

01;03;05

## Численное исследование ударного сжатия графита и его превращения в алмаз в конических мишенях

© И.В. Ломоносов,<sup>1</sup> В.Е. Фортон,<sup>1</sup> А.А. Фролова,<sup>2</sup> К.В. Хищенко,<sup>1</sup> А.А. Чарахчян,<sup>2</sup> Л.В. Шуршалов<sup>2</sup><sup>1</sup> Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия<sup>2</sup> Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, 119991 Москва, Россия  
e-mail: chara@ccas.ru

(Поступило в Редакцию 10 декабря 2002 г.)

Численно исследуется сжатие углерода в конических свинцовых мишенях с помощью алюминиевых ударников, имеющих скорость 4 km/s. Постановка задачи включает в себя уравнения гидродинамики сжимаемых сред, полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния материалов и кинетическую модель неравновесного превращения графита в алмаз, откалиброванную с учетом известных экспериментальных данных. Исследуются все стадии процесса от кумулятивного эффекта на оси симметрии мишени до разгрузки образца, вызванной приходом волны разрежения от тыльной поверхности ударника, учитывая явление откола.

### Введение

Превращение графита в алмаз под действием ударного сжатия изучается в течение уже нескольких десятков лет (см., например, [1–16]). Эти и большинство других работ в этой области опираются на эксперименты с плоскими ударными волнами. В работе [17] была впервые высказана идея об использовании конических твердотельных мишеней для получения искусственных алмазов. Естественным недостатком конических мишеней по сравнению с плоскими является пространственная неоднородность сжатия. В то же время конические мишени обладают рядом ценных свойств, которые могут способствовать большей эффективности процесса синтеза алмаза из той части графита, которая расположена вблизи оси симметрии мишени. Здесь имеется достаточно большой набор параметров, которые можно использовать для управления процессом (геометрические размеры и форма конической мишени, материал мишени и ударника, скорость и толщина ударника). Кумулятивный эффект, сопровождающий сжатие графита в конической мишени, позволяет на короткое время создавать вблизи оси симметрии высокое давление, практически недоступное при той же скорости удара по плоской конструкции. Наконец, имеется простая возможность организации в вершине конической выемки выводящего профилированного канала для извлечения подвергнутого испытанию образца и доведения его до нужных условий (неразрушающей разгрузки, необходимого охлаждения и торможения).

Первые результаты численного моделирования, приведенные в [17], не учитывали превращения графита в алмаз и, кроме того, относились лишь к изучению возникающего на начальной стадии сжатия кумулятивного эффекта. В настоящей работе применены новые полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния полиморфных модификаций углерода, а поста-

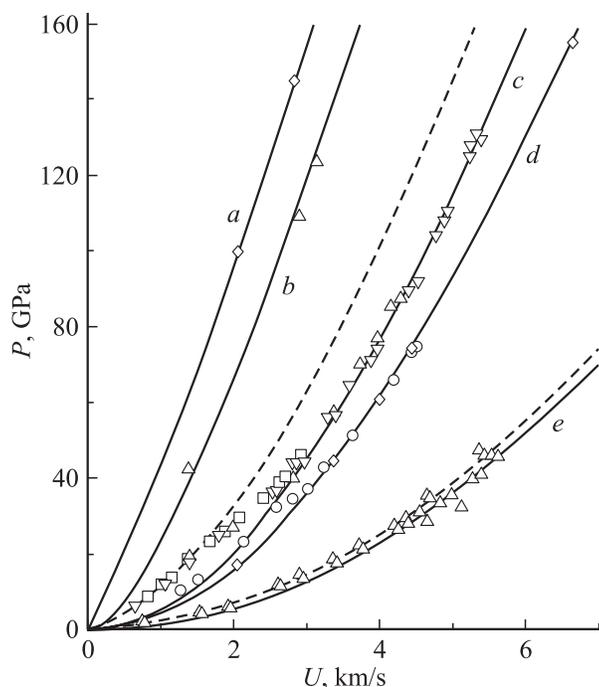
новка задачи включает в себя модель кинетики фазового превращения графита в алмаз. Основное исследование выполнено с использованием модели, отвечающей экспериментам [10] по ударному сжатию высокоориентированного квазимонокристаллического графита. Отдельные расчеты, демонстрирующие влияние сорта графита на характер течения, были выполнены в рамках модели, отвечающей экспериментам [9] с изотропным искусственным графитом. Моделируются все стадии процесса, включая разгрузку. Рассмотрены два вида конических мишеней: с замкнутой выемкой, а также с длинным цилиндрическим каналом, в который плавно переходит конус.

Отметим некоторые особенности реального течения, которые не учитываются в постановке задачи. Известно, что при ударном нагружении графита может образовываться как обычный алмаз с кубической решеткой [1,2], так и гексагональная модификация алмаза (лонсдейлит) [4]. В постановке задачи не делается различия между этими фазами, которые описываются одним и тем же уравнением состояния. Другим недостатком физической модели процесса является отсутствие учета обратного превращения алмаза в графит (графитизации) [6,11]. Одна из трудностей адекватного моделирования этого эффекта заключается в том, что количественные характеристики кинетики графитизации существенно различаются для алмаза и лонсдейлита [13]. Укажем также, что постановка задачи не учитывает теплопроводности, что связано с отсутствием надежных данных о транспортных свойствах углерода в требуемом диапазоне изменения термодинамических функций. Еще одно ограничение связано с тем, что расчеты проводятся в гидродинамическом приближении, не учитывающем сопротивление материалов сдвиговым напряжениям. В целом это вполне оправдано, если учесть огромную величину рассматриваемых давлений. В то же время описываемые ниже проявления неустойчивости границы раздела ал-

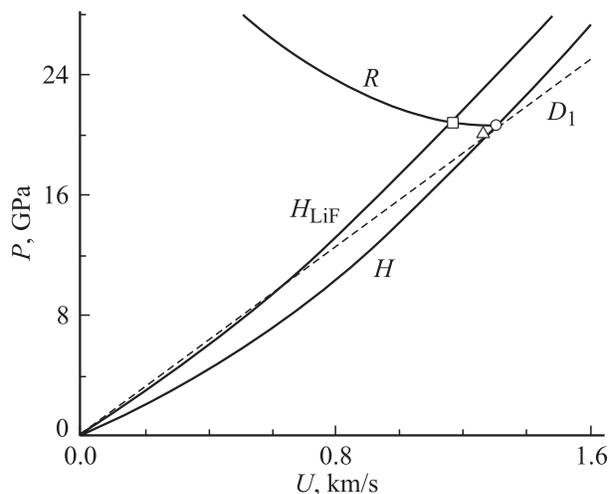
маза и мишени могут вести себя несколько по-иному из-за учета этого фактора. Тем не менее, несмотря на указанные недостатки, рассматриваемая модель позволяет исследовать зависимость основных характеристик течения от параметров задачи и делать обоснованный выбор таких параметров при проведении экспериментов.

## Уравнения состояния графита и алмаза

При численном моделировании нестационарных гидродинамических процессов важное значение имеет адекватность задания термодинамических свойств среды. Уравнение состояния вещества в существенной степени определяет достоверность результатов расчетов. В данной работе для описания термодинамических характеристик полиморфных модификаций углерода в широком диапазоне плотностей и температур на фазовой диаграмме были использованы полуэмпирические уравнения состояния [16,18,19]. Качество этих уравнений состояния демонстрирует сопоставление расчетных ударных адиабат с экспериментальными точками по динамическому сжатию образцов алмаза [20,21] и графита [7,14–16,21] различной исходной плотности, которое представлено на рис. 1. Как видно, результаты измерений ударной сжимаемости двух полиморфных модификаций углерода адекватным образом описываются во всем интервале интенсивностей нагружения, соответствующем твердотельным состояниям вещества за волновым фронтом.



**Рис. 1.** Ударные адиабаты образцов алмаза (сплошные кривые) и графита (штриховые кривые) различной начальной плотности  $\rho_{00} = 3.51$  (a), 3.19 (b), 2.15 (c), 1.9 (d), 1.011 g/cm<sup>3</sup> (e). Эксперимент:  $\diamond$  — [20],  $\triangle$  — [21],  $\nabla$  — [7],  $\square$  — [14],  $\circ$  — [15,16].



**Рис. 2.** Ударная адиабата образцов графита с исходной плотностью  $\rho_{00} = 2.259$  g/cm<sup>3</sup> (H) и кривая нагружения алмаза с начальным состоянием  $P = P_1$ ,  $V = V_1$  (R);  $H_{LiF}$  — ударная адиабата LiF [21],  $D_1$  — луч  $P = \rho_{00}D_1U$ ,  $\square$  — эксперимент [10];  $\triangle$  — оценка состояния на ударной адиабате графита [10],  $\circ$  — пересчет данной работы.

Рассмотрим некоторые результаты работы [10], в которой было зарегистрировано образование двухволновой структуры при динамическом нагружении квазимонокристалла графита до давлений  $P \approx 26.5\text{--}41$  GPa. Для определения параметров состояния, соответствующего предельному сжатию графита перед его быстрым превращением в фазу высокого давления, в эксперименте [10] были измерены скорость первой ударной волны в образце  $D_1$ , за фронтом которой углерод остается в исходной фазовой модификации (при давлении  $P_1$ , удельном объеме  $V_1$  и массовой скорости  $U_1$ ), и массовая скорость  $U_R$  за фронтом ударной волны, распространяющейся по прозрачной преграде из LiF после выхода первой ударной волны на границу образец–преграда (с этой же скоростью  $U_R$  движется углерод после его превращения в фазу высокого давления за фронтом отраженной от LiF ударной волны). Значение давления  $P_R$  за фронтом отраженной ударной волны в углероде определяется по измеренной величине  $U_R$  и известной ударной адиабате LiF [21]. Результаты расчета ударной адиабаты графита и кривой повторного нагружения образующегося алмаза по использованным в настоящей работе уравнениям состояния представлены на рис. 2. Следует отметить, что пересчитанные из исходных величин  $D_1$  и  $U_R$  [10] с помощью этих уравнений состояния кристаллических модификаций углерода параметры точки начала превращения ударно-сжатого графита в алмаз несколько отличаются от значений, которые были найдены в работе [10] на основании упрощающего предположения об адиабате повторного нагружения углерода  $P(U)$  в интервале давлений от  $P_1$  до  $P_R$  ( $P_1 \approx 19.6 \pm 0.7$  GPa,  $U_1 \approx 1.27$  km/s), и составляют  $P_1 \approx 20.6$  GPa,  $U_1 \approx 1.31$  km/s.

## Постановка задачи и численный метод

Рассматриваемая задача схематично показана на рис. 3. Свинцовая мишень (отдельные расчеты выполнены и для мишеней из других материалов) занимает полупространство и имеет осесимметричную полость, заполненную графитом. Расчеты проводились для двух видов полости: простого конуса (штриховая кривая на рис. 3) и конуса с выводящим цилиндрическим каналом (сплошная кривая). Радиус полости на поверхности мишени —  $R$ , угол раствора конуса —  $\vartheta$ , радиус цилиндрического канала —  $r_0$ . На мишень со скоростью  $v = 4$  km/s налетает алюминиевый ударник толщиной  $H$ .

По сравнению с реальными экспериментальными сборками из рассматриваемой постановки задачи исключены боковая и тыльная границы мишени. Предполагается, что эти границы достаточно далеко удалены от сжимаемого в мишени графита.

Течение описывается уравнениями гидродинамики сжимаемых сред

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{U} &= 0, & \rho \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \nabla P &= 0, \\ \rho \frac{d(E + \mathbf{U}^2/2)}{dt} + \operatorname{div} P\mathbf{U} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{U}\nabla$  — лагранжева производная по времени,  $\mathbf{U}$  — вектор скорости,  $\rho$  — плотность,  $P$  — давление,  $E$  — удельная внутренняя энергия.

В алюминии и свинце система уравнений (1) замыкается широкодиапазонными многофазными уравнениями состояния металлов [22]. При описании термодинамических свойств углерода используется модель неравновесного фазового превращения [23], а каждая фаза описывается с помощью уравнений состояния, упомянутых в предыдущем разделе, в следующем виде:

$$\begin{aligned} P_1 &= P_1(V_1, T), & E_1 &= E_1(V_1, T), \\ P_2 &= P_2(V_2, T), & E_2 &= E_2(V_2, T), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $V = \rho^{-1}$  — удельный объем,  $T$  — температура, индекс 1 относится к алмазу, 2 — к графиту.

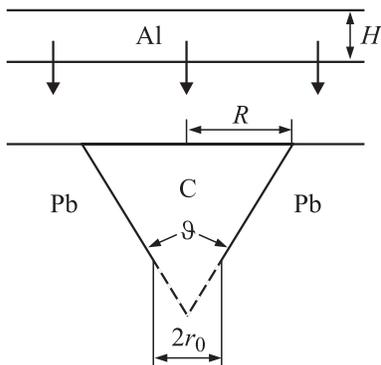


Рис. 3. Схема процесса.

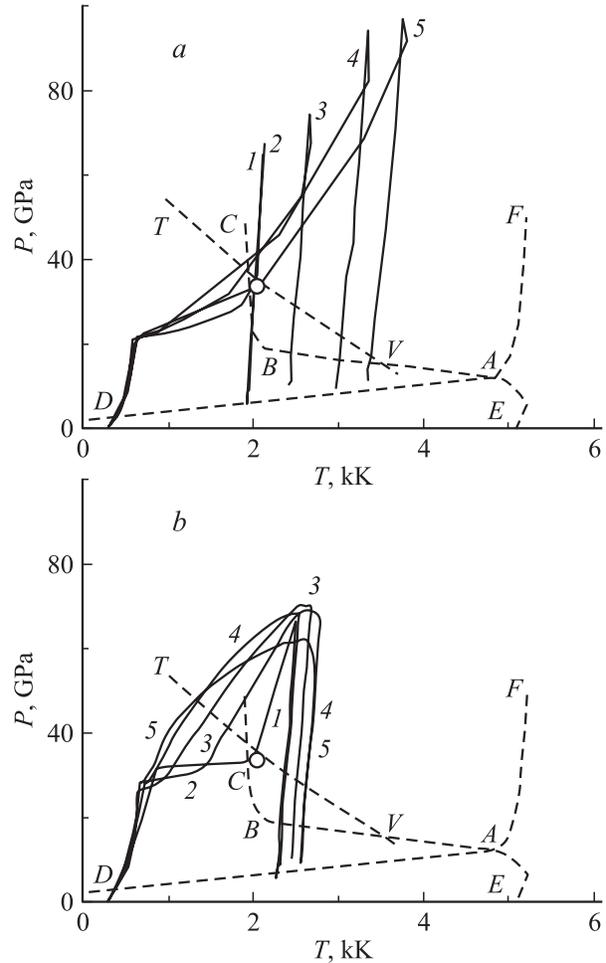


Рис. 4. Эволюция на фазовой диаграмме углерода пяти лагранжевых частиц, расположенных вдоль оси симметрии мишени с каналом при  $P_0 = 21$  GPa,  $\tau = 5$  ns (a) и  $P_0 = 24$  GPa,  $\tau = 90$  ns (b). Сплошные кривые — расчетные траектории частиц 1–5; штриховые — границы фазовых превращений углерода по данным обзора [12] (AD — линия термодинамического равновесия графит–алмаз; ABC — граница быстрого превращения графита в алмаз; AE и AF — кривые плавления графита и алмаза) и по оценке работы [13] (VT — нижняя граница области превращения графита в кубический алмаз при ударно-волновом нагружении); кружок — точка  $(T^*, P^*)$  из решения одномерной задачи.

Обе фазы углерода имеют одинаковые давление и температуру, а внутренняя энергия и удельный объем смеси аддитивны

$$\begin{aligned} P &= P_1(V_1, T) = P_2(V_2, T), \\ E &= \alpha E_1(V_1, T) + (1 - \alpha) E_2(V_2, T), \\ V &= \alpha V_1 + (1 - \alpha) V_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\alpha$  — массовая доля алмазной фазы.

Уравнения (1)–(3) замыкаются уравнением для  $\alpha$ , которое определяет кинетику фазового превращения.

Как известно, основные параметры фазового перехода в ударных волнах, которыми являются характерное

время превращения  $\tau$  и величина порога давления  $P_0$ , начиная с которого переход возможен, существенно зависят от сорта графита. В настоящей работе исследование проводится в основном для высокоориентированного графита, использованного в эксперименте [10], с  $P_0 = 21$  GPa (см. предыдущий раздел) и  $\tau < 10$  ns.

Уравнение для  $\alpha$  взято из работы [9]

$$d\alpha/dt = 0 \quad \text{при} \quad P \leq P_0,$$

$$d\alpha/dt = (1 - \alpha)(P/P_0 - 1)/\tau \quad \text{при} \quad P > P_0. \quad (4)$$

Полагалось  $\tau = 5$  ns. Для рассматриваемых мишеней с  $R \geq 5$  mm дальнейшее уменьшение  $\tau$  не меняло результатов, так как уже при  $\tau = 5$  ns толщина области фазового перехода оказывалась много меньше  $R$ .

Задача ставится в цилиндрических координатах  $(r, z)$ . Ось  $z$  направлена от начального положения вершины конуса ( $z = 0$ ) к его основанию. Для уравнений гидродинамики (1) применялся пакет программ, построенный на подвижных регулярных сетках с явным выделением границ раздела сред в виде линий сетки и на явных квазимонотонных схемах второго порядка точности. Уравнения (2) и (3) решались совместно с неявной схемой для уравнения (4) при заданных  $V$  и  $E$ , что позволяло проводить расчеты на сетках с размером ячеек, много большим ширины области фазового перехода. Общее число ячеек сетки колебалось в пределах 25–35 тысяч, из которых на углерод приходилось примерно 5 тысяч ячеек для мишени без канала и 9–11 тысяч ячеек для мишени с каналом.

Помимо уравнения (4) рассматривалось уравнение кинетики из работы [13], где предельное значение  $\alpha$  равно не единице, а некоторой функции  $\alpha_m(P)$ , построенной по экспериментальным данным, а вместо множителя  $(P/P_0 - 1)$  стоит экспоненциальный множитель, зависящий от  $T$ . Как показали контрольные расчеты, для рассматриваемой задачи оба уравнения дают близкие решения. Причина заключается в том, что для скорости ударника 4 km/s давление за фронтом фазового перехода  $P^*$  таково, что  $\alpha_m(P^*) \simeq 0.99$  близко к единице. Различие во множителях, определяющих структуру фронта, также оказывается несущественным из-за малой толщины фронта.

## Результаты расчетов

Рассмотрим вначале одномерную задачу об ударе алюминиевой пластины по плоскому образцу графита. Ее приближенное решение [9,10] имеет вид двухволновой структуры. Первая ударная волна идет по графиту и поднимает давление до величины начала фазового перехода  $P_0$ . Параметры вещества за фронтом первой волны, а также ее скорость  $D_1$  определяются из ударной адиабаты графита. Во второй волне происходит образование алмаза. Параметры среды за фронтом второй волны, а также ее скорость  $D_2$  определяются из замкнутой системы алгебраических уравнений, в которую входят

соотношения Гюгонио для этой волны, соотношения Гюгонио для волны в ударнике и условия непрерывности давления и скорости на контактной поверхности. Для скорости алюминиевого ударника  $v = 4$  km/s расчет дает  $D_1 \simeq 7.1$  km/s,  $D_2 \simeq 5.5$  km/s,  $P^* \simeq 33$  GPa, температура алмаза за фронтом второй волны  $T^* \simeq 2010$  K. Численное решение соответствующей одномерной задачи отличается от приближенного решения лишь наличием структуры второй волны, ширина которой определяется параметром  $\tau$  в уравнении (4).

Исследуемое двумерное течение в конической мишени можно разделить на три стадии. Сначала графит превращается в алмаз в плоской двухволновой структуре и импульсе нагружения, идущем от боковой границы конуса. Характерной чертой этой стадии является кумулятивный эффект схлопывания нагружающего импульса на оси симметрии. В отсутствие волны разгрузки далее следует стадия вдавливания алмаза в мишень с почти постоянной скоростью. Существенную роль на этой стадии играет неустойчивость границы раздела углерода и мишени. Если эта стадия длится достаточно долго, то неустойчивость может полностью перемешать углерод с материалом мишени. Последней стадией является разгрузка углерода в волне разрежения, идущей от тыльной поверхности ударника.

Расчеты проводились с соотношением размеров  $H \geq R$ , так как случай удара тонкой пластиной с  $H \ll R$  не представляет интереса из-за быстрого проникновения волны разрежения в углерод, что приводит, в частности, к отсутствию кумулятивного эффекта.

## Кумулятивный эффект

Эволюция в плоскости  $(T, P)$  пяти лагранжевых частиц углерода, расположенных вдоль оси симметрии, для мишени с каналом и разных значений параметров кинетики фазового перехода показана на рис. 4. Параметры мишени  $H = R = 5$  mm,  $\vartheta = 60^\circ$ ,  $r_0 = 1$  mm. Частицы исходно располагались почти равномерно между границей с ударником и вершиной конуса, номера частиц растут от 1 до 5 по мере удаления от границы с ударником.

Прежде чем анализировать рис. 4, напомним, что для уравнений бездиссипативной гидродинамики (1) в области однофазного течения лагранжева частица в плоскости термодинамических переменных может перемещаться только по изоэнтропе, которая для твердых тел близка к изотерме, если только через частицу не проходит ударная волна. В случае ударной волны энтропия частицы может мгновенно увеличиться, после чего частица будет двигаться по другой изоэнтропе. В области фазового перехода движение частицы зависит от функции  $\alpha(t)$  и может быть более разнообразным.

Результаты расчетов, представленные на рис. 4, а, соответствуют параметрам высокоориентированного графита из работы [10]. Ширина области фазового перехода оказывается много меньше размеров мишени. Пока

импульс сжатия от боковой границы конуса не дошел до оси симметрии, течение вдоль оси представляет из себя описанную выше двухволновую структуру. Это видно на рис. 4, *a* по первым двум частицам, которые вначале сжимаются до давления начала фазового перехода  $P_0 = 21$  GPa, а затем попадают в состояние  $(T^*, P^*)$ . Дальнейшее возрастание давления связано с приходом на ось симметрии импульса сжатия от боковой границы конуса, после чего начинается разгрузка по изоэнтропе. Видно, что и увеличение давления в первых двух частицах происходит почти изоэнтропически без существенного роста температуры.

После схлопывания импульс сжатия догоняет вторую ударную волну. Это видно на рис. 4, *a* по трем последним частицам, через которые, так же как и через первые две, проходит двухволновая структура, но интенсивность второй волны заметно выше.

Точка  $(T^*, P^*)$  на рис. 4, *a* лежит выше границы быстрого превращения графита в алмаз, которое может протекать в условиях динамических экспериментов, согласно данным обзора [12], но ниже нижней границы области превращения ударно-сжатого графита в кубический алмаз, по оценке работы [13], в которой высказывается предположение, что при температурах и давлениях, не превышающих параметров этой кривой, графит может превратиться только в лонсдейлит. Это означает, что в плоской двухволновой структуре более вероятным является переход графита в лонсдейлит, а не в кубический алмаз. Однако в последующие моменты времени схлопывающийся на оси симметрии мишени импульс сжатия приводит к надежному попаданию лагранжевых частиц в область образования кубического алмаза. Заметим, что скорость графитизации при разгрузке для лонсдейлита значительно выше, чем для кубического алмаза [13].

Проводились также расчеты для изотропного искусственного графита с параметрами из работы [9] с характерным временем перехода  $\tau$ , примерно в 20 раз большим, чем для высокоориентированного графита. В этом случае ширина области перехода в плоской волне оказывается порядка размера мишени и превращение большей части графита завершается уже под действием волны сжатия, отраженной от боковой границы конуса. Для изотропного графита параметры кинетики фазового перехода можно считать примерно одинаковыми для плоской волны и импульса сжатия от боковой границы конуса. В то же время следует отметить некоторую приближенность решения задачи применительно к графиту из работы [9] из-за отсутствия учета пористости. Результат расчета представлен на рис. 4, *b*. Видно, что распределение параметров алмаза вдоль оси симметрии становится значительно более однородным и все лагранжевы частицы по-прежнему надежно попадают в область образования кубического алмаза. При увеличении размеров мишени эволюция лагранжевых частиц, как и следует ожидать, становится похожей на рис. 4, *a*.

Приведенные на рис. 4 траектории движения лагранжевых частиц в плоскости термодинамических переменных почти не меняются при увеличении толщины

Максимальное по времени давление для различных мишеней, GPa

Материал	$\vartheta, ^\circ$		
	60	75	90
Свинец	170	305	405
Алюминий	115	—	—
Алмаз	670	—	—

ударника  $H$ . Причина заключается в том, что указанные траектории в основном определяются той максимальной величиной энтропии, которую получает частица при ударном сжатии. Уже при  $H = R$  время прихода волны разгрузки от внешней границы ударника оказывается достаточно большим, чтобы эта волна существенно не влияла на ударное сжатие углерода. При увеличении  $H$  время прихода волны разгрузки только возрастает.

В случае мишени без канала интенсивность ударной волны вблизи вершины конуса значительно возрастает, что приводит даже к выходу пятой лагранжевой частицы за границу плавления алмаза.

Как отмечалось в работе [17], кумулятивный эффект на оси симметрии существенно зависит от угла раствора конуса  $\vartheta$  и материала, из которого сделана мишень. В качестве характеристики силы кумулятивного эффекта можно выбрать максимальное по времени давление, которое приведено в таблице для конических мишеней без канала с разными  $\vartheta$  и из различных материалов. При увеличении  $\vartheta$  от 60 до 90° кумулятивный эффект усиливается. Для алюминиевой мишени эффект ослаблен. Для алмазной мишени, которая выбрана в качестве примера мишени из сверхтвердого материала, эффект значительно возрастает.

## О влиянии формы мишени на развитие неустойчивости

В случае мишени с каналом существенную роль в развитии неустойчивости границы раздела углерода и мишени играет длина и форма переходной области между конусом и цилиндрическим каналом. В цилиндрических координатах  $(r, z)$  переходная область является линией, соединяющей прямые, отвечающие конусу и цилиндру. В качестве такой линии естественно выбрать окружность, касающуюся обоих прямых. Эта окружность определяется одним дополнительным параметром, в качестве которого удобно взять размер переходной области  $h$  — расстояние вдоль оси  $z$  между двумя точками касания.

При  $h = 0$  граница раздела имеет точку излома. Как известно, неустойчивость границы раздела сред при взаимодействии с ударной волной может начинаться с быстрого закручивания границы в окрестности точки излома. Аналогичное явление происходит и в данном случае. На рис. 5 приведены результаты расчетов для

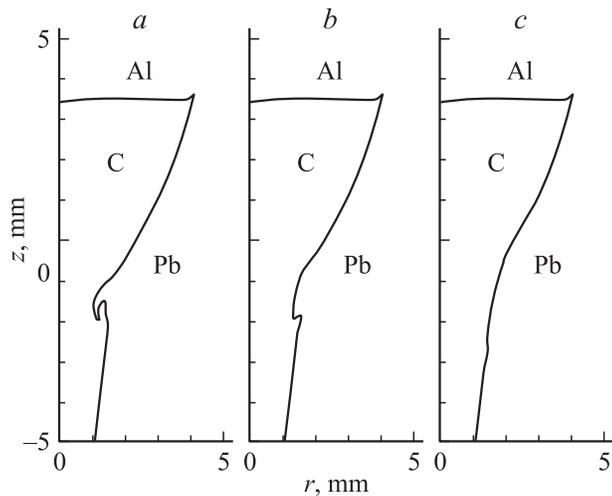


Рис. 5. Граница углеродного объема при  $t = 1.75 \mu\text{s}$ ,  $R = 5 \text{ mm}$ ,  $\vartheta = 60^\circ$ ,  $r_0 = 1 \text{ mm}$ ;  $h$ , mm:  $a - 0.5$ ,  $b - 1$ ,  $c - 2$ .

трех мишеней с разными значениями  $h$  в один и тот же момент времени. Видно, что если  $h$  невелико ( $h = 0.5r_0 = 0.5 \text{ mm}$ ), то на профиле границы образуется складка (рис. 5,  $a$ ). При  $h = r_0$  складка значительно уменьшается (рис. 5,  $b$ ), а при увеличении  $h$  до  $2r_0$  профиль границы к показанному на рис. 5,  $c$  моменту времени еще остается почти гладким.

С течением времени неустойчивость границы раздела развивается и при  $h = 2r_0$ . Дальнейшего ослабления неустойчивости удалось достичь в рамках более сложной схемы переходной области. Коническая поверхность переходит вначале не в цилиндр, а в другую коническую поверхность с небольшим углом раствора, которая в свою очередь переходит в цилиндрический канал. Такую мишень будем называть двухконической мишенью с каналом. Для мишени с  $R = 5 \text{ mm}$ ,  $\vartheta = 60^\circ$  и  $r_0 = 0.5 \text{ mm}$  прямая в плоскости  $(r, z)$ , отвечающая промежуточной конической поверхности, имела длину  $l = 8 \text{ mm}$  вдоль оси  $z$ , а радиус вдоль этой прямой уменьшался от  $r_1 \approx 1 \text{ mm}$  вблизи основного конуса до  $r_0$ . Прямые, отвечающие коническим поверхностям, гладко сопрягались дугой окружности размером  $h = 2 \text{ mm}$  вдоль оси  $z$ .

### Квазистационарное вдавливание

Пусть толщина ударника  $H \gg R$ . В этом случае время прихода волны разрежения к углероду, которое пропорционально  $H$ , намного превышает характерное время распространения возмущений внутри углеродного объема. В отсутствие волны разрежения последний вдавливается в мишень с почти постоянной скоростью. Процесс вдавливания сопровождается развитием неустойчивости границы раздела углерода и свинца. В соответствии с общей закономерностью развития такой неустойчивости (см., например, работу [24]) возникает область турбулентного перемешивания, размер которой со временем увеличивается. Тем не менее

можно предположить, что существует интервал времени, в течение которого неустойчивость границы раздела не оказывает существенного влияния на распределение термодинамических функций вдоль оси симметрии. Нахождение этого распределения и скорости вдавливания было целью расчетов, результаты которых приводятся ниже.

Имеется две трудности вычислительного характера, преодоление которых потребовало некоторого огрубления метода. Первая трудность связана с уже упоминавшейся неустойчивостью границы раздела. С течением времени на этой границе образуются точки самопересечения, что свидетельствует о начале стадии турбулентного перемешивания. Расчет этой стадии в рамках явного выделения границы раздела сред в виде линии сетки, очевидно, невозможен. Огрубление метода заключалось в искусственном ограничении на развитие неустойчивости. Сеточной линии, являющейся границей раздела, запрещается иметь угол  $\varphi$  с осью  $r$  больше некоторого заданного  $\varphi_{\text{max}}$ . Положительное направление вдоль линии определено так, что для начального положения границы  $\varphi < 0^\circ$ . Например, для границы цилиндрического канала на рис. 3  $\varphi = -90^\circ$ .

Проводились контрольные расчеты с разными значениями  $\varphi_{\text{max}}$  с целью оценки влияния такого огрубления на точность расчета течения вблизи оси симметрии. Один из результатов таких контрольных расчетов для  $\varphi_{\text{max}} = 0$  и  $45^\circ$  приведен на рис. 6. Видно, что для показанного момента времени на границе углерода и свинца есть по крайней мере один участок, где разные ограничения неустойчивости приводят к заметно разным профилям границы (рис. 6,  $a$ ). Тем не менее распределения давления вдоль оси симметрии для этих двух расчетов отличаются незначительно (рис. 6,  $b$ ).

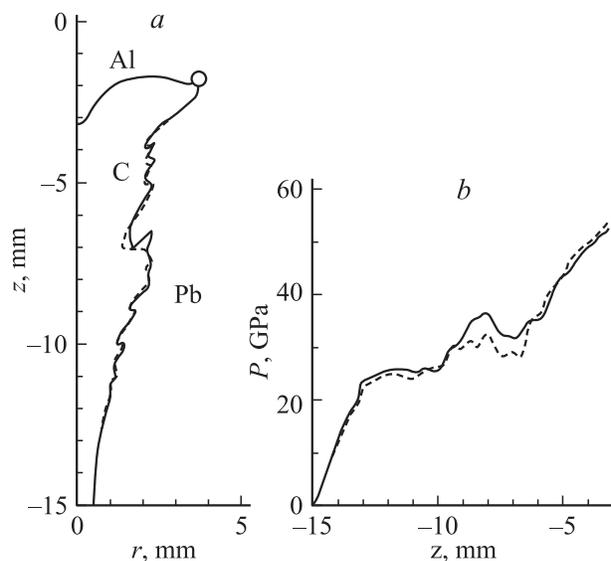
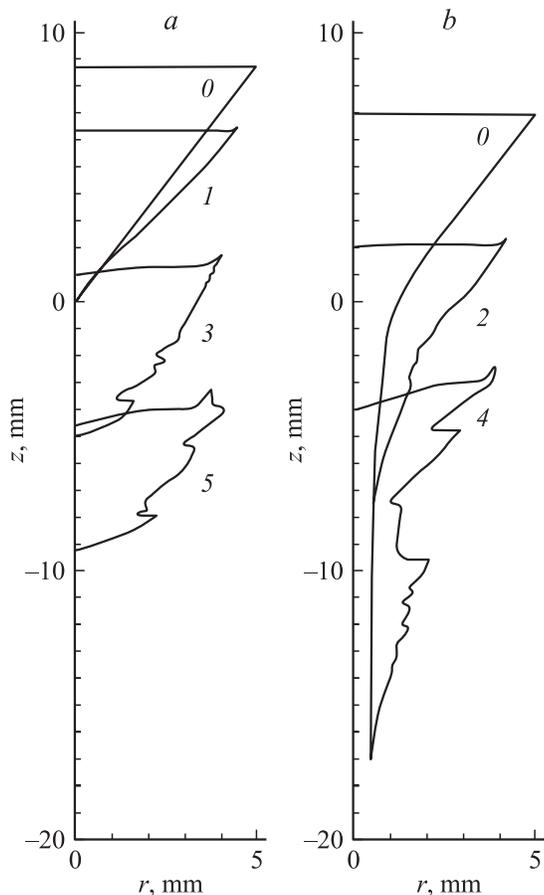


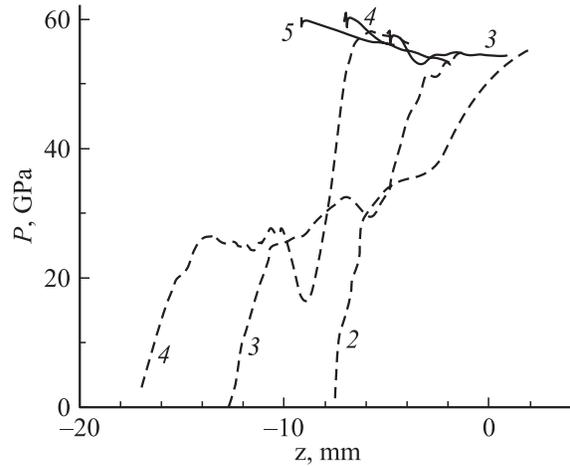
Рис. 6. Сравнение расчетов границы углеродного объема ( $a$ ) и давления вдоль оси симметрии мишени ( $b$ ) при  $\varphi_{\text{max}} = 0$  (штриховая кривая) и  $45^\circ$  (сплошная кривая).

Другая трудность, для преодоления которой пришлось пойти на огрубление метода, связана с угловой точкой границы углерода, где пересекаются границы с алюминием и свинцом (эта точка показана кружком на рис. 6, а). С течением времени угол пересечения границ уменьшается, что приводит к уменьшению шага по времени. Поэтому приходится искусственно ограничивать этот угол априорно задаваемой величиной. Такое огрубление метода также не сказывается существенно на точности расчета вблизи оси симметрии.

Результаты расчета вдавливания с  $\varphi_{\max} = 0$  для описанной выше двухконической мишени с каналом и аналогичной конической мишени без канала с  $r = 5$  mm,  $\vartheta = 60^\circ$  представлены на рис. 7 и 8. Видно, что в обоих случаях на границе раздела (рис. 7) имеются точки, где описанный выше искусственный прием существенно ограничивает неустойчивость. Естественно предположить, что в окрестности этих точек поток закручивается и образуется область турбулентного перемешивания. Профили распределения давления вдоль оси симметрии (рис. 8) слабо меняются со временем, однако существенно различны для разных мишеней. Для мишени без канала изменение давления вдоль оси происходит в узком диапазоне значений  $P \approx 55\text{--}69$  GPa, а для мишени



**Рис. 7.** Граница углеродного объема в различные моменты времени (цифры,  $\mu\text{s}$ ) для мишеней без канала (а) и с каналом (б) при воздействии ударника с  $H \gg R$ .



**Рис. 8.** Давление вдоль оси симметрии мишеней без канала (сплошные кривые) и с каналом (штриховые кривые) в различные моменты времени (цифры,  $\mu\text{s}$ ) при  $H \gg R$ .

с каналом величина давления вдоль оси меняется в более широких пределах: от  $P \approx 50\text{--}55$  GPa вблизи ударника до  $P \approx 25\text{--}30$  GPa за фронтом головной волны, идущей по каналу. Существенно различной оказывается также скорость вдавливания:  $\sim 2$  km/s для мишени без канала,  $\sim 4.5$  km/s — с каналом.

## Волна разгрузки

Пусть теперь толщина ударника  $H = R$ . В этом случае разгрузка углерода начинается почти одновременно с завершением действия кумулятивного эффекта. Профили границы углеродного объема в разные моменты времени приведены на рис. 9. Действие волны разрежения видно из сравнения этих профилей с соответствующими профилями на рис. 7, где эта волна отсутствует. Уменьшение со временем радиального размера углеродного объема говорит о существенно неоднородном характере разгрузки. В случае мишени с каналом результаты расчета позволяют предположить, что разгрузка может сопровождаться пережатием канала и образованием двух изолированных углеродных объемов.

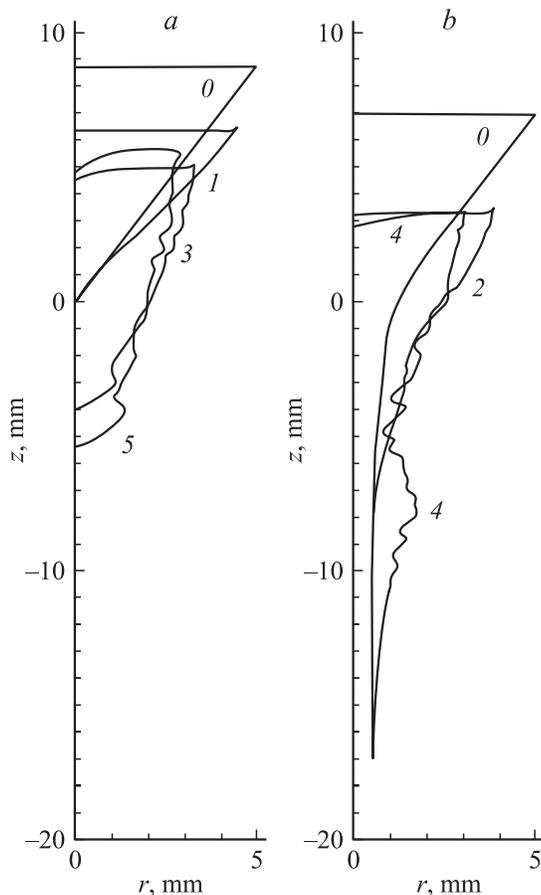
При отражении волны разгрузки от границы алюминия и свинца расчет дает в алюминии область с очень большим по величине отрицательным давлением ( $P < -5$  GPa), что свидетельствует о возможности возникновения откола в соответствующем реальном течении (см., например, работу [25]).

Для оценки степени его влияния на разгрузку углерода проводился следующий вычислительный эксперимент. Вводилось критическое давление  $P_{\min} < 0$ . Если в какой-либо ячейке сетки давление становилось  $P < P_{\min}$ , то эта ячейка выбрасывалась из расчета, а на ее границе задавалось атмосферное давление. Расчеты проводились при различных значениях  $P_{\min}$  в диапазоне от  $-3$  до  $-1$  GPa. Несмотря на появление большого

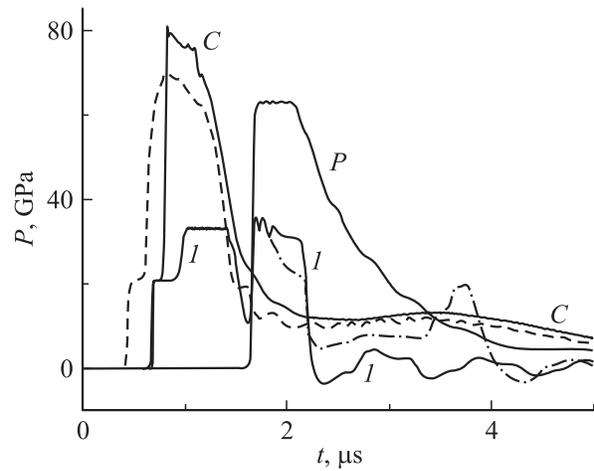
числа выброшенных ячеек, включая ту часть ударника, которая расположена над углеродным объемом, внутри углеродного объема сколько-нибудь заметных изменений параметров течения не было.

Зависимости давления в некоторой лагранжевой частице от времени для конических мишеней с каналом и без канала приведены на рис. 10 в сравнении с решением одномерной задачи, в которой ударник налетает на слой графита, лежащий на полубесконечной свинцовой подложке. Толщина графитового слоя равняется высоте конуса  $R/\operatorname{tg}(\vartheta/2)$ . Первоначально частица располагается примерно посередине высоты конуса для мишени без канала и посередине слоя графита в одномерной задаче. Для конической мишени с каналом выбрана частица, первоначально расположенная несколько выше середины высоты конуса, так чтобы характер изменения давления в ней был аналогичен частице в мишени без канала. Для мишени с каналом давление в частице, первоначально расположенной посередине высоты конуса, заметно выше из-за упомянутого выше эффекта пережатия канала.

Видно, что разгрузка плоского слоя качественно отличается от разгрузки конической мишени. Для конической мишени давление в частице уменьшается медленно и



**Рис. 9.** Граница углеродного объема в различные моменты времени (цифры,  $\mu\text{s}$ ) для мишеней без канала (а) и с каналом (б).



**Рис. 10.** Зависимость давления в лагранжевой частице от времени. *C* — двухмерный расчет конических мишеней без канала (сплошная кривая) и с каналом (штриховая); *I* — одномерный расчет с учетом (сплошная кривая) и без учета откола (штрихпунктир); *P* — одномерная задача со свинцом вместо углерода.

остается  $P \sim 7 \text{ GPa}$  при  $t = 5 \mu\text{s}$ . Для плоского слоя графита давление падает до нуля уже при  $t \approx 2.2 \mu\text{s}$ . Отметим также сильное влияние откола в ударнике на эволюцию давления в плоском слое.

Была решена также одномерная задача с однородной свинцовой мишенью без углерода. Результат расчета показан на рис. 10 для некоторой лагранжевой частицы, расположенной примерно на той же глубине, что и частица углерода в конической мишени с учетом ее вдавливания в мишень. Видно, что зависимость давления от времени в свинцовой частице качественно такая же, как и в частице углерода в конической мишени. Отметим еще одно совпадение. Разгрузка свинца, как и разгрузка углерода в конической мишени, практически не зависит от того, учитывается или нет откол в алюминиевом ударнике. Все это позволяет сделать важный вывод о том, что разгрузка углерода в конической свинцовой мишени определяется в основном свойствами свинца, а не углерода.

## Заключение

На начальной стадии сжатия определяющую роль играет кумулятивный эффект на оси симметрии, интенсивностью которого можно в широких пределах управлять с помощью угла раствора конуса и выбора материала мишени.

Сравнение результатов расчета с имеющимися в литературе данными по фазовой диаграмме углерода показало, что в результате действия кумулятивного эффекта углерод вблизи оси симметрии надежно попадает в область образования кубического алмаза.

Наличие в мишени выводящего канала делает действие кумулятивного эффекта более однородным по оси симметрии. Наиболее однородное воздействие кумуляции достигается в том случае, когда ширина области протекания фазового перехода в головной плоской волне оказывается порядка размера конической полости и образование алмазной фазы завершается в схлопывающемся импульсе давления. Такая ситуация возникает в мишени с радиусом основания конуса  $R \sim 5 \text{ mm}$  для изотропного графита со сравнительно большим характерным временем превращения.

На поздней стадии эволюции углеродного объема существенную роль играет неустойчивость границы углерода и мишени. Для мишени с каналом отсутствие плавного перехода от конуса к каналу приводит к быстрому развитию неустойчивости. В какой-то степени неустойчивостью границы углерода и мишени можно управлять за счет выбора профиля конической мишени и, возможно, материала мишени.

В случае толстых ударников углеродный объем до прихода волны разрежения вдавливаются в мишень с почти постоянной скоростью. Вдавливание происходит на фоне развития неустойчивости, которая со временем может привести к полному перемешиванию углерода с материалом мишени. Это делает нецелесообразным использование слишком толстых ударников и слишком длинных каналов.

Определены скорость вдавливания для свинцовой мишени без канала и с каналом, а также распределение давления вдоль оси симметрии, которое существует пока неустойчивость границы раздела не оказывает на него заметного влияния.

Исследована стадия разгрузки углерода под действием волны разрежения от внешней границы ударника с учетом грубого моделирования откола. Показано, что разгрузка углерода в конической свинцовой мишени определяется в основном свойствами материала обкладки, а не образца. В частности, откол в ударнике не влияет на разгрузку углерода.

В работе не рассмотрен случай мишени с отверстием в вершине конуса, но без канала, т.е. с выходом образовавшегося алмазного объема в среду с атмосферным давлением. Можно предположить, что в этом случае произойдут быстрое разрушение алмазного образца на мельчайшие частицы, их резкое охлаждение и разлет. Обычно наблюдающееся в таких случаях замораживание степеней свободы, т.е. достигнутого состояния, должно воспрепятствовать графитизации алмазных частиц. В результате на выходе можно получить ультрадисперсный алмазный порошок, представляющий самостоятельную техническую ценность. Заметим, что проблема торможения разлетающихся алмазных частиц без их повторного значительного разогрева и соответственно возможной графитизации представляется принципиально разрешимой, поскольку, как известно [26], даже вход в атмосферу Земли с космическими скоростями частиц межпланетной пыли в некотором интервале размеров частиц может происходить без их сильного разогрева.

Общий вывод из представленных результатов состоит в том, что получение искусственных алмазов в конических мишенях вполне возможно. В связи с этим представляется целесообразным проведение физического эксперимента с такими мишенями. Организация подобного эксперимента не кажется слишком сложным делом.

Авторы благодарны А.З. Жуку и В.В. Милявскому за обсуждение полученных результатов и ценные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 00-01-00551, 03-02-16687) и Российской академии наук (грант № 31 6-го конкурса-экспертизы молодых ученых 1999 г.). Авторам также приятно выразить свою благодарность Фонду содействия отечественной науке.

## Список литературы

- [1] *De Carli P.S., Jamieson J.C.* // Science. 1961. Vol. 133. N 3467. P. 1821–1822.
- [2] *Alder B.J., Christian R.H.* // Phys. Rev. Lett. 1961. Vol. 7. N 10. P. 367–369.
- [3] *Павловский М.Н., Дракин В.П.* // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т. 4. Вып. 5. С. 169–170.
- [4] *Bundy H.P., Kasper J.S.* // J. Chem. Phys. 1967. Vol. 46. N 9. P. 3437–3446.
- [5] *Duval G.E., Graham R.A.* // Rev. Mod. Phys. 1977. Vol. 49. N 3. P. 523–579.
- [6] *Курдюмов А.В., Пилянкевич А.Н.* Фазовые превращения в углероде и нитриде бора. Киев: Наукова думка, 1979.
- [7] *Gust W.H.* // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 22. N 6. P. 4744–4756.
- [8] *Гозуля М.Ф.* // ФГВ. 1989. Т. 25. № 1. С. 95–104.
- [9] *Жук А.З., Иванов А.В., Канель Г.И.* // ТВТ. 1991. Т. 29. № 3. С. 486–493.
- [10] *Erskine D.J., Nellis W.J.* // J. Appl. Phys. 1992. Vol. 71. N 10. P. 4882–4886.
- [11] *Курдюмов А.В., Малоголовец В.Г., Новиков Н.В., Пилянкевич А.Н., Шульман Л.А.* Полиморфные модификации углерода и нитрида бора. М.: Металлургия, 1994.
- [12] *Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S., Hemley R.J., Mao H.K., Goncharov A.F.* // Carbon. 1996. Vol. 34. N 2. P. 141–153.
- [13] *Vlodarchik E., Trebinski R.* // Shock Waves. 1997. Vol. 7. P. 231–248.
- [14] *Жугин Ю.Н., Крупников К.К., Таржанов В.И.* // Хим. физика. 1999. Т. 18. № 5. С. 96–101.
- [15] *Павловский М.Н., Хищенко К.В., Жерноклетов М.В., Ломоносов И.В., Симаков Г.В., Фортов В.Е.* // Физика экстремальных состояний вещества — 2001 / Под ред. В.Е. Фортова и др. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2001. С. 96–97.
- [16] *Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V., Pavlovskii M.N., Simakov G.V., Zhernokletov M.V.* // Shock Compression og Condensed Matter — 2001 / Ed. by M.D. Furnish, N.N. Thadhani, Y. Horie. New York: AIP, 2002. P. 759–762.
- [17] *Ломоносов И.В., Фортов В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чарахчян А.А., Шуршалов Л.В.* // ДАН. 1998. Т. 360. № 2. С. 199–201.

- [18] *Хищенко К.В., Ломоносов И.В., Фортвов В.Е.* // Физика экстремальных состояний вещества — 2001 / Под ред. В.Е. Фортвова и др. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2001. С. 94–96.
- [19] *Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V.* // Int. J. Thermophys. 2003. Vol. 24.
- [20] *Павловский М.Н.* // ФТТ. 1971. Т. 13. Вып. 3. С. 893–895.
- [21] LAST Shock Hugoniot Data / Ed. S.P. Marsh. Berkeley: University of California Press, 1980.
- [22] *Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортвов В.Е.* Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка: ИХФ АН СССР, 1988.
- [23] *Нигматулин Р.И.* Механика многофазных сред. М.: Наука, 1987.
- [24] *Неуважаев В.Е.* // Мат. моделирование. 1991. Т. 3. № 7. С. 10–28.
- [25] *Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортвов В.Е.* Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
- [26] *Браунли Д.Е.* // Кометы и происхождение жизни. М.: Мир, 1984. С. 69–77.