УДК 53.092,536.715

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УГЛЕРОДА

© 2021 г. К. К. Маевский^{1, 2, *}

¹Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия ²Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

> *E-mail: konstantinm@hydro.nsc.ru Поступила в редакцию 09.07.2020 г. После доработки 18.02.2021 г. Принята к публикации 19.05.2021 г.

Для повышения достоверности описания термодинамических параметров ударно-волнового нагружения углерода в чистом виде, а также в качестве компонента материалов и гетерогенных смесей, включающих углерод, предлагается использовать модифицированное уравнение состояния для расчетов по термодинамически равновесной модели. Определены параметры уравнений состояния для графита и алмаза. Произведено моделирование термодинамических параметров для графита и алмаза различной пористости. Определены значения сжатия вдоль ударной адиабаты, рассчитано значение теплоемкости вдоль нормальной изобары, а также значения энтальпии, термодинамического потенциала и энтропии для графита и алмаза в зависимости от температуры. С использованием полученных результатов построена фазовая диаграмма углерода.

DOI: 10.31857/S0040364421050148

введение

Задачаописаниятермодинамическихсвойстввешества представляет интерес для многих исследователей при проведении как фундаментальных, так и прикладных исследований [1]. При решении прикладных задач ударно-волнового синтеза, позволяющего создавать материалы с заданными свойствами, и для других взрывных технологий необходимо моделировать термодинамические параметры для материалов и смесей на их основе с различными значениями пористости. В процессе исследований необходимо решить две задачи: определить уравнение состояния компонентов и учесть взаимодействие компонентов смеси. Одним из широко распространенных материалов, вызывающих интерес как в чистом виде, так и в составе сложных материалов и смесей, является углерод. Для углерода в виде графита и алмаза имеется большое количество исследований [2-8] и экспериментальных данных [9-11]. Это позволяет провести сравнение результатов моделирования симеющимися данными. Дополнительно для верификации модели также используются эксперименты по ударно-волновому воздействию на сложные материалы, например карбиды, где углерод рассматривается в качестве компонента [12]. Для таких расчетов необходимо иметь достаточно простую модель, дающую хорошее соответствие эксперименту в широком диапазоне значений давления для сплошных и пористых материалов. Существует большое количество подходов к выбору уравнения состояния твердого тела при динамических нагрузках, при этом построение адекватных уравнений состояния вещества само по себе является масштабной научной проблемой [13].

Так как компоненты материалов и смесей могут существенно различаться, в частности позначениям плотности и теплоемкости, необходим учет взаимодействия компонентов для достоверного описания термодинамических параметровсмеси придинамических нагрузках. При выполнении расчетов для смесей приходится рассматривать упрощенные модели, область применения которых ограничена и устанавливается в каждом конкретном случае на основе внутренних характеристик модели или путем сравнения с более точными решениями, а также с результатами, полученными наосновании экспериментов. Выбор зависимости коэффициента Грюнайзена в уравнении состояния в термодинамически равновесной модели ТЕС [14, 15] дает возможность описывать данные, полученные на основании эксперимента в широком диапазоне значений давления и пористости. Данная модель позволяет достоверно описывать пористые смеси, в том числе с компонентами, которые испытывают фазовый переход при ударно-волновом воздействии [15, 16]. Вопрос согласованности уравнения состояния был решен для модифицированной модели ТЕС2 в работе [17].

Целью настоящего исследования является построение уравнений состояния углерода в виде графита и алмаза, позволяющих достоверно рассчитывать термодинамические параметры при моделировании ударно-волнового нагружения как чистого углерода, так и материалов, а также смесей с углеродом в качестве компонента.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

При расчетах ударно-волнового нагружения углерода используется модель TEC2, разработанная для расчета многокомпонентных материалов [17]. Предполагается, что все компоненты материала при ударно-волновом нагружении находятся в термодинамическом равновесии, означающем равенство давлений и температур компонентов между собой. Данный подход ранее применялся, в частности, в [18].

Уравнения, определяющие состояние конденсированного компонента, записываются в следующем виде:

$$P(\sigma, \tau) = P_C(\sigma) + P_T(\sigma, \tau),$$

где $\sigma = \rho / \rho_0$, $\tau = T / T_0$,

$$E(\sigma,\tau) = E_C(\sigma) + E_T(\sigma,\tau).$$

Потенциальная и тепловая составляющие давления описываются как

$$P_C(\sigma) = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} (\sigma^n - 1),$$

$$P_T(\sigma, \tau) = c_{\nu 0} \rho_0 T_0(\tau - 1) \sigma k \frac{1 + a_1 \tau}{1 + a_2 \tau}.$$
(1)

Здесь P_C , P_T , E_C , E_T – потенциальные и тепловые компоненты давления и удельной энергии; T – температура; T_0 – начальная температура; текущая и начальная плотность ρ , ρ_0 . В этом случае функция энергии представляется следующим уравнением:

$$E_{C}(\sigma) = \frac{c_{0}^{2}}{n} \left(\frac{1}{n-1} (\sigma^{n-1} - 1) - 1 + \frac{1}{\sigma} \right),$$

$$E_{T}(\sigma, \tau) = F(\tau) - c_{V0}T_{0}k \times$$

$$\times \frac{1 + 2a_{2}\tau + (a_{1} - a_{2} + a_{1}a_{2})\tau^{2}}{(1 + a_{2}\tau)^{2}} \ln(\sigma), \quad F(\tau) = c_{V0}T_{0} \times^{(2)}$$

$$\times \left[(\tau - 1) \left(\lambda - \frac{b_{1}}{b_{2}} \right) - \frac{1}{b_{2}} \left(1 - \frac{b_{1}}{b_{2}} \right) \ln \left(\frac{1 + b_{2}\tau}{1 + b_{2}} \right) \right].$$

Здесь c_{10} и c_0 — соответственно теплоемкость и скорость звука в нормальных условиях. С учетом области применения модели для значений давления больше 1 ГПа начальной энергией E_0 вещества при нормальных условиях пренебрегаем. С использованием связи между теплоемкостями c_V и c_p

$$c_p(\sigma, \tau) = c_V(\sigma, \tau) - T_0 \tau \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V^2 / \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$$

 c_V рассчитывается как

$$c_{V}(\sigma,\tau) = c_{V0} \left[\lambda - \frac{1+b_{1}\tau}{1+b_{2}\tau} \right] - c_{V0}k \times \frac{2\tau \left(a_{1} - a_{2} + a_{1}a_{2} - a_{2}^{2}\right)}{\left(1+a_{2}\tau\right)^{3}} \ln(\sigma).$$

Параметры определяются из соответствия экспериментальным данным по теплоемкости c_p . Функция энтропии получена интегрированием дифференциального соотношения

$$dS = (\partial S/\partial T)_V dT + (\partial S/\partial V)_T dV,$$

$$(\partial S/\partial T)_V = c_V/T, \quad (\partial S/\partial V)_T = (\partial P/\partial T)_V.$$

В итоге функция энтропии записывается в следующем виде:

$$S(\sigma, \tau) = c_V \left[St(\sigma, \tau) + Sv(\sigma, \tau) \right] + S_0,$$

$$St(\sigma, \tau) = (\lambda - 1) \ln(\tau) + \left(1 - \frac{b_1}{b_2} \right) \ln(1 + b_2 \tau) + k \frac{a_1 - a_2 + a_1 a_2 - a_2^2}{a_2 (1 + a_2 \tau)^2} \ln(\sigma).$$

$$Sv(\sigma, \tau) = k \frac{a_1 - 1 - a_2 - 2a_1 \tau - a_1 a_2 \tau^2}{(1 + a_2 \tau)^2} \ln(\sigma).$$

Соответственно выписаны функции энтальпии и термодинамического потенциала Гиббса:

$$H(\sigma, \tau) = E(\sigma, \tau) + \frac{P(\sigma, \tau)}{\sigma \rho_0},$$

$$G(\sigma, \tau) = E(\sigma, \tau) + \frac{P(\sigma, \tau)}{\sigma \rho_0} - T_0 \tau S(\sigma, \tau).$$

Для построения ударных адиабат многокомпонентных материалов, как было показано в [15], выписываются условия динамической совместности на фронте волны: условия сохранения потока массы для каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом. При этом газ в порах рассматривается как один из компонентов. Для смеси, в состав которой входят *n* конденсированных компонентов, имеющих начальные объемные доли μ_{n0} , получено следующее выражение:

$$P = \frac{\sum_{i=1}^{n} A_{i} \frac{\mu_{i0}}{\sigma_{i}} \left[\left(h_{i} - \frac{k_{i} + 1}{k_{i} - 1} \right) \sigma_{i}^{k_{i}} + \frac{2k_{i}\sigma_{i}}{k_{i} - 1} - h_{i} - 1 \right]}{\sum_{i=1}^{n} \frac{\mu_{i0}}{\sigma_{i}} h_{i} + \left(\frac{h_{g}}{\sigma_{g}} \right) \left(1 - \sum_{i=1}^{n} \mu_{i0} \right) - 1}{h_{i} = \frac{2}{\Gamma_{i}} + 1, \quad h_{g} = \frac{2}{\gamma - 1} + 1.}$$

Здесь $\sigma_i = \rho_i / \rho_{i0}$, $\sigma_g = \rho_g / \rho_{g0}$ – степени сжатия соответствующего компонента i = 1...n. Для газа берется уравнение состояния идеального газа; ρ_g , ρ_{g0} – текущая и начальная плотности газа, $\gamma = 1.41$ – показатель адиабаты. В рассматриваемой модели вводится функция $\Gamma = P_T V / E_T$, определяющая вклад тепловых компонентов давления (1) и удельной энергии (2) аналогично [15]. Дополняя эти уравнения условием равенства температур компонентов, можно построить зависимости, которые следует трактовать как ударные адиабаты многокомпонентной смеси. Значение теплоемкости для газа равно 718 Дж/(кг K), плотность $\rho_{g0} = 1.293 \times 10^{-3} г/см^3$, что соответствует воздуху, аналогично [18]. Для чистых материалов n = 1, в таком случае расчет проводится для смеси с одним конденсированным компонентом, при расчете поведения сплошного материала

полагается
$$\sum_{i=1}^{n} \mu_{i0} = 1$$
 [17].

Параметры для углерода приведены в таблице. Указанные параметры позволяют описывать данные, полученные на основании экспериментов по ударно-волновому нагружению как для сплошного графита и алмаза, так и для пористых образцов в переделах точности эксперимента. Методика определения параметров конденсированных компонентов описана в [17]. Значение энтропии при нормальных условиях для графита $S(1, 1) = 478.3 \ Дж/(моль K)$; для алмаза $S(1, 1) = 197.3 \ Дж/(моль K)$; значение T_0 при расчетах принималось равным 300 K.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Изотерма для графита при T = 300 К в сравнении с экспериментальными данными из [19–22] показана на рис. 1. Результаты расчетов соответствуют как экспериментальным данным, так и результатам расчетов по широкодиапазонному уравнению [23], в том числе учтена и точка из [22], соответствующая максимальному сжатию высоко ориентированного графита перед его быстрым превращением в алмаз, аналогично [23].

Для проверки достоверности описания вклада тепловых составляющих в рассматриваемом уравнении состояния рассчитаны значения изобарной теплоемкости графита и алмаза при нормальном давлении и температурах в диапазоне от 100 до 3000 К. Результаты моделирования теплоемкости для графита и алмаза в зависимости от температуры показаны на рис. 2 и 3 соответственно. Для сравнения приведены экспериментальные данные [24–26] и расчеты по моделям других авторов [27, 28].

Рис. 1. Давление в зависимости от относительного сжатия графита при T = 300 К: сплошная линия – модельный расчет; экспериментальные данные: 1 - [19], 2 - [20], 3 - [21], 4 - [22].

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 59 № 5 2021

П	арамет	пы ура	внения	состояния	лля	углерода
	apaner	ppi ypu	DITCITIN	cocromin	дџи.	уплероди

Параметр	Для графита	Для алмаза
ρ ₀ , г/см ³	2.265	3.515
с _{V0} , Дж/(кг К)	710	510
<i>c</i> ₀ , м/с	4096.5	11400
n	8.2	3
S_0	-5598	-2717
a_1	2.824×10^{-3}	4.815×10^{-3}
<i>a</i> ₂	3.272×10^{-3}	5.621×10^{-3}
k	1.1	0.701
b_1	-14.182	-7.181
<i>b</i> ₂	2.298	0.951
λ	-2.912	-2.105

Расчетные зависимости энтальпии для графита и алмаза в сравнении с высокотемпературными данными из [29–31] показаны на рис. 4. Результаты моделирования термодинамического потенциала Гиббса при P = 0 и данные из [32] приведены на рис. 5 до значений температуры 3500 К. Достигнуто хорошее соответствие расчетных кривых по рассматриваемой модели с данными [32].

Для сравнения результатов моделирования значений энтропии использовались данные из [33]. Расчеты значения энтропии для графита и алмаза приведены на рис. 6.

В [10, 34, 35] приведены данные по ударноволновому нагружению для графита с различными значениями пористости. Пористость *m* определяется как отношение нормальной плотности монолитного вещества к начальной плотности образца. Построенная модель позволяет достоверно рассчитывать термодинамические параметры исходно пористых образцов графита в условиях ударного сжатия. Расчетные ударные адиабаты

Рис. 2. Теплоемкость графита в зависимости от температуры: сплошная линия – модельный расчет; экспериментальные данные: 1 - [24], 2 - [25], 3 - [26], 4 - [27], 5 - [28].

Рис. 3. Зависимость теплоемкости алмаза от температуры: сплошная линия – модельный расчет; экспериментальные данные: 1 – [24], 2 – [25]; 3 – расчет [28].

Рис. 4. Расчетные значения энтальпии углерода: сплошная линия – расчет для графита, пунктирная – для алмаза; экспериментальные данные: *1* – для алмаза [29], *2* – [30]; *3* – для графита [31].

и данные, полученные на основании эксперимента для пористого графита с m = 1.021, 1.211,2.24, показаны на рис. 7 в координатах "волновая и массовая скорости", на рис. 8 в координатах "давление-массовая скорость". Здесь показаны также расчеты по алмазу для той же начальной плотности, что и у образцов графита. Для наглядности расчеты и данные для m = 1.211, 2.24 приведены со сдвигом на 1 и 2 км/с соответственно. Результаты моделирования показывают, что авторская модель позволяет достоверно описывать данные экспериментов для графита до места излома ударной адиабаты, которое рассматривается как область начала перехода графита в фазу высокого давления. При более интенсивных нагрузках образцов экспериментальные точки приближаются к ударной адиабате алмаза той же начальной плотности, что и у образцов графита. Это может свидетельствовать о полном переходе графита в фазу высокого давления, которая соответствует алмазу.

Рис. 5. Термодинамический потенциал углерода: сплошная линия – расчет для графита, пунктирная – для алмаза; расчет [32]: *1* – графит, *2* – алмаз.

Рис. 6. Энтропия графита и алмаза в зависимости от температуры: сплошная линия – расчет для графита, пунктирная – для алмаза; расчет [33]: 1 – графит, 2 – алмаз.

Знание термодинамического потенциала графита и алмаза позволяет построить линию равновесия этих двух фаз углерода. Для построения использовались условия термодинамического равновесия, а также равенство значений давления и температур смежных фаз. На рис. 9а показана линия равновесия фаз углерода, приведенная в [29], и линия равновесия по авторской модели. Здесь же приведены зависимости температуры вдоль ударных адиабат графита от различных значений плотности. Отмечены точки, соответствующие изломам на ударных адиабатах на рис. 7 и 8, которые можно трактовать как начало фазового перехода графита в алмаз в ударной волне, когда точки с большими значениями давления уже не соответствуют ударной адиабате графита. Для образцов с начальной плотностью $\rho_0 = 2.22$ г/см³ и 1.87 на кривых для алмаза показаны точки, соответствующие значениям давления, когда экспериментальные данные приблизились к ударной адиабате алмаза,

Рис. 7. Ударные адиабаты углерода: I – расчет для графита, $\rho_0 = 2.22$ г/см³; Ia – расчет для алмаза, $\rho_0 = 2.22$ г/см³; $2, 2a - \rho_0 = 1.87$ г/см³; $3, 3a - \rho_0 = 1.01$ г/см³; эксперимент: 4 - [34], 5 - [35], 6 - [9], 7 - [10].

Рис. 8. Ударные адиабаты углерода: обозначения – см. рис 7.

что можно трактовать как полный переход графита в алмаз. Диапазон давлений между данными точками для каждого образца находится в области фазового перехода, описание которого возможно с использованием приведенных уравнений по методике [15], где в области фазового перехода термодинамические характеристики материалов определяются из предположения, что исследуемый материал в этой области представляет собой смесь фазы низкого давления и фазы высокого давления. Подобные модели с изменяющейся в ударной волне долей одной из фаз использовались в работах [4, 5]. Проведение таких расчетов является следующим этапом развития модели ТЕС2. Дополнительно на рис. 9а приведена зависимость из [2] начала фазового перехода в ударных волнах для графита.

Для сравнения полученных результатов моделирования с результатами других авторов на рис. 9б показаны данные по термодинамическому равновесию графит—алмаз из [36, 37], а также кривая из статьи [4].

Рис. 9. Фазовая диаграмма углерода: (а) – температура вдоль ударных адиабат: I - графит, $\rho_0 = 2.22 \ г/см^3$; Ia - алмаз, $\rho_0 = 2.22 \ г/см^3$; $2, 2a - \rho_0 = 1.87 \ г/сm^3$; $3, 3a - \rho_0 = 1.01 \ г/сm^3$; кружки – начало фазового перехода графит–алмаз, ромбы – окончание перехода; 4 -расчет равновесия графит–алмаз [29]; 5 -расчет по рассматриваемой модели; 6 -линия начала превращения метастабильного графита в алмаз [2]; (6): 7 -расчетная кривая термодинамического равновесия графит–алмаз [4], 8 - [36], 9 - [37].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построены термодинамически согласованные малопараметрические уравнения состояния для углерода в виде графита и алмаза. Определены параметры уравнений, позволяющих достоверно описывать теплоемкость, энтальпию и энтропию углерода в двух модификациях. Построены ударные адиабаты графита и алмаза различной пористости. С помощью рассматриваемых уравнений состояния рассчитаны термодинамические параметры для графита и алмаза в широком диапазоне значений давления и пористости исследуемых образцов. При малом количестве параметров, определяемых по соответствию экспериментальным данным, получено достоверное описание ударно-волнового нагружения углерода. Результаты численного моделирования хорошо соответствуют данным, полученным на основании экспериментов, и не противоречат расчетам других авторов. Данная модель может быть полезной для расчетов термодинамических параметров материалов и гетерогенных смесей при высокоэнергетическом воздействии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Fortov V.* Thermodynamics and Equations of State for Matter: From Ideal Gas to Quark-Gluon Plasma. Singapore: World Sci. Publ., 2016. 568 p.
- Молодец А.М., Молодец М.А., Набатов С.С. Термодинамические потенциалы углерода // ФГВ. 2000. № 2. С. 88.
- 3. *Nellis W.J., Mitchell A.C., McMahan A.K.* Carbon at Pressures in the Range 0.1–1 TPa (10 Mbar) // J. Appl. Phys. 2001. V. 90. № 2. P. 696.
- Ломоносов И.В., Фортов В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чарахчьян А.А., Шуршалов Л.В. Моделирование превращения графита в алмаз при динамическом сжатии в конической мишени // ТВТ. 2003. Т. 41. № 4. С. 515.
- 5. Чарахчьян А.А., Милявский В.В., Хищенко К.В. Применение моделей смеси для анализа ударно-волновых экспериментов с неполным фазовым превращением // ТВТ. 2009. Т. 47. № 2. С. 254.
- 6. Верещагин Л.Ф., Яковлев Е.Н., Бучнев Л.М., Дымов Б.К. Условия термодинамического равновесия алмаза с различными углеродными материалами // ТВТ. 1977. Т. 15. № 2. С. 316.
- 7. Канель Г.И., Безручко Г.С., Савиных А.С., Разоренов С.В., Милявский В.В., Хищенко К.В. Субмикросекундные полиморфные превращения при ударном сжатии графита // ТВТ. 2010. Т. 48. № 6. С. 845.
- Bourasseau E., Pineau N., Maillet J.-B., Dubois V. Calculation of the Shock Temperature of Moderately Porous Graphites // Carbon. 2016. V. 103. P. 464.
- Трунин Р.Ф. Исследования экстремальных состояний конденсированных веществ методом ударных волн. Уравнения Гюгонио. Саров: РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2006. 286 с.
- LASL Shock Hugoniot Data / Ed. Marsh S.P. Berkeley: Univ. of California Press, 1980. 658 p.
- Levashov P.R., Khishchenko K.V., Lomonosov I.V., Fortov V.E. Database on Shock-wave Experiments and Equations of State Available via Internet // AIP Conf. Proc. 2004. V. 706. P. 87.
- Maevskii K.K. Thermodynamic Parameters of Shock Wave Loading of Carbides with Various Stoichiometric Compositions // AIP Conf. Proc. 2019. V. 2167. P. 020204.
- 13. Ломоносов И.В., Фортова С.В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 596.
- 14. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Моделирование ударно-волнового нагружения многокомпонентных материалов, включающих в свой состав висмут // ТВТ. 2016. Т. 54. № 5. С. 716.
- 15. *Маевский К.К., Кинеловский С.А.* Термодинамические параметры смесей с нитридом кремния при ударно-волновом воздействии в представлениях равновесной модели // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 876.
- Maevskii K.K. Modelling of Polymorphic Phase Transitions under Shock Wave Loading // AIP Conf. Proc. 2019. V. 2103. 020009.
- Маевский К.К., Кинеловский С.А. Численное моделирование термодинамических параметров высокопористой меди // ЖТФ. 2019. Т. 89. № 8. С. 1158.

- Милявский В.В., Фортов В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чарахчьян А.А., Шуршалов Л.В. Расчет ударного сжатия пористых сред в конических твердотельных мишенях с выходным отверстием // ЖВМиМФ. 2006. Т. 46. № 5. С. 913.
- Lynch R.W., Drickamer H.G. Effect of High Pressure on the Lattice Parameters of Diamond, Graphite, and Hexagonal Boron Nitride // J. Chem. Phys. 1966. V. 44. P. 181.
- Zhao Y.X., Spain I.L. X-ray Diffraction Data for Graphite to 20 GPa // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. № 2. P. 993.
- Hanfland M., Beister H., Syassen K. Graphite under Pressure: Equation of State and First-order Raman Modes // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. № 17. P. 12598.
- 22. *Erskine D.J., Nellis W.J.* Shock-induced Martensitic Transformation of Highly Oriented Graphite to Diamond // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. № 10. P. 4882.
- 23. *Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V.* Multiphase Equation of State for Carbon over Wide Range of Temperatures and Pressures // Int. J. Thermophys. 2005. V. 26. № 2. P. 479.
- 24. Физические величины. Спр. / Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- Таблицы физических величин / Под ред. Кикоина И.К. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
- Шелудяк Ю.Е., Кашпоров Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем. М.: НПО Информ ТЭИ, 1992. 184 с.
- Kelley K.K. Contributions to the Date on Theoretical Metallurgy. X. High-temperature Heat-content, Heat-capacity, and Entropy Data for Inorganic Compounds // U.S. Bur. Mines Bull., 1960. № 476. 241 р.
 Гуревич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термо-
- Гуревич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. II. Кн. 1. М.: Наука, 1979. 440 с.
- Berman R., Simon F. On the Graphite–Diamond Equilibrium // Zeitschrift fur Electrochemie. 1955. Bd. 59. N
 № 5. S. 333.
- Bridgman P.W. The Compression of 39 Substances to 100,000 kg/cm // Proc. Amer. Acad. Arts a. Sci. 1948. V. 76. № 3. P. 55.
- 31. Бучнев Л.М., Смыслов А.И., Дмитриев И.А., Кутейников А.Ф., Костиков В.И. Экспериментальное исследование энтальпии квазимонокристалла графита и стеклоуглерода в интервале температур 300–3800 К // ТВТ. 1987. Т. 25. № 6. С. 1120.
- 32. Верещагин Л.Ф., Яковлев Е.Н., Бучнев Л.М., Дымов Б.К. Условия термодинамического равновесия алмаза с различными углеродными материалами // ТВТ. 1977. Т. 15. № 2. С. 316.
- Шмидт Э. Введение в техническую термодинамику. М.: Энергия, 1965. 391 с.
- 34. *Gust W.H.* Phase Transition and Shock-compression Parameters to 120 GPa for Three Types of Graphite and for Amorphous Carbon // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. № 6. P. 4744.
- Павловский М.Н., Дракин В.П. К вопросу о металлической фазе углерода // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т. 4. № 5. С. 169.
- 36. Bundy F.P., Bovenkerk H.P., Strong H.M., Wentorf R.H.Jr. Diamond-graphite Equilibrium Line from Growth and Graphitization of Diamond // J. Chem. Phys. 1961. V. 35. № 2. P. 383.
- 37. *Kennedy C.S., Kennedy G.C.* The Equilibrium Boundary between Graphite and Diamond // J. Geophys. Res. 1976. V. 81. № 14. P. 2467.