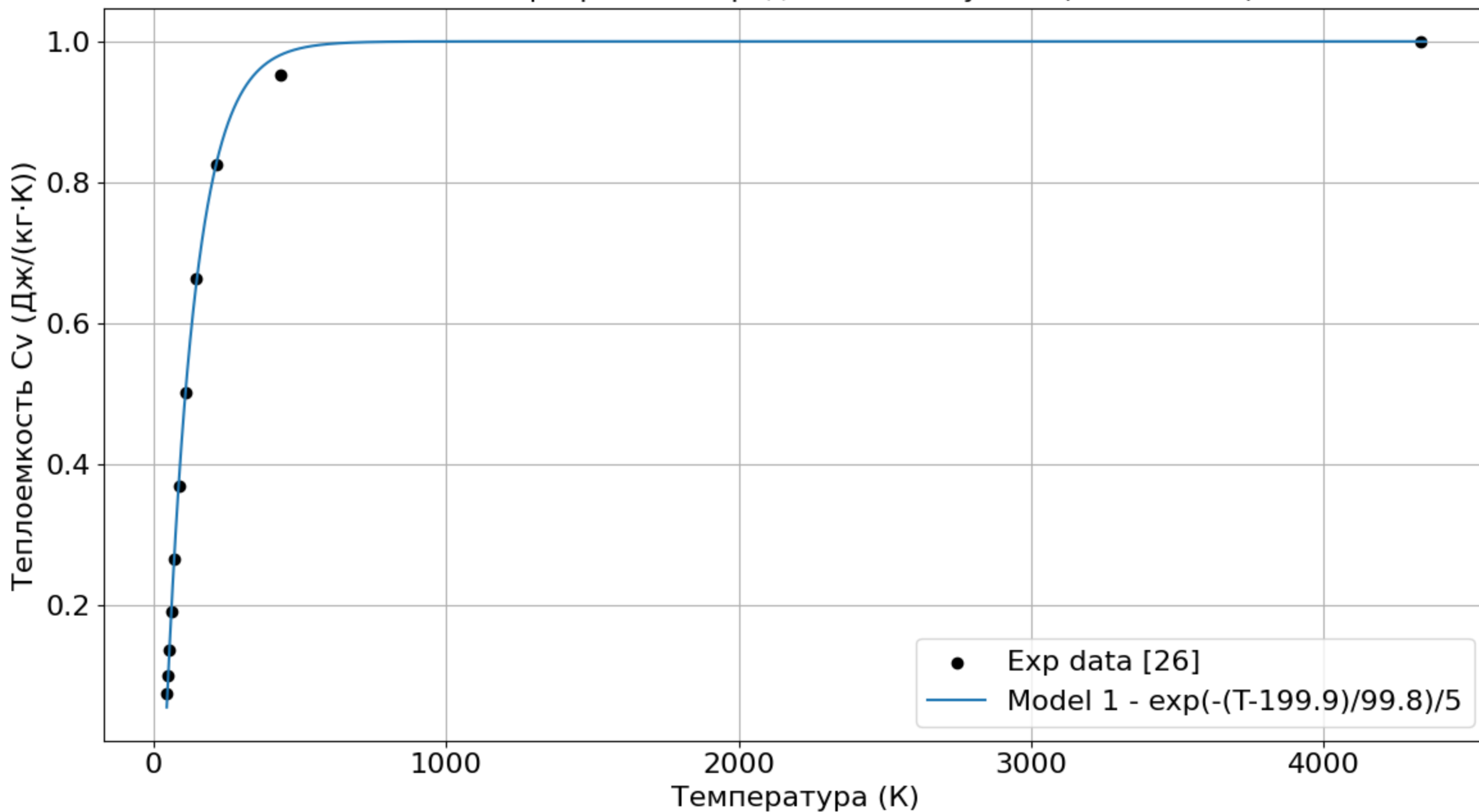
### 4. Закон Дюлонга-Пти

$$C_V = 3Rn$$



# Теплоёмкости

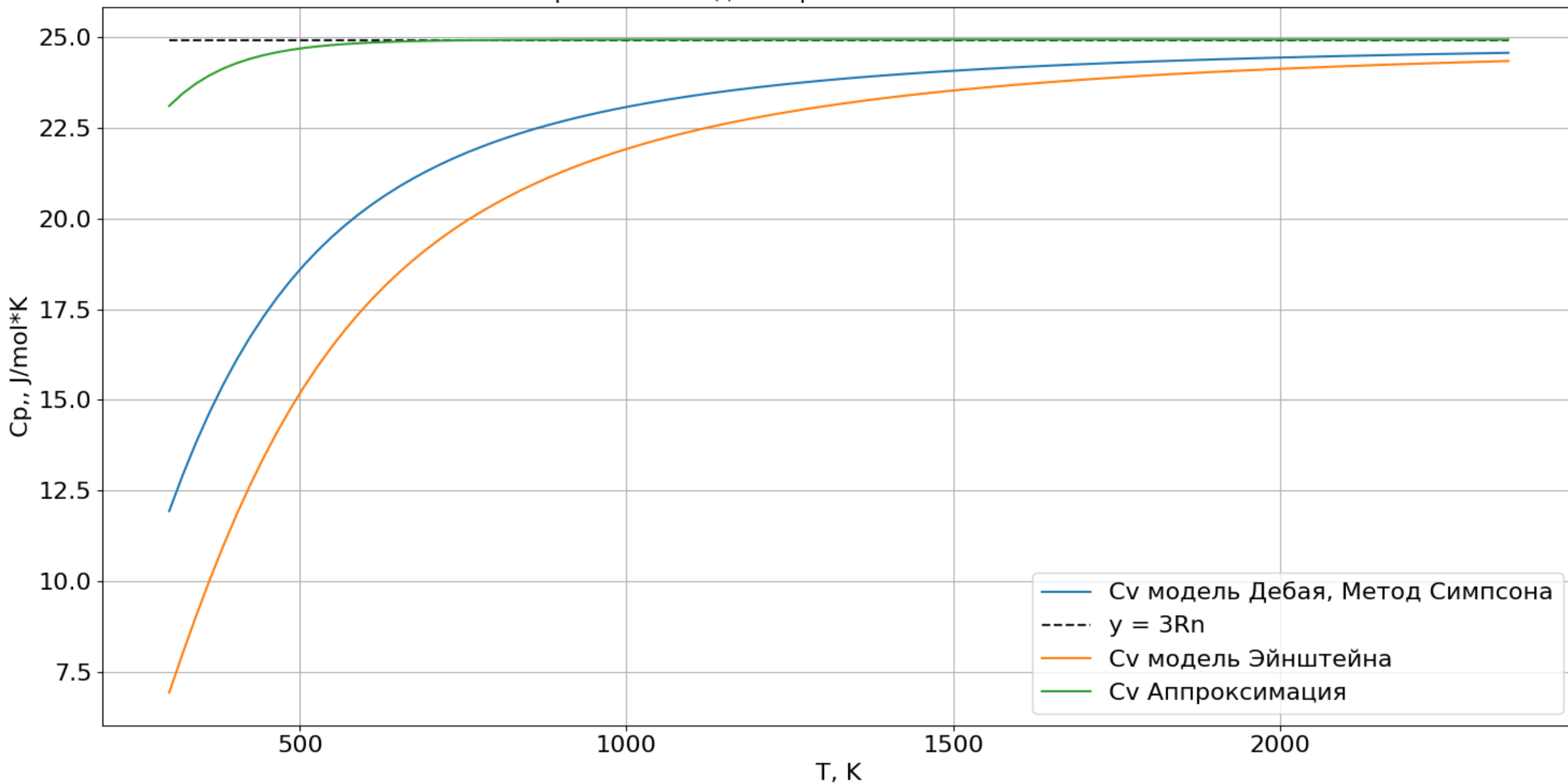
Нелинейная регрессия с градиентным спуском ( $R^2 = 0.9975$ )

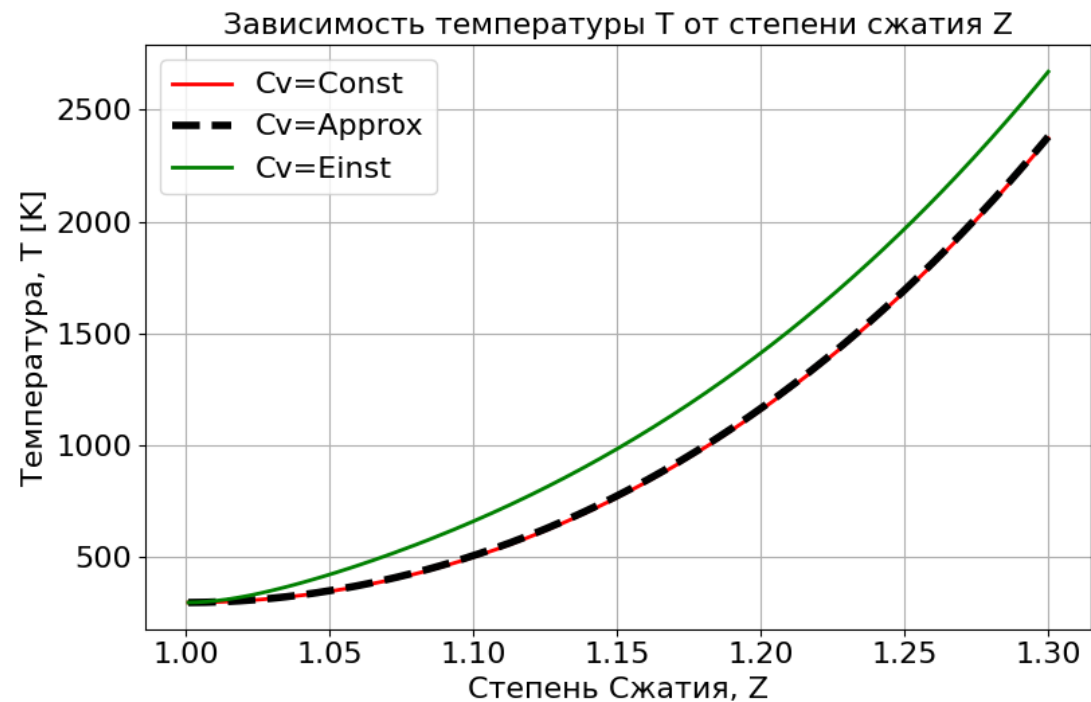
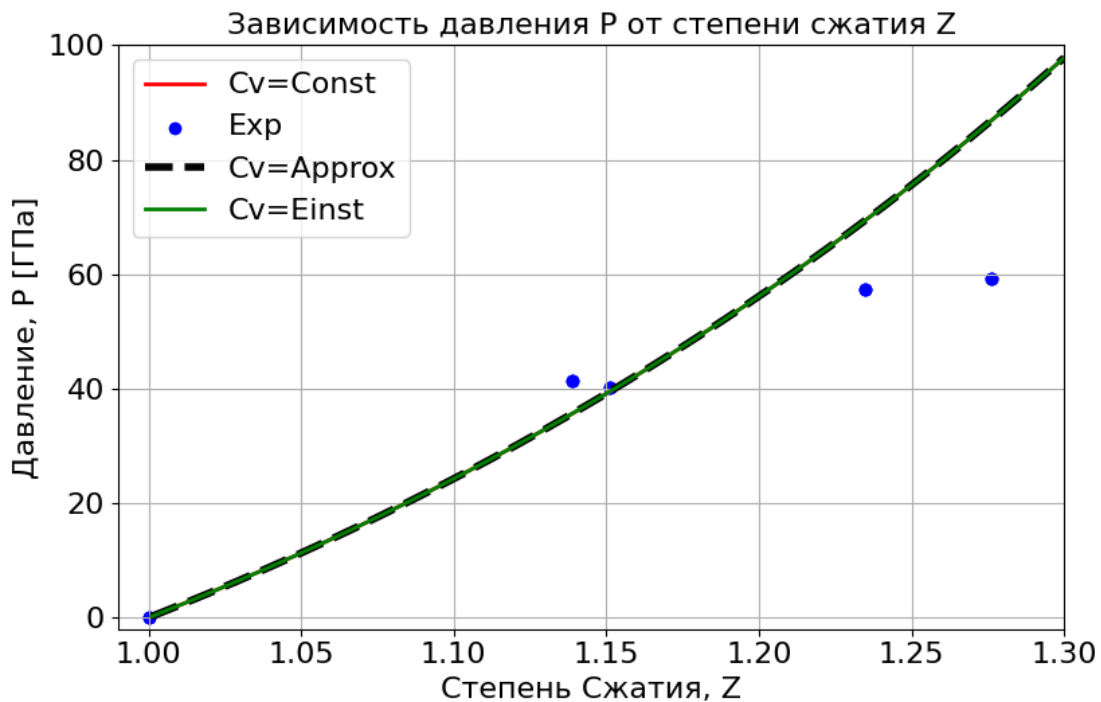


# Теплоёмкости

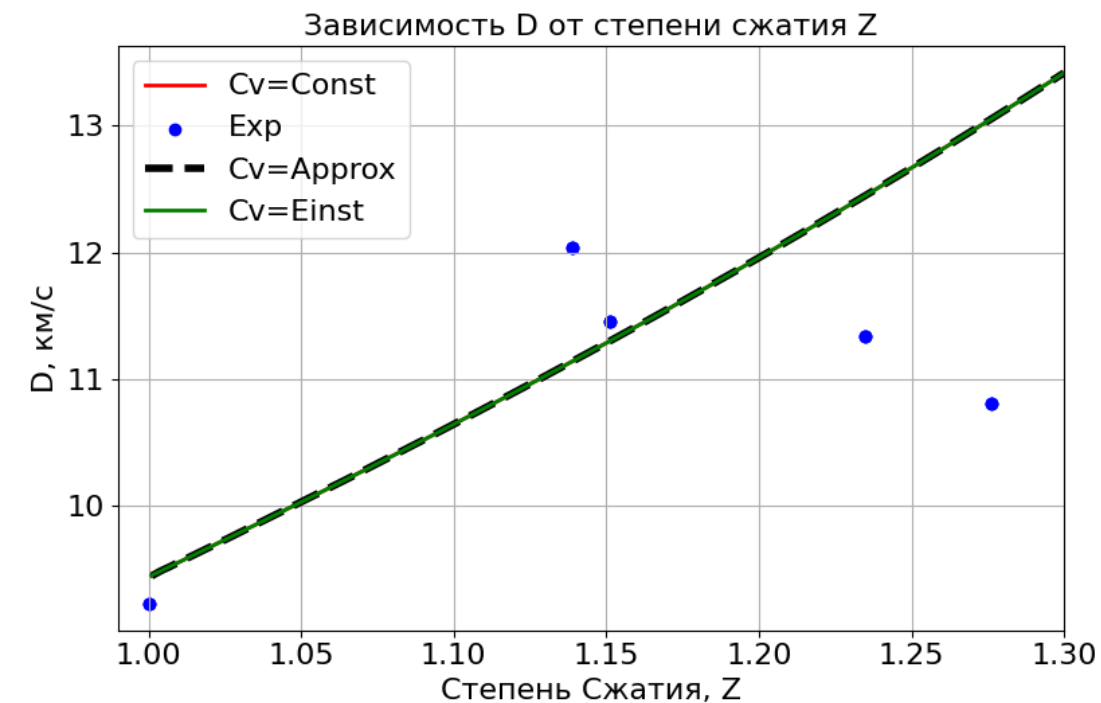
А

Сравнение моделей расчёта теплоёмкостей  $C_v$



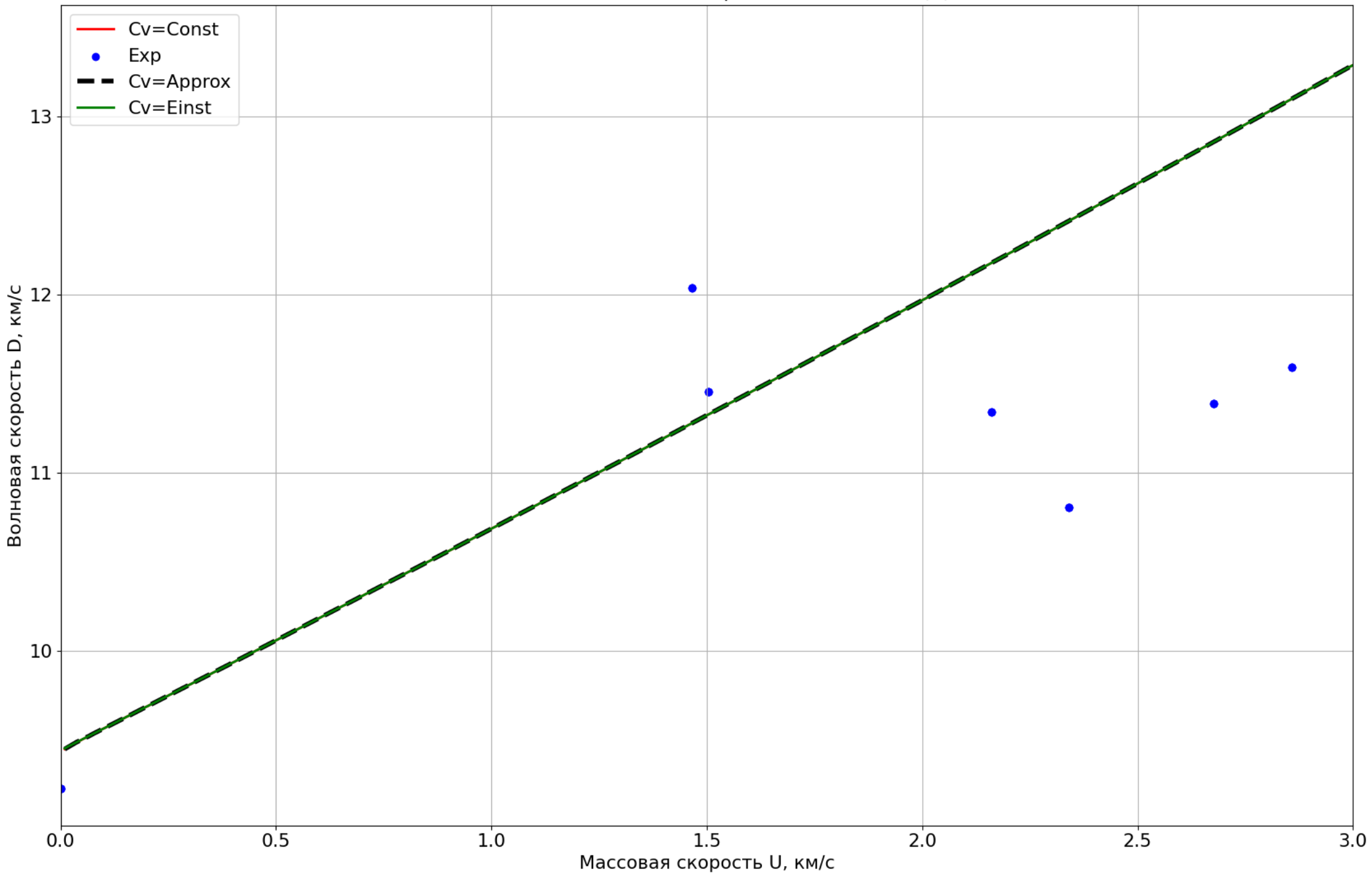


Exp.  
Marsh (Ed.),  
LASL Shock  
Hugoniot Data,  
(Univ. California  
Press, Berkeley,  
1980).





Зависимость Волновой скорости от массовой D(U)



• Exp.  
Marsh (Ed.),  
LASL Shock  
Hugoniot Data,  
(Univ. California  
Press, Berkeley,  
1980).

Оптимальным выбором для упругой компоненты является уравнение Роуза-Вине, а для тепловой компоненты, т.е. для расчёта теплоёмкости можно использовать модель Эйнштейна. Тогда общий вид полученного уравнения:

$$P(V; T) = 3B_0 \left( \frac{1-\eta}{\eta^2} \right) e^{\frac{3}{2}(B'-1)(1-\eta)} + \frac{\gamma}{V} \int_{T_0}^T 24.93 \cdot \left( \frac{1250}{T} \right)^2 \frac{\exp(1250/T)}{(\exp(1250/T) - 1)^2} dT.$$

$$\text{где } \eta = \left( \frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} = z^{-\frac{1}{3}}$$

Оптимальным выбором параметров является  $B_0 = 210$  ГПа,  $B' = 2.23$

# Интеграция с программным инструментом Cantera

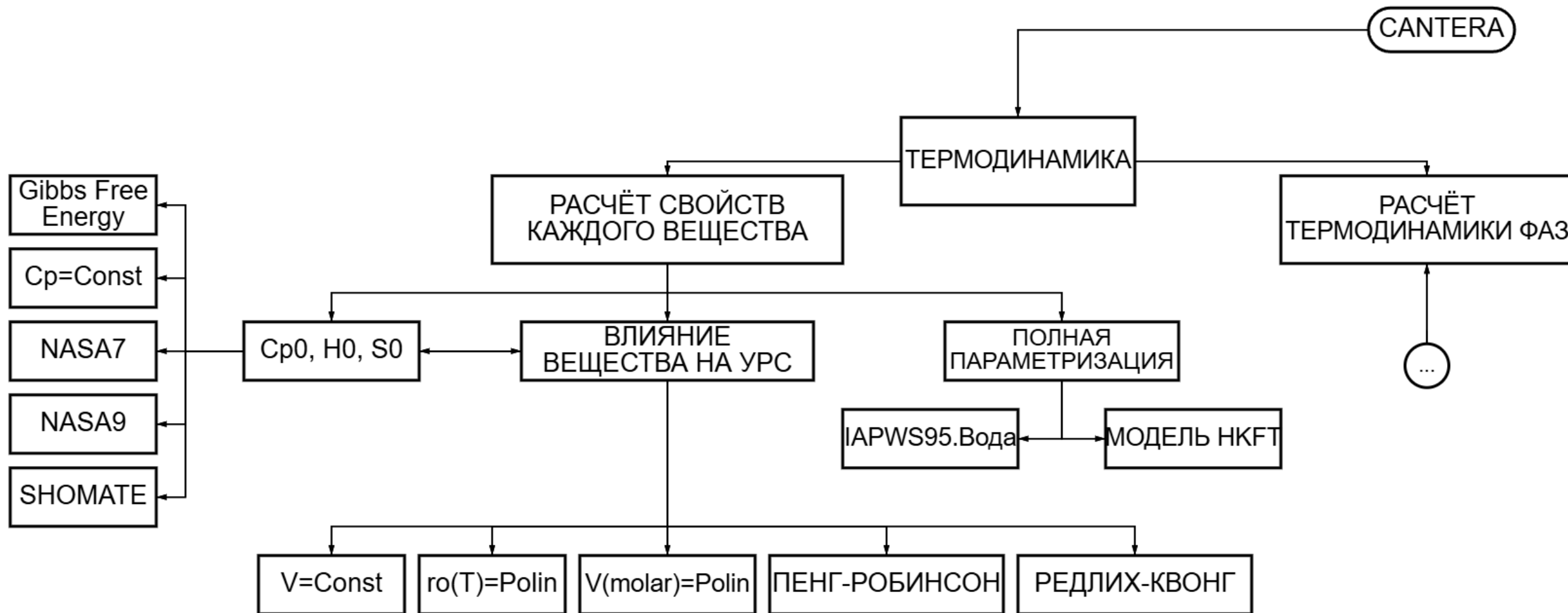


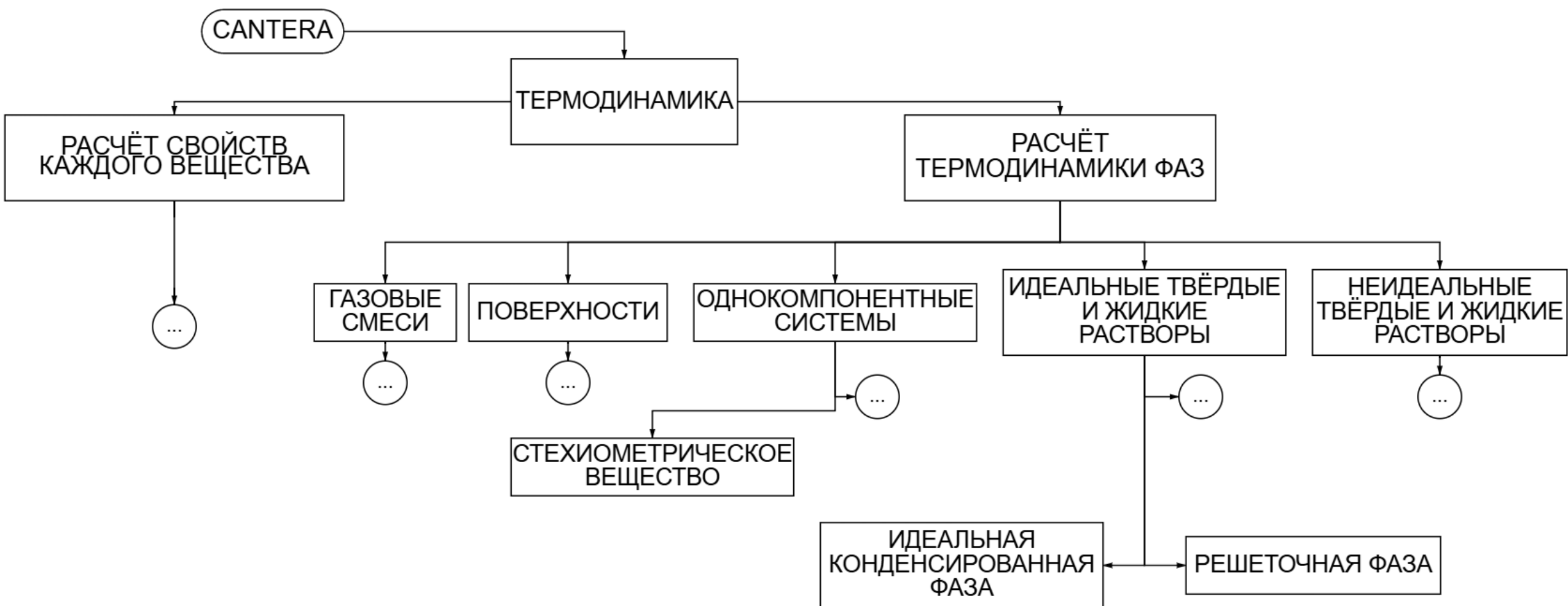
# Cantera

Cantera - это программное обеспечение с открытым исходным кодом для решения задач, связанных с химической кинетикой, термодинамикой и транспортными процессами.

На данный момент стабильной версией является Cantera 3.1.0, в данной версии реализован функционал для:

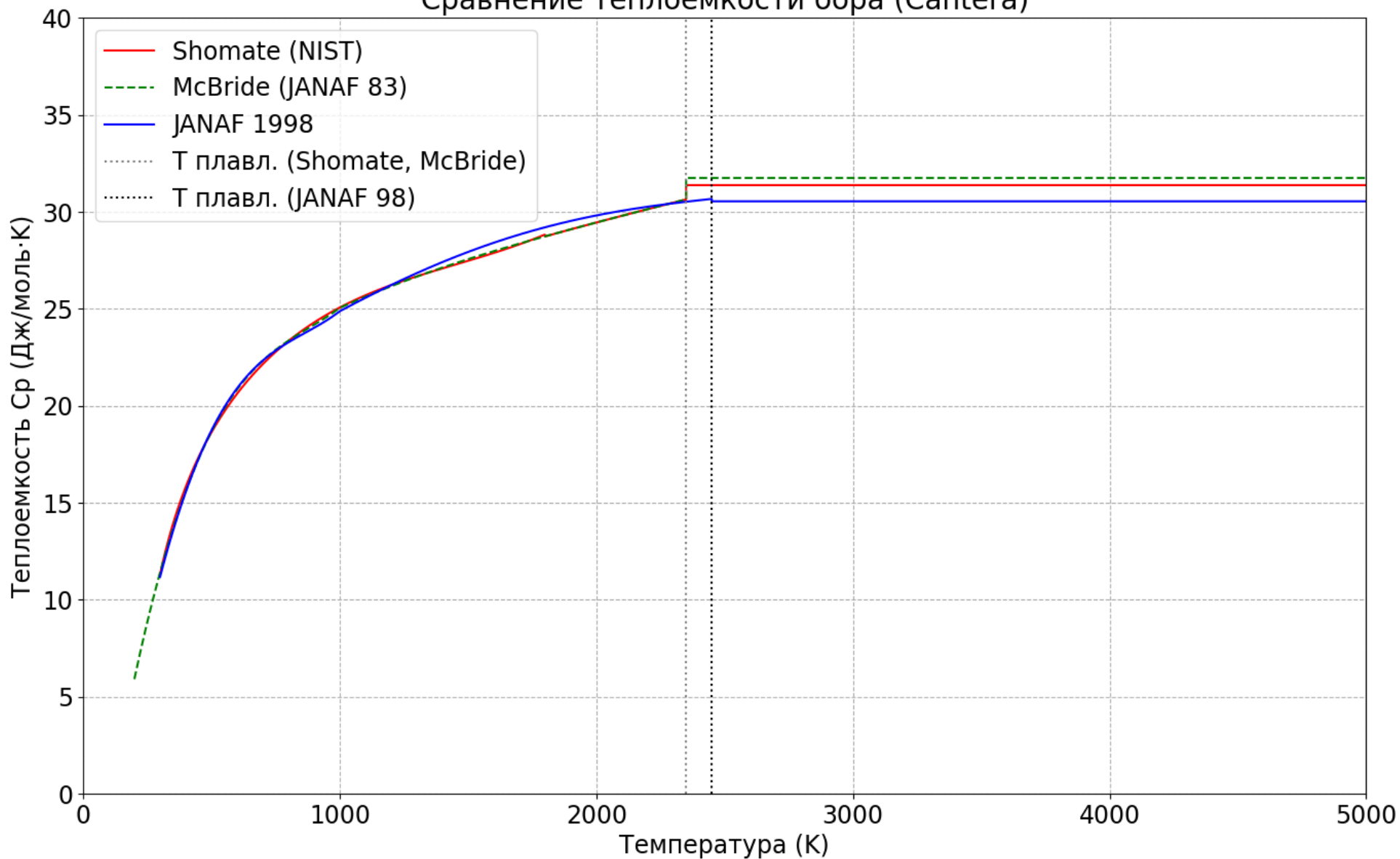
- Термодинамики
- Химических реакций
- Транспортных свойств
- Одномерного пламени
- Реакторов





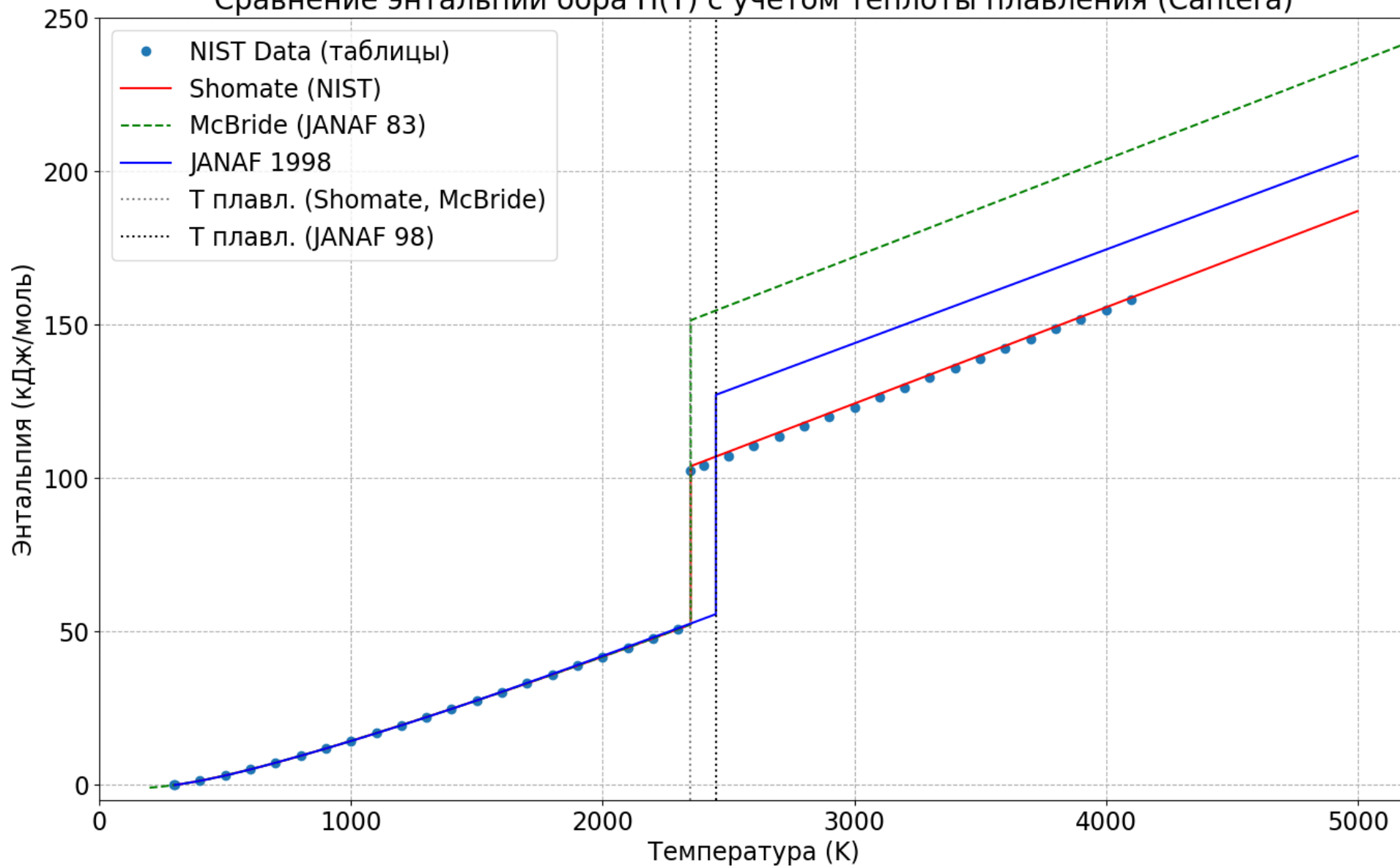
# РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТА CANTERA

Сравнение теплоемкости бора (Cantera)



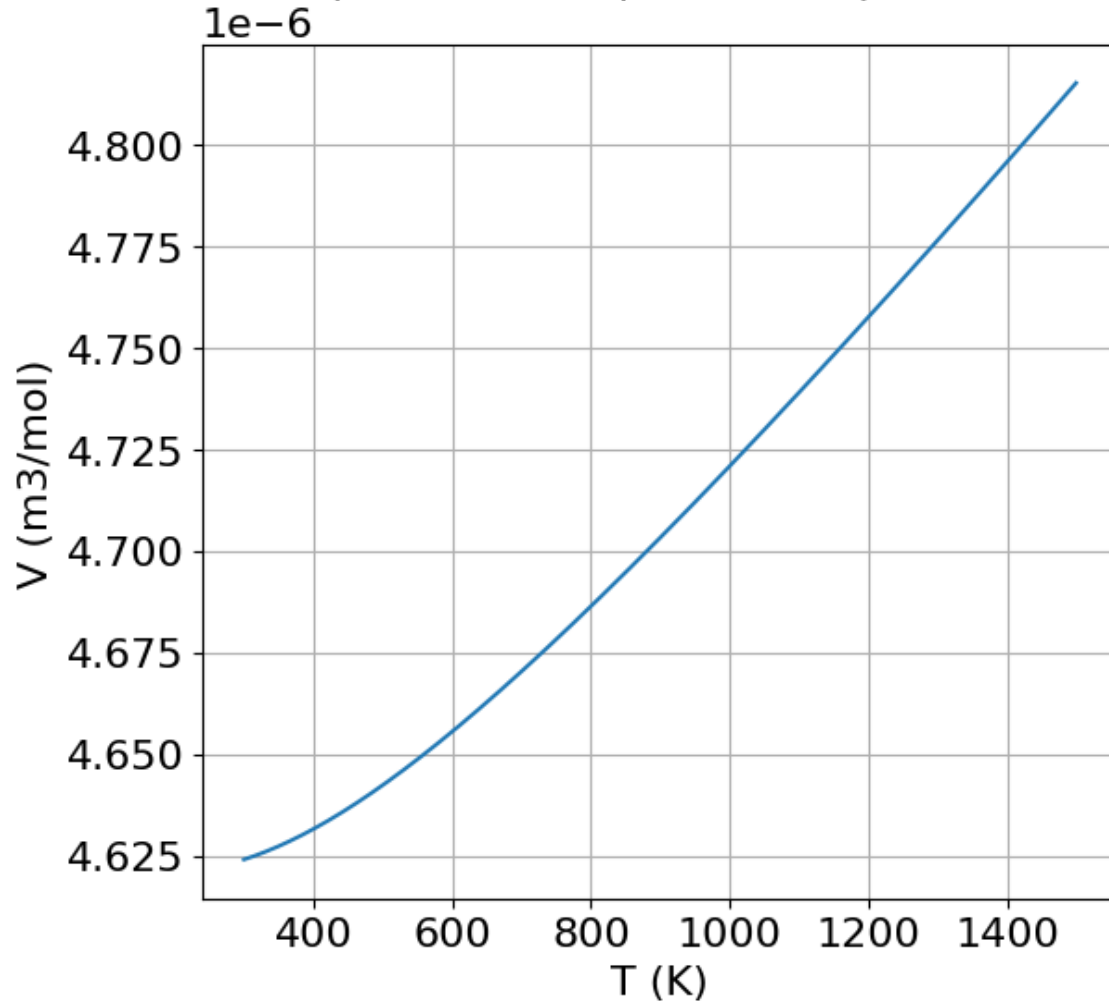
# РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТА CANTERA

Сравнение энтальпии бора  $H(T)$  с учетом теплоты плавления (Cantera)



# ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ ОБЪЁМА

Численный расчёт изобарической кривой  $V(T)$  по УРС



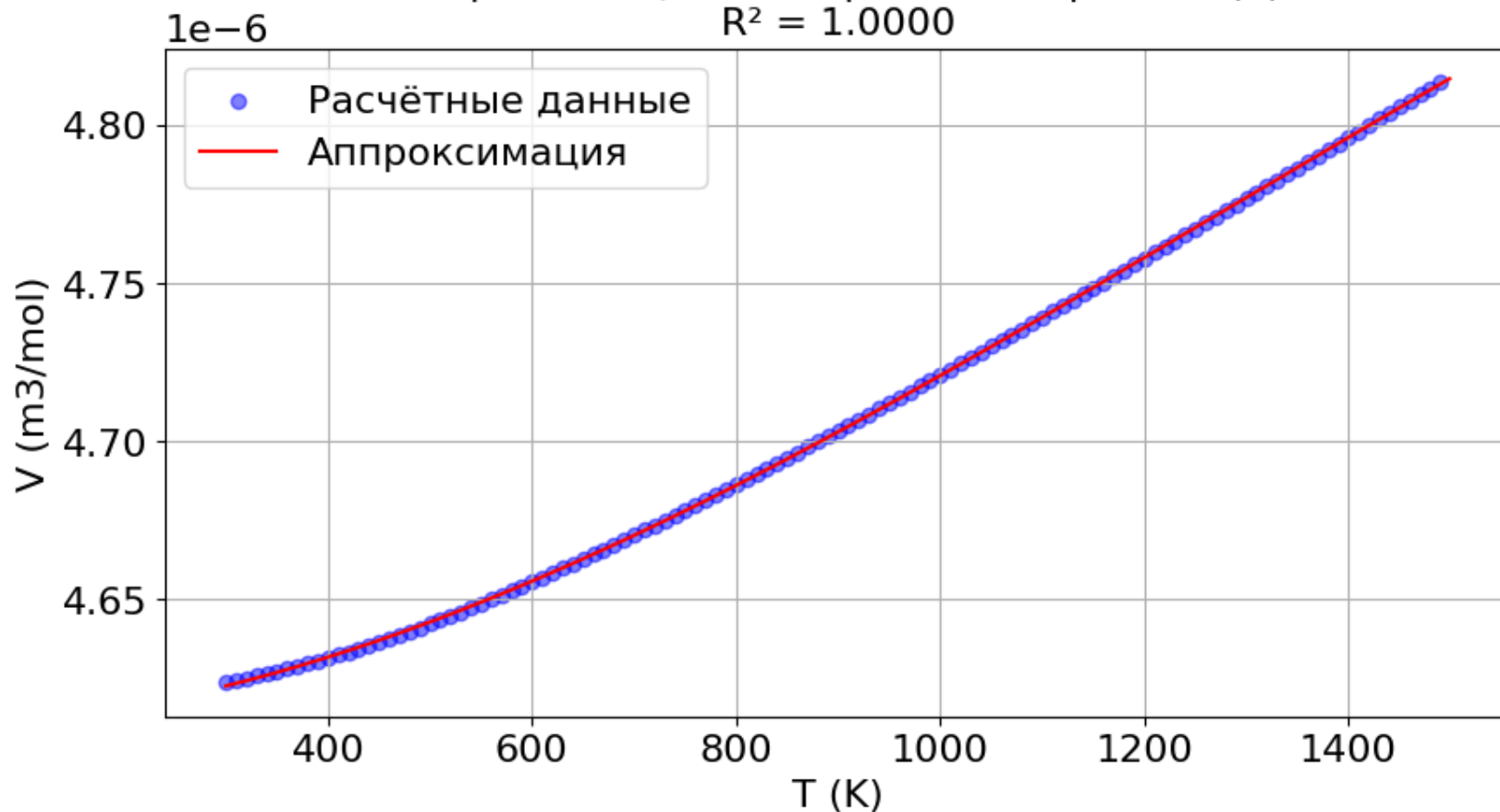
$$P(V; T) = 3B_0 \left( \frac{1-\eta}{\eta^2} \right) e^{\frac{3}{2}(B'-1)(1-\eta)} + \frac{Y}{V} \int_{T_0}^T 24.93 \cdot \left( \frac{1250}{T} \right)^2 \frac{\exp(1250/T)}{(\exp(1250/T) - 1)^2} dT$$



# ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ ОБЪЁМА

Аппроксимация изобарической кривой  $V(T)$

$R^2 = 1.0000$



$$V_m(T) = c_0 + c_1(T - T_0) + c_2(T - T_0)^2 + c_3(T - T_0)^3$$

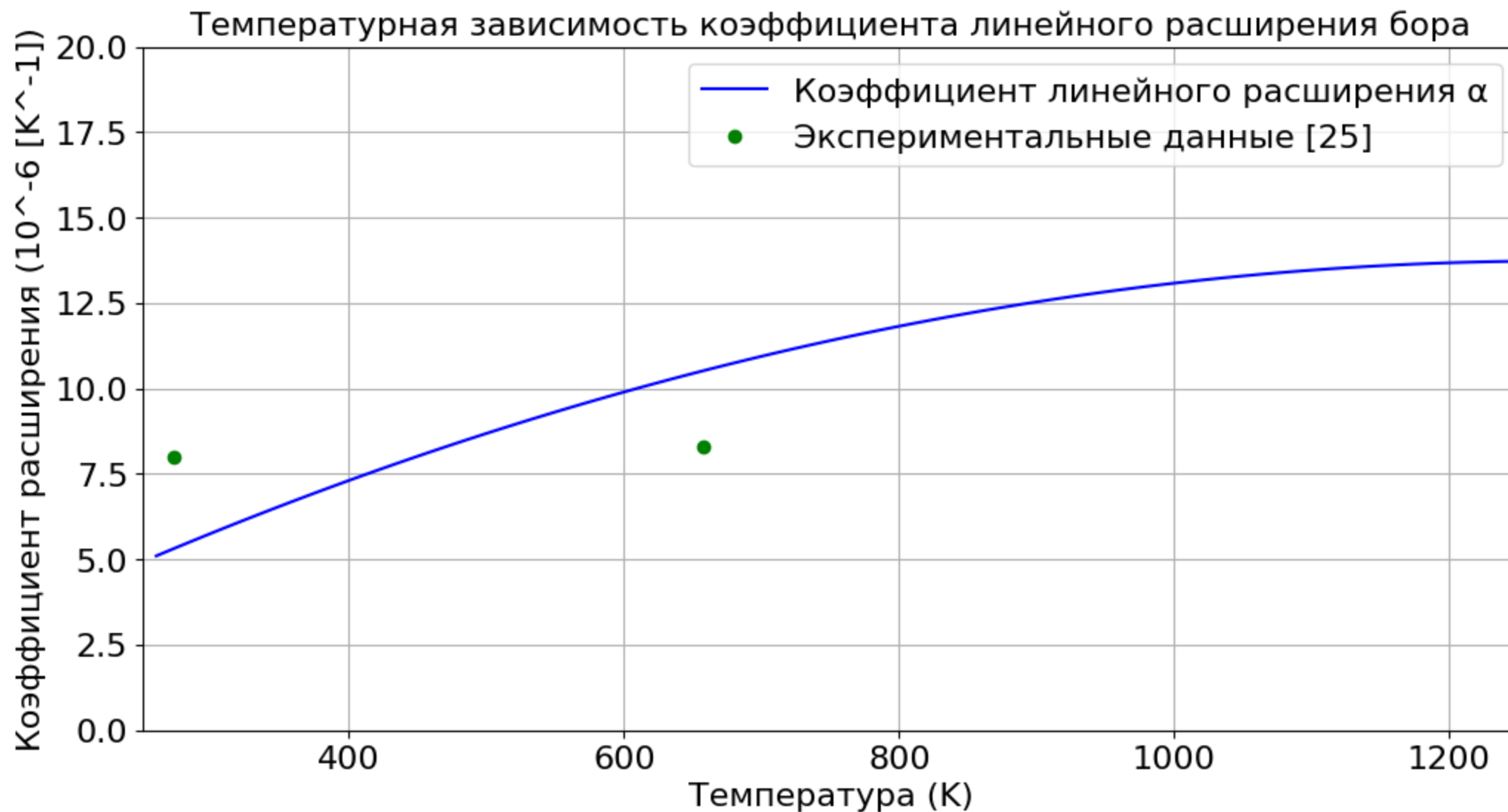
$$c_0 = 4.623 * 10^{-6} \frac{\text{м}^3}{\text{моль}}$$

$$c_1 = 7.998 * 10^{-11} \frac{\text{м}^3}{\text{моль} \cdot \text{K}}$$

$$c_2 = 1.128 * 10^{-13} \frac{\text{м}^3}{\text{моль} \cdot \text{K}^2}$$

$$c_3 = -3.838 * 10^{-17} \frac{\text{м}^3}{\text{моль} \cdot \text{K}^3}$$

# РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТА CANTERA



# РЕЗУЛЬТАТЫ

- Был проведён обзор функционала Cantera 3.1.0
- С помощью программного пакета Cantera были рассчитаны термодинамические свойства бора, а так же коэффициенты расширения:

КОЭФФИЦИЕНТ ЛИНЕЙНОГО РАСШИРЕНИЯ $\alpha * 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T = 273	T = 658
РАСЧЁТ CANTERA	5.10	10.56
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ	8.00	8.3

- Выбран общий вид уравнения состояния в форме Ми-Грюнайзена для конденсированного бора в широкой области изменения давления и температуры вплоть до высоких давлений (1-60 ГПа)

$$P(V; T) = 3B_0 \left( \frac{1-\eta}{\eta^2} \right) e^{\frac{3}{2}(B'-1)(1-\eta)} + \frac{\gamma}{V} \int_{T_0}^T 24.93 \cdot \left( \frac{1250}{T} \right)^2 \frac{\exp(1250/T)}{(\exp(1250/T) - 1)^2} dT$$

- Подобраны коэффициенты модуля всестороннего сжатия и его производная по давлению, упругая и тепловые компоненты уравнения состояния.
- Оптимальным выбором параметров является  $B_0 = 210$  ГПа,  $B' = 2.23$
- Был проведён обзор функционала П.О. Cantera версии 3.1.0, рассчитаны некоторые термодинамические параметры, а так же коэффициенты расширения.

**Спасибо за  
внимание!**



# Ответ на замечания от рецензента

•Phase transformation in boron under shock compression. Shuai Zhanga, Heather D. Whitley, Tadashi Ogitsu

Laboratory for Laser Energetics,  
University of Rochester, Rochester, New  
York 14623. USA. Lawrence Livermore  
National Laboratory, Livermore,  
California 94550, USA. 2020

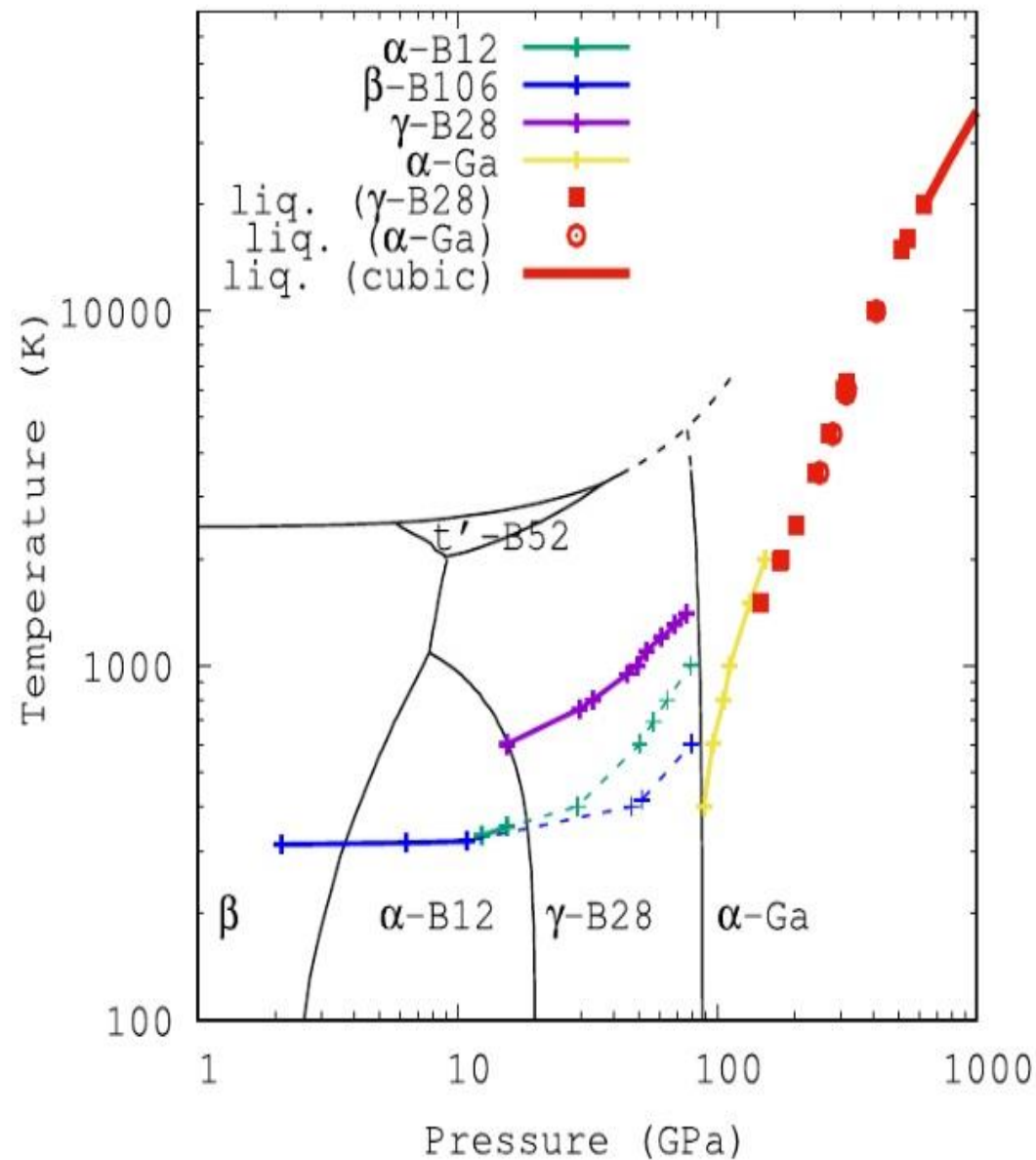


Fig. 2. Hugoniot profiles of various boron phases plotted in the equilibrium phase diagram based on previous literature [13,16]. The dashed colored curves are expected Hugoniot profiles of  $\beta$  and  $\alpha$ -B<sub>12</sub> boron if the sample is shocked to the corresponding pressures but does not transform to other phases. The lines are guides to the eyes.