
ФИЗИКА

Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, № 2. С. 5–10.
Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University. 2026;16(2):5–10.

ФИЗИКА

Научная статья
УДК 539

Температурная зависимость параметра Грюнайзена и оценка энтропии полиэтилена при сильном динамическом сжатии

Зариф Ануарович Ахматов¹, Борис Иналович Кунижев², Зарета Хизировна Гайтукиева³,
Жамал Жабраилович Жабоев⁴

^{1,2,4}Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия

³Ингушский государственный университет, Республика Ингушетия, Магас, Россия

¹ahmatov1993@yandex.ru

²b.kunizhev51@mail.ru

³zareta.amatxanova@mail.ru

⁴akylman_07@mail.ru

Аннотация. В настоящей работе проведена оценка изменения энтропии полиэтилена при сильном динамическом сжатии. Показано, что скачок энтропии полиэтилена на фронте волны при ударно-волновом сжатии пропорционален относительному изменению плотности в степени не ниже трех. Используя метод молекулярной динамики и программный пакет LAMMPS получена температурная зависимость параметра Грюнайзена для полиэтилена. График зависимости показывает рост этого параметра от 3,8 до 4,32 в интервале температур 0–90 °С.

Ключевые слова: энтропия, полиэтилен высокой плотности, динамическое сжатие, МД-моделирование, параметр Грюнайзена, ударная волна

Для цитирования: Ахматов З.А., Кунижев Б.И., Гайтукиева З.Х., Жабоев Ж.Ж. Температурная зависимость параметра Грюнайзена и оценка энтропии полиэтилена при сильном динамическом сжатии // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, № 2. С. 5–10.

PHYSICS

Original article

Temperature dependence of the Gruneisen parameter and estimation of the entropy of polyethylene under strong dynamic compression

Zarif A. Akhmatov¹, Boris I. Kunizhev², Zareta K. Gaitukieva³, Zhamal Z. Zhaboev⁴

^{1,2,4}Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal'chik, Russia

³Ingush State University, Republic of Ingushetia, Magas, Russia

¹ahmatov1993@yandex.ru

²b.kunizhev51@mail.ru

³zareta.amatxanova@mail.ru

⁴akylman_07@mail.ru

Abstract. This study evaluates the entropy change of polyethylene under strong dynamic compression. It is shown that the entropy jump at the shock front during shock-wave compression is proportional to the relative density change raised to a power of at least three. Using the molecular dynamics method and the LAMMPS software package, the temperature dependence of the Gruneisen parameter for polyethylene was obtained. The resulting dependence indicates that the value of this parameter increases from 3.8 to 4.32 over the temperature range of 0–90 °C.

Keywords: Entropy, high-density polyethylene, dynamic compression, molecular dynamics simulation, Gruneisen parameter, shock wave

For citation: Akhmatov Z.A., Kunizhev B.I., Gaitukieva Z.K., Zhaboev Z.Z. Temperature dependence of the Gruneisen parameter and estimation of the entropy of polyethylene under strong dynamic compression. *Proceeding of the Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(2):5–10. (In Russ.).

Разработка конструкций и установок из полимерных материалов, подверженных сильным тепловым и динамическим нагрузкам, требует оценки термодинамических параметров материалов в различных состояниях. Для решения подобных задач применяются полуэмпирические модели уравнений состояния, где форма функциональных связей в форме ударных адиабат (например, зависимость давления от плотности или скорости ударной волны от массовой скорости) определяется на основе теоретических представлений о поведении материалов в экстремальных условиях [1]. Важно подчеркнуть, что на сегодняшний день хорошо разработано моделирование поведения металлов, в том числе тонких металлических фольг, высокоэнтропийных сплавов, ионных кристаллов и др. при высоких давлениях и температурах [2]. Менее исследованными остаются полимеры и полимерные композиты, представляющие собой материалы с уникальными физическими свойствами [3].

Фундаментальные характеристики органических соединений, определяющие их поведение в разных фазах, представлены термодинамическими функциями. Одной из таких важнейших функций является энтропия системы. Кроме того, энтропия и энергия Гиббса используются для определения термодинамических свойств поверхностей [4]. Поэтому расчет этих функций является актуальным и представляет научный и практический интерес.

В данной работе исследован полиэтилен высокой плотности (ПВП), полученный под высоким давлением с плотностью $\rho_0 = 920 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, который широко используется в различных конструкциях, подверженных воздействию мощных тепловых и силовых нагрузок. Также ПВП является одним из наиболее важных коммерческих полимерных продуктов на мировом рынке полимеров благодаря своим большим годовым производственным мощностям и отличному соотношению цены и качества, и широко используется для производства пластмассовых изделий [5], термоэлектрических материалов [6], конструкционных пластмасс [7] и т. д. Значительный интерес ПВП привлек в аэрокосмической и оборонной отрасли. В связи с этим изучение термодинамических свойств полиэтилена при различных температурах и давлениях представляется актуальной и востребованной задачей.

В работах [3, 8] изотермы «холодного сжатия» и ударные адиабаты полиэтилена в экстремальных условиях, рассчитаны по моделям А. Молодца и К. Хищенко (рисунк 1).

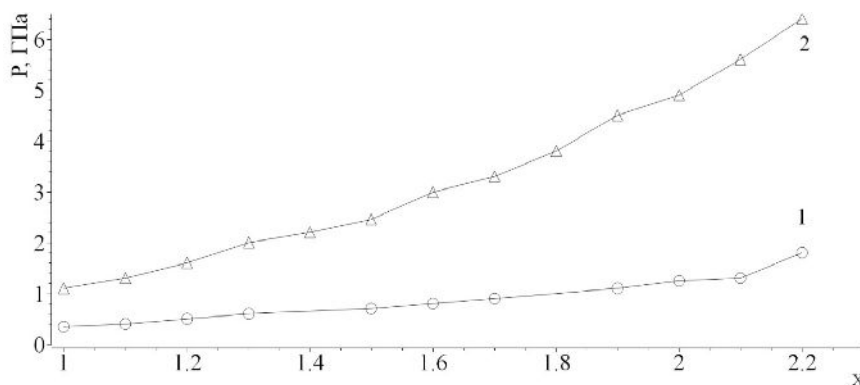


Рисунок 1 – Изотерма холодного сжатия (кривая 1) и ударная адиабата полиэтилена (кривая 2)

При сравнительно небольших давлениях $P \leq 2.0$ ГПа оценим разности величин P_x и P в полиэтилене. Для этого как и в работе [9] введем параметр α , определяемый уравнением

$$\alpha = \frac{\rho - \rho_0}{\rho}, \quad (1)$$

где ρ_0 – начальная плотность ПЭ, ρ – плотность возмущенной среды.

Известно, что при аппроксимации экспериментальных данных по сжимаемости полимеров пользуются аналитической зависимостью:

$$\Delta P = P - P_0 = \frac{1}{A} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right], \quad (2)$$

где $A = 5.5$; $n = 5$, при $0.1 \leq \Delta P \leq 3.5$ ГПа.

Далее, в уравнении состояния твердых тел Ми-Грюнайзена P_x выразим в виде (3):

$$P_x = P_x^{(1)}(V) + \frac{P_0(\gamma + 2)}{2(\gamma + 1)} + \frac{\gamma}{V^{\gamma+1}} \left[\frac{P_0}{2(\gamma + 1)} - \varepsilon_{T_0} \right], \quad (3)$$

где γ – микроскопический параметр Грюнайзена, вычисленный по уравнению Ландау – Слетера [9], ε_{T_0} – начальная тепловая энергия, $P_x^{(1)}$ – полином, зависящий от A, n, γ .

Считая величину α малой по сравнению с единицей и разлагая выражения (2) и (3) в ряд по α , получим:

$$\Delta P - P_x^{(1)} = \frac{1}{A} \left\{ \frac{n\gamma(n+1)[(n-1)(n-2\gamma) + \gamma(\gamma-1)]\alpha^3}{12(n-\gamma)(n-\gamma-1)} + \frac{\gamma n(n+1)[(n-1)(n-2)(2n-3\gamma) + \gamma(\gamma-1)(\gamma-2)]\alpha^4}{2 \cdot 4! (n-\gamma)(n-\gamma-1)} + \dots \right\}.$$

Исходя из условия (1) в расчетах учтем, что удельный объем V меняется мало. Тогда из (4) следует, что разность между ударным сжатием и изотермой холодного сжатия при давлениях порядка 2,0 ГПа пропорциональна величине α^3 .

Дифференциал энтропии dS запишем в виде:

$$dS = \frac{\gamma dV}{V} + \frac{d\varepsilon_T}{\varepsilon_{T_0}}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_T = \frac{C_V T}{\varepsilon_0^2}$, C_V – теплоемкость полиэтилена при постоянном объеме.

Интегрируя равенство (5) от точки начального состояния ($S = S_0$, $V = 1$, $\varepsilon_T = \varepsilon_{T_0}$) по произвольного текущего состояния, получим:

$$S - S_0 = \ln \frac{\varepsilon_T V^\gamma}{\varepsilon_{T_0}}. \quad (6)$$

Уравнение (6) является обобщенным выражением термодинамической функции – энтропии S полимеров. Если имеет место изотермический процесс, то из (6) и уравнения Ми-Грюнайзена получим выражение для адиабаты Пуассона:

$$[P - P_x(V)] = \frac{\text{const}}{V^{\gamma+1}}. \quad (7)$$

Из уравнения (7) следует, что произведение теплового давления на текущий удельный объем в степени $(\gamma + 1)$ есть величина постоянная.

Далее, чтобы оценить величину изменения энтропии полиэтилена на фронте ударной волны, исключим из уравнения (6) тепловую энергию ε_T , которую найдем из уравнения состояния Ми-

Грюнайзена

$$\varepsilon_T = \frac{(P - P_X) \cdot V}{\gamma} \quad (8)$$

Подставляя (8) в (6) получим:

$$S - S_0 = \ln \left\{ \frac{1 + (P - P_X) \cdot V^{\gamma+1} - \gamma \cdot \varepsilon_{T_0}}{\gamma \cdot \varepsilon_{T_0}} \right\} \quad (9)$$

При небольших интенсивностях ударной волны дробь в выражении (9) мала. Поэтому представим логарифм в виде ряда

$$S - S_0 = \frac{[P - P_X(V)]V^{\gamma+1} - \gamma \varepsilon_{T_0}}{\gamma \varepsilon_{T_0}} + \dots \quad (10)$$

Воспользовавшись уравнением (3) и разложив $V^{\gamma+1}$ в ряд по α , получим

$$S - S_0 = \frac{1}{\gamma \cdot A \cdot \varepsilon_{T_0}} \{B_1 \alpha^3 + [B_2 - B_1(\gamma + 1)]\alpha^4 + \dots\}, \quad (11)$$

где B_1 – коэффициент из (3) при α^3 ; B_2 – коэффициент из (3) при α^4 .

Из анализа этого выражения следует, что скачок энтропии полиэтилена на фронте волны при ударно – волновом сжатии пропорционален относительному изменению плотности в степени не ниже трех.

В работе также исследована зависимость параметра Грюнайзена для полиэтилена в зависимости от температуры. Для этого использован пакет для классической молекулярной динамики LAMMPS [10]. На рисунке 2 представлен фрагмент полиэтиленовой пластины, использованный при моделировании.

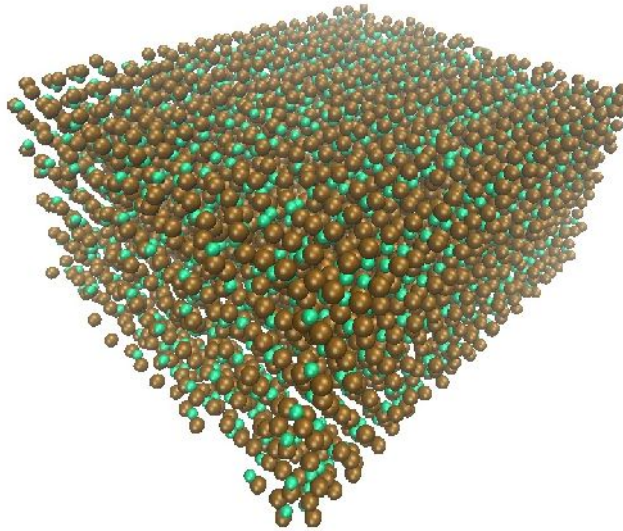


Рисунок 2 – Полиэтиленовая пластина, использованная при МД-моделировании, состоящая из 7200 атомов. Темным цветом выделены атомы углерода, светлым – водорода

МД-моделирование проводилось в выбранном температурном диапазоне 273–363 К. Для описания взаимодействия между атомами углерода и водорода использовался многочастичный потенциал REBO [11], который хорошо подходит для описания материалов с ковалентными связями. Температура системы регулировалась с помощью термостата Нозе–Хувера [12], временной шаг составлял $\tau = 0,1$ фс. Все МД расчеты проводились при давлении 1 атм.

После сбора и обработки данных МД-моделирования был рассчитан параметр Грюнайзена при различных температурах. Результаты представлены на рисунке 3.

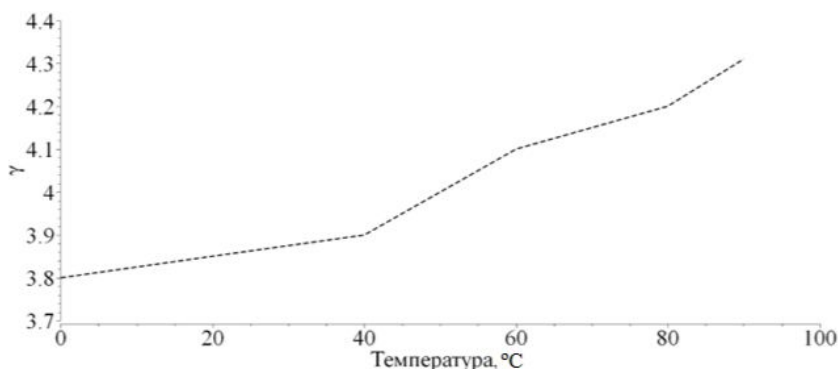


Рисунок 3 – Температурная зависимость параметра Грюнайзена полиэтилена

Как можно заметить из графика, параметр γ увеличивается с ростом температуры. Так, в интервале температур 0–90 °C параметр γ увеличивается от 3,8 до 4,32.

Используя теоретическую модель твердого тела в виде Ми-Грюнайзена, единой ударной адиабаты в виде (2) и диаграмм состояния полиэтилена в экстремальных условиях по моделям А. Молодца и К. Хищенко оценена величина изменения энтропии. Полученные результаты могут быть применены для приближенного описания термодинамических свойств полимеров при небольших давлениях порядка 1–5 ГПа. Методом МД получен параметр Грюнайзена для полиэтилена в зависимости от температуры. Показано, что значение параметра γ увеличивается с повышением температуры системы.

Библиография

1. Бушман А.В., Фортон В.Е. Модели уравнений состояния веществ // Успехи физических наук. 1983. Т. 140, № 2. С. 177–232.
2. Wan C.K., Yuan J.C., Li L., Cai Y. et. al. Dynamic compression of dendritic high-entropy alloy Al 0.5 CoCrFeNi with various microstructures: Experiments and constitutive modeling // Materials Science & Engineering A. 2025. V. 930. P. 1–11.
3. Ахриев А.С., Гайтукиева З.Х., Кунижев Б.И. Исследование функции Грюнайзена и полиэтилена при ударно-волновом нагружении // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. 2005. № 8. С. 3-13.
4. Theory and simulation of shock waves: Entropy production and energy conversion // Phys. Rev. E. 2021. V. 104. P. 1–18.
5. Hossain M.F. Natural mechanism to console global water, energy, and climate change crisis // Sustainable Energy Technol Assess. 2019. V. 35. P. 347–353.
6. Soleimani Z., Zoras S., Ceranic B., Shahzad S., Cui Y. A review on recent developments of thermoelectric materials for room-temperature applications // Sustainable Energy Technol Assess. 2020. V. 37. P. 100604.
7. Walker S.B., Lanen D., Mukherjee U., Fowler M. Greenhouse gas emissions reductions from applications of Power-to-Gas in power generation // Sustainable Energy Technol Assess. 2017. V. 20. P. 25–32.
8. Щечоева А.Х., Куготова А.М., Кунижев Б.И., Ахриев А.С. Функция Грюнайзена некоторых полимеров и их композитов // Глобальный научный потенциал. 2013. Т. 23, № 2. С. 27–31.
9. Гоголев В.М., Мыркин В.Г. Приближенное уравнение состояния твердых тел // ПМТФ. 1963. № 5. С. 93–98.
10. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., et. al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Comput. Phys. Commun, 2022. V. 271. P. 108171.
11. Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V.14. P. 783–802.
12. Hoover W.G. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 1695.

References

1. Bushman A.V., Fortov V.E. Models of the equations of state of substances. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk = Physics-Uspekhi*. 1983;140(2):177–232. (In Russ.).
2. Wan C.K., Yuan J.C., Li L., Cai Y. et. al. Dynamic compression of dendritic high-entropy alloy Al 0.5 CoCrFeNi with various microstructures: Experiments and constitutive modeling. *Materials Science & Engineering A*. 2025;930:1–11.
3. Akhriev A.S., Gaitukieva Z.Kh., Kunizhev B.I. Study of the Gruneisen function and polyethylene under shock-wave loading. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Severo-Kavkazskii Region = News of higher educational institutions. North Caucasus region*. 2005;8:3–13. (In Russ.).
4. Theory and simulation of shock waves: Entropy production and energy conversion. *Phys. Rev. E*. 2021;104:1–18.
5. Hossain M.F. Natural mechanism to console global water, energy, and climate change crisis. *Sustainable Energy Technol Assess*. 2019;35:347–353.
6. Soleimani Z., Zoras S., Ceranic B., Shahzad S., Cui Y. A review on recent developments of thermoelectric materials for room-temperature applications. *Sustainable Energy Technol Assess*. 2020;37:100604.
7. Walker S.B., Lanen D., Mukherjee U., Fowler M. Greenhouse gas emissions reductions from applications of Power-to-Gas in power generation. *Sustainable Energy Technol Assess*. 2017;20:25–32.
8. Tsetchoeva A.Kh., Kugotova A.M., Kunizhev B.I., Akhriev A.S. Gruneisen function of some polymers and their composites. *Globalnyi nauchnyi potencial = Global scientific potential*. 2013;23(2):27–31. (In Russ.).
9. Gogolev B.M., Myrkin V.G. Approximate equation of state of solids. *Prikladnaya Mekhanika i Tekhnicheskaya Fizika = Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 1963;5:93–98. (In Russ.).
10. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., et. al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comput. Phys. Commun*. 2022;271:108171.
11. Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002;14:783–802.
12. Hoover W.G. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. *Phys. Rev. A*. 1985;31:1695.