

05:01

О возможности получения искусственных алмазов в конических мишенях

И.В.Ломоносов¹, В.Е.Фортвов², А.А.Фролова³, К.В.Хищенко²,
А.А.Чарахчьян³, Л.В.Шуршалов³

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

²Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН, Москва

³Вычислительный центр РАН, Москва

Численно исследуется сжатие углерода в конической свинцовой мишени с помощью алюминиевых ударников, имеющих скорость 4 км/с. . Постановка задачи включает в себя уравнения гидродинамики сжимаемых сред, широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния и кинетическую модель неравновесного превращения графита в алмаз, откалиброванную с учетом известных экспериментальных данных. На стадии разгрузки грубо моделируется явление откола. Рассматривается как простая коническая мишень, так и мишень с выводющим каналом. Исследуются все стадии процесса от кумулятивного эффекта на оси симметрии мишени до стадии разгрузки углерода, вызванной приходом волны разрежения от внешней границы ударника.

В работе [1] 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 плоском сжатии. Наконец, имеется простая возможность организации в вершине конической мишени выводящего профилированного канала для извлечения подвергнувшегося испытанию образца и доведения его до нужных кондиций (на разрушающей разгрузке, необходимого охлаждения и торможения).

Первые результаты численного моделирования, приведенные в [1], не учитывали превращения графита в алмаз и, кроме того, относились лишь к изучению возникающего на начальной стадии сжатия кумулятивного эффекта. В настоящей работе постановка задачи включает в себя модель кинетики фазового превращения графита в алмаз. Основное исследование выполнено с использованием модели, отвечающей экспериментам [2] с высокоориентированным пиролитическим графитом. Отдельные расчеты, демонстрирующие влияние сорта графита на характер течения, были выполнены в рамках модели, отвечающей экспериментам [3] с изотропным искусственным графитом. Построены новые полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния графита и алмаза. Исследуются все стадии течения, включая стадию разгрузки. Рассмотрены два вида мишеней. Коническая мишень без канала и с длинным цилиндрическим каналом, в который плавно переходит конус.

Остановимся на некоторых особенностях реального течения, которые не учитываются в постановке задачи. Как известно, при ударном нагружении графита может образовываться как гексагональный алмаз (лонсдейлит), так и обычный алмаз с кубической решеткой. В постановке задачи не делается различия между этими фазами, которые описываются одним и тем же уравнением состояния. Другим недостатком постановки является отсутствие учета обратного превращения алмаза в графит (графитизации). Одна из трудностей создания соответствующей модели заключается в том, что количественные характеристики кинетики графитизации существенно различаются для алмаза и лонсдейлита [4]. Укажем также, что постановка задачи не учитывает теплопроводность, что связано с отсутствием надежных

данных о коэффициенте теплопроводности в требуемом диапазоне изменения термодинамических функций. 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.

Постановка задачи и численный метод

Рассматриваемая задача схематично показана на рис. 1. Свинцовая мишень (отдельные расчеты выполнены и для мишеней из других материалов) занимает полупространство и имеет осесимметричную полость, заполненную графитом. Рассматривались два вида полости: простой конус (сплошная линия на рис. 1) и конус, переходящий в цилиндрический канал (штриховая линия). Радиус полости на поверхности мишени R , угол раствора конуса ϑ , радиус цилиндрического канала r . На мишень со скоростью v налетает алюминиевый ударник толщиной H .

По сравнению с реальными мишенями, из рассматриваемой постановки задачи исключены боковая и тыльная граница мишени. Предполагается, что эти границы достаточно далеко удалены от сжимаемого в мишени графита, разгрузка которого определяется только волной разрежения от внешней границы ударника, возникающей после выхода на эту границу ударной волны.

Течение описывается уравнениями гидродинамики сжимаемых сред

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \quad \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \nabla p = 0, \quad \rho \frac{d(\varepsilon + \mathbf{u}^2/2)}{dt} + \operatorname{div} p\mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

где $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \nabla$ — лагранжева производная по времени, \mathbf{u} — вектор скорости, ρ — плотность, p — давление, ε — удельная внутренняя энергия. В алюминии и свинце уравнения (1) замыкаются полуэмпи-

рическими термодинамически равновесными уравнениями состояния [5]

$$p = p(\rho, T), \quad \varepsilon = \varepsilon(\rho, T), \quad (2)$$

где T - температура.

Углерод предполагается состоящим из двух фаз — графита и алмаза. Рассматривается модель [6,7], когда смесь двух фаз неравновесна, а каждая фаза находится в локальном термодинамическом равновесии и описывается уравнениями состояния типа (2)

$$p_1 = p_1(\rho_1, T), \quad \varepsilon_1 = \varepsilon_1(\rho_1, T); \quad p_2 = p_2(\rho_2, T), \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_2(\rho_2, T), \quad (3)$$

где индекс 1 относится к алмазу, 2 — к графиту. Вводится новая неизвестная функция α — массовая доля алмаза. Обе фазы имеют в каждой точке течения одинаковые давление и температуру, а внутренняя энергия и удельный объем $\nu = \rho^{-1}$ смеси являются аддитивными функциями соответствующих величин каждой фазы. В результате приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} p &= p_1(\rho_1, T) = p_2(\rho_2, T), \\ \varepsilon &= \alpha\varepsilon_1(\rho_1, T) + (1 - \alpha)\varepsilon_2(\rho_2, T), \\ \rho^{-1} &= \alpha\rho_1^{-1} + (1 - \alpha)\rho_2^{-1}. \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнения (1), (3), (4) замыкаются уравнением для α , которое определяет кинетику фазового перехода.

Как известно, основные параметры фазового перехода в ударных волнах, которыми являются характерное время этого перехода τ и давление 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 [2], с $P_0=19,5$ ГПа и $\tau < 10$ нс.

Рассматривались два уравнения для α . Одно из них, взятое из работы [3], имеет вид

$$\frac{d\alpha}{dt} = \begin{cases} 0, & p \leq P_0, \\ (1 - \alpha)(p - P_0)/\tau P_0, & p > P_0. \end{cases} \quad (5)$$

В расчетах полагалось $\tau=5$ нс. Для рассматриваемых не слишком маленьких мишеней с $R \geq 5$ мм дальнейшее уменьшение τ не меняло результатов расчета, так как уже при $\tau=5$ нс толщина области фазового перехода оказывалась много меньше характерных размеров задачи. Множитель $(p - P_0)/P_0$ в (5) отражает тот факт, что время фазового перехода уменьшается с увеличением давления.

Несколько иное уравнение было предложено в [4].

$$\frac{d\alpha}{dt} = [\alpha_m(p) - \alpha]A \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon}{RT}\right). \quad (6)$$

Здесь функция $\alpha_m(p)$ построена по экспериментальным данным и определяет предельное значение α при данном p ; A — постоянная; $\Delta\varepsilon$ — так называемый энергетический барьер перехода, который в [4] вычисляется с помощью изотермы $T = 0$ графита, а в настоящей работе полагается равным разности внутренних энергий графита и алмаза; R - газовая постоянная, деленная на атомный вес углерода. В отличие от (5), уравнение (6) построено на предположении, что время фазового перехода уменьшается с увеличением температуры, а не давления. В [4] рекомендуется значение $A = 600$ мкс⁻¹, выбранное на основании сравнения расчетов с экспериментальными данными [2].

Как было найдено в [1], характерной чертой возникающего в конической мишени течения является импульс сжатия, распространяющийся по углероду от границы со свинцом и схлопывающийся на оси симметрии. Кинетика фазового превращения в таком импульсе может значительно отличаться от экспериментов с плоскими ударными волнами. Тем не менее для высокоориентированного графита из [2] и скорости ударника $v \geq 4$ км/с рассмотренные выше модели фазового перехода остаются адекватными реальному течению, поскольку

толщина фронта фазового перехода оказывается меньше 0,5 мм, а давление за фронтом p_* таково, что $\alpha_m(p_*)$ в (6) близко к единице. Для не слишком маленьких мишеней с $R \geq 5$ мм фазовый переход практически полностью заканчивается в головной плоской волне, а дополнительный импульс сжатия распространяется уже по алмазной фазе. Заметим, что в этом случае решение можно считать независимым от структуры фронта фазового перехода и, тем самым, от того, какое уравнение, (5) или (6), участвует в постановке задачи.

Расчеты выполнялись с помощью того же пакета программ, что и в [1], использующего квазимонотонные разностные схемы второго порядка точности на подвижных регулярных сетках с явным выделением границ раздела сред в виде линий сетки. Общее число ячеек сетки колебалось в пределах 25 - $35 \cdot 10^3$, из которых на углерод приходилось примерно 5000 ячеек для мишени без канала и 9 - $11 \cdot 10^3$ ячеек для мишени с каналом.

Дополнительная трудность вычислительного характера, возникающая при учете кинетики фазового перехода, заключается в появлении численных колебаний в тех случаях, когда размер ячеек сетки значительно превышает ширину области фазового перехода. В применении к уравнению (5) был найден эффективный прием уменьшения этих колебаний, который заключается в совместном решении уравнений (3), (4) и разностной аппроксимации уравнения (5) при заданных ρ и ε на каждом шаге по времени. В случае уравнения (6) такой прием оказался менее эффективным. В некоторых случаях колебания численного решения не удавалось снизить до приемлемого уровня. Поэтому при проведении массовых расчетов предпочтение было отдано уравнению (5).

Результаты расчетов

Рассмотрим вначале плоскую одномерную задачу об ударе по графиту. Приближенное решение этой задачи в виде системы ударных волн может быть получено аналогично тому, как это делается при решении

задачи о распаде разрыва для однофазных течений. Дополнительная трудность связана с возможностью появления в углероде двухволновой структуры (см., например, [2,3]).

Первая ударная волна идет по графиту и поднимает давление до давления начала фазового перехода P_0 . Остальные параметры за фронтом первой волны и ее скорость D_1 определяются из ударной адиабаты графита. Во второй волне происходит фазовый переход. В случае уравнения (6) приближенное решение вообще говоря должно учитывать возможность неполного превращения графита в алмаз, что определяется значением функции $\alpha_m(p)$ за фронтом второй волны. Параметры за фронтом второй волны и ее скорость D_2 определяются из замкнутой системы алгебраических уравнений, в которую входят условия Гюгонио для этой волны, условия Гюгонио для волны в алюминии, и условие непрерывности давления и скорости на контактной поверхности. Условие существования двухволновой структуры $D_1 > D_2$ реализуется при давлении за фронтом второй волны p_* меньшим некоторого критического значения.

Для скорости алюминиевого ударника $v = 4$ км/с описанный выше расчет в предположении полного перехода графита в алмаз во второй волне дает двухволновую структуру с $D_1 \approx 6,7$ км/с, $D_2 \approx 5,8$ км/с; $p_* \approx 33$ ГПа, температура алмаза за фронтом второй волны $T_* \approx 1940$ К. Так как $\alpha_m(p_*) \approx 0,99$ близко к единице, найденное решение можно рассматривать в качестве приближенного и в случае уравнения (6). Численное решение соответствующей одномерной задачи в рамках уравнений (1)-(4), (5) или (6) отличается от описанного выше приближенного решения лишь наличием структуры второй волны, ширина которой определяется параметром τ в уравнении (5) или параметром A в уравнении (6).

Приближенное решение в виде системы ударных волн позволяет легко выбирать подходящую скорость ударника в зависимости от материала, из которого он сделан. Например, для медных ударников, использованных в эксперименте [2], такая же двухволновая структура в углероде возникает при $v \approx 3,1$ км/с.

Все приводимые ниже результаты относятся к алюминиевому ударнику, имеющему скорость $v = 4$ км/с.

Процесс сжатия и разгрузки углерода в конической мишени можно разделить на три стадии. На начальной стадии углерод сжимается в головной плоской волне (или двухволновой структуре) и импульсе сжатия, идущим от боковой границы конуса. Характерной чертой этой стадии является кумулятивный эффект схлопывания импульса сжатия на оси симметрии. В отсутствие волны разгрузки за стадией сжатия следует стадия вдавливания углерода 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 внешней границы ударника.

Возникающее течение существенно зависит от толщины ударника. Случай тонких ударников $H \ll R$ не представляет интереса из-за быстрого проникновения волны разрежения в углерод, что приводит, в частности, к отсутствию кумулятивного эффекта. Поэтому расчеты проводились для $H \geq R$.

Кумулятивный эффект. На рис. 2 показана эволюция в плоскости (T, p) пяти лагранжевых частиц углерода, расположенных вдоль оси симметрии, для простой конической мишени и мишени с каналом. Параметры мишени $H = R = 5$ мм, $\vartheta = 60^\circ$, $r = 1$ мм (для мишени с каналом). Частицы пронумерованы цифрами от 1 до 5 и первоначально размещались почти равномерно между основанием и вершиной конуса. Номер частицы возрастает по мере приближения ее положения к вершине конуса. Символом «*» показана точка T_*, p_* из решения одномерной задачи.

Прежде чем анализировать рис. 2 напомним, что для уравнений бездиссипативной гидродинамики (1) в области однофазности течения лагранжева частица в плоскости термодинамических переменных может перемещаться только по изэнтропе, 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 новой изэнтропе. В области фазового перехода движение частицы зависит от функции $\alpha(t)$ и может быть более разнообразным.

Пока импульс сжатия от боковой границы конуса не дошел до оси симметрии, течение вдоль оси представляет из себя описанную выше двухволновую структуру. На рис. 2 это отчетливо видно по первым двум частицам, которые вначале сжимаются до давления начала фазового перехода $P_0 = 19,5$ ГПа, а затем попадают в состояние T_*, p_* . Дальнейшее увеличение давления связано с приходом на ось симметрии импульса сжатия от боковой границы конуса, после чего начинается разгрузка по изэнтропе. Видно, что и увеличение давления в первых двух частицах происходит почти изэнтропически без существенного увеличения температуры.

После схлопывания импульс сжатия догоняет вторую ударную волну. На рис. 2 это видно по третьей частице, через которую, так же, как и через первые две частицы, проходит двухволновая структура, но интенсивность второй волны заметно выше. Вместе с увеличением интенсивности второй волны увеличивается ее скорость. Вторая волна догоняет первую и двухволновая структура исчезает. Это видно по эволюции двух последних частиц, которые испытывают одно ударное сжатие с последующим уменьшением давления по изэнтропе.

Штриховыми линиями на рис. 2 нанесены взятые из литературы границы фазовых переходов углерода. Линия AD — термодинамически равновесная граница перехода между графитом и алмазом; ABC — граница быстрого перехода между графитом и алмазом, который может реализовываться в динамических экспериментах; AE и AF — кривые плавления соответственно графита и алмаза. Указанные выше границы взяты из обзора [8]. Линия VT — граница области перехода графита в кубический алмаз в динамических экспериментах по оценке работы [4]. Как полагают авторы [4], ниже этой линии возможен переход графита только в лонсдейлит.

Точка «*» на рис. 2 лежит выше линии ABC, но ниже линии VT. Это

означает, что в плоской волне при рассматриваемой скорости ударника более вероятным является переход графита в лонсдейлит, а не в кубический алмаз. Схлопывающийся на оси симметрии импульс сжатия приводит к надежному попаданию лагранжевых частиц на рис. 2 в область образования кубического алмаза. Заметим, что скорость графитизации при разгрузке для лонсдейлита значительно выше, чем для кубического алмаза [4].

Интенсивность ударной волны возрастает по мере приближения к вершине конуса. В случае простой конической мишени это приводит даже к плавлению алмаза вблизи основания конуса, как это видно по поведению пятой частицы на рис. 2а. В случае мишени с каналом интенсивность ударной волны возрастает не так сильно. В результате алмаз везде остается в твердом состоянии.

Как отмечалось в [1], кумулятивный эффект на оси симметрии существенно зависит от угла раствора конуса ϑ и материала, из которого сделана мишень. В качестве характеристики силы кумулятивного эффекта можно выбрать максимальное по времени давление, которое приведено в таблице для простых конических мишеней без канала с разными ϑ и из разных материалов. При увеличении ϑ от 60° до 90° кумулятивный эффект усиливается. В случае алюминиевой мишени по сравнению с аналогичной свинцовой кумулятивный эффект ослаблен. Для алмазной мишени, которая выбрана в качестве примера мишени из сверхтвердого материала, кумулятивный эффект значительно возрастает.

Напомним, что приведенные выше результаты относились к высокоориентированному графиту с маленькой шириной области фазового перехода. Значения параметров в уравнении (5) $P_0=19,5$ ГПа, $\tau =5$ нс. Проводились расчеты и для других значений этих параметров, в частности для $P_0=24$ ГПа, $\tau =0,09$ мкс, которые отвечают изотропному искусственному графиту из эксперимента [3]. В этом случае для мишени с $R = 5$ мм ширина фронта фазового перехода в плоской волне оказывается порядка размера мишени. В результате фазовый переход частично происходит под действием импульса сжатия, идущего

от боковой границы конуса. В случае изотропного графита можно надеяться на отсутствие существенных изменений параметров кинетики фазового перехода в таком импульсе по сравнению с плоской волной. Отметим некоторое ухудшение точности рассматриваемой модели в применении к графиту из [3] из-за отсутствия учета пористости. Тем не менее представляемый на рис. 3 результат заслуживает внимания. Рассматриваются две мишени с каналом. Первая мишень (рис. 3а) такая же, как и в расчете, результат которого показан на рис. 2б ($R = 5$ мм, $\vartheta = 60^\circ$, $r = 1$ мм). Во второй мишени (рис. 3б) все геометрические размеры увеличены в 4 раза. Толщина ударника для обеих мишеней $H = R$. Параметры двухволновой структуры изменились незначительно: $D_1 \approx 7,1$ км/с, $D_2 \approx 5,4$ км/с, $p_* \approx 33,5$ ГПа, $T_* \approx 2060$ К.

Видно, что в первой мишени, где схлопывание импульса на оси симметрии происходит внутри фронта еще не завершено фазового перехода, 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 следовало ожидать, становится похожей на рис. 2б.

Приведенные на рис. 2 и 3 траектории движения лагранжевых частиц в плоскости термодинамических переменных почти не меняются при увеличении толщины ударника H . Причина заключается том, что 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. Дальнейшее увеличение H еще больше увеличивает время прихода волны разгрузки. В то же время указанные траектории в основном определяются той максимальной энтропией, которую получает частица при ударном сжатии.

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 ци-

линдрических координатах (r, z) переходная область является кривой, соединяющей прямые, отвечающие конусу и цилиндру. В качестве такой кривой естественно взять окружность, касающуюся обоих прямых. Эта окружность определяется одним дополнительным параметром, в качестве которого удобно взять длину области перехода h , равную расстоянию вдоль оси z между двумя точками касания.

При $h = 0$ граница раздела имеет точку излома. Известно, что 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. 4 приведены результаты расчета для трех мишеней с разными значениями h в один и тот же момент времени. Видно, что если $h = 0,5 \text{ мм} = 0,5r$ невелико, то на профиле границы образуется складка. При $h = r$ складка значительно уменьшается, а при увеличении h до $2r$ профиль границы к показанному на рис. 4 моменту времени еще остается почти гладким.

С течением времени неустойчивость границы раздела развивается и при $h = 2r$. 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 $R = 5 \text{ мм}$, $\vartheta = 60^\circ$ и $r = 0,5 \text{ мм}$ прямая в плоскости (r, z) , отвечающая промежуточной конической поверхности, имела длину $l = 8 \text{ мм}$ вдоль оси z , а радиус вдоль этой прямой уменьшался от $r_1 \approx 1 \text{ мм}$ вблизи основного конуса до r . Прямые, отвечающие коническим поверхностям, гладко сопрягались дугой окружности размером $h = 2 \text{ мм}$ 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, [9]), 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.

Имеются 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 линией, являющейся границей раздела, запрещается иметь угол φ с осью r больше некоторого заданного φ_{\max} . Положительное направление вдоль линии определено так, что для начального положения границы $\varphi < 0$. Например, для границы цилиндрического канала на рис. 1 $\varphi = -90^\circ$.

Проводились контрольные расчеты с разными значениями φ_{\max} с целью оценки влияния такого огрубления на точность расчета течения вблизи оси симметрии. Один из результатов таких контрольных расчетов приведен на рис. 5 для $\varphi_{\max} = 0^\circ$ и $\varphi_{\max} = 45^\circ$. 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. Тем не менее распределения давления вдоль оси симметрии для этих двух расчетов отличаются незначительно.

Другая трудность, для преодоления которой пришлось пойти на

огрубление метода, связана с угловой точкой границы углерода, где пересекаются границы с алюминием и свинцом. На рис. 5 эта точка показана символом «*». С течением времени угол пересечения границ уменьшается, что приводит и 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 $\varphi_{\max} = 0^\circ$ представлены на рис. 6 для описанной выше двухконической мишени с каналом и аналогичной конической мишени без канала с $R = 5$ мм, $\vartheta = 60^\circ$. Видно, что в обоих случаях на границе раздела имеются точки, где описанный выше искусственный прием существенно ограничивает неустойчивость. Естественно предположить, что в окрестности этих точек поток закручивается и образуется область турбулентного перемешивания.

Распределение давления вдоль оси симметрии слабо меняется со временем, однако существенно различается для разных мишеней. Для мишени без канала давление вдоль оси меняется в узком диапазоне 55 - 60 ГПа. Для мишени с каналом давление вдоль оси меняется значительно сильнее: от примерно 50 - 55 ГПа вблизи ударника до примерно 25 - 30 ГПа за фронтом головной волны, идущей по каналу. Существенно различной оказывается и скорость вдавливания. Для мишени без канала это примерно 2 км/с, для мишени с каналом — примерно 4,5 км/с.

Волна разгрузки. Здесь будут представлены результаты расчета тех же мишеней, что и в предыдущем пункте, но для ударника толщиной $H = R$. В этом случае разгрузка углерода начинается почти одновременно с завершением действия кумулятивного эффекта. На рис. 7 приведены профили границы углеродного объема в разные моменты времени. Действие волны разрежения видно из сравнения этих профилей с соответствующими профилями на рис. 6, где волна разрежения отсутствует. Уменьшение со временем радиального размера углеродного объема говорит о существенно неоднородном характере разгрузки. В случае мишени с каналом результаты расчета позволя-

ют предположить, что разгрузка может сопровождаться пережатием канала и образованием двух изолированных углеродных объемов.

Удар пластины по мишени из другого материала может приводить к внутреннему разрушению пластины (см., например, [10]), которое принято называть отколом. В данном случае при отражении волны разрежения от границы алюминия и свинца уравнения гидродинамики дают в алюминии область с очень большим по величине отрицательным давлением (< -5 ГПа). Поэтому в реальном течении скорее всего будет возникать откол.

Для оценки степени влияния откола на разгрузку углерода проводился следующий вычислительный эксперимент. Вводилось критическое давление $p_{\min} < 0$. Если в какой-либо ячейке сетки давление $p < p_{\min}$, то эта ячейка выбрасывалась из расчета, а на ее границе задавалось атмосферное давление. Расчеты проводились при разных значениях p_{\min} в диапазоне от -3 ГПа до -1 ГПа. 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. Отсутствие влияния откола на разгрузку углерода также является следствием существенно неоднородного характера разгрузки.

На рис. 7 приведены также зависимости давления в некоторой лагранжевой частице от времени для конических мишеней с каналом и без канала в сравнении с одномерной задачей, в которой ударник налетает на слой графита, лежащий на полубесконечной свинцовой подложке. Толщина слоя графита равняется высоте конуса $R/\operatorname{tg}(\vartheta/2)$. Первоначально частица располагается примерно посередине высоты конуса для конической 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 решение одномерной задачи качественно отличается от двумерной. Для конической мишени давление в частице уменьшается медленно. При $t = 5$ мкс давление еще примерно 7 ГПа. Для плоского слоя графита давление падает до нуля уже при $t \approx 2,2$ мкс. Отметим существенное влияние откола, который грубо моделировался описанным выше способом, на поведение давления в плоском слое, чего не было в случае конической мишени.

Помимо одномерной задачи с графитом была решена задача без графита, когда алюминиевый ударник налетает на однородную свинцовую мишень. Результат расчета показан на рис. 7 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 практически не зависит от того, учитывается или нет откол в алюминиевом ударнике. Все это позволяет сделать важный вывод. Разгрузка углерода в конической свинцовой мишени определяется в основном свойствами свинца, а не углерода.

Заключение

В данной работе численно исследовано импульсное сжатие углерода в конической мишени. Получены следующие результаты.

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 кумулятив-

ного эффекта более однородным по оси симметрии. Наиболее однородное воздействие кумулятивного эффекта достигается в том случае, когда ширина области фазового перехода в головной плоской волне оказывается порядка размера конической полости, так, что фазовый переход завершается в схлопывающемся импульсе давления. Такая ситуация возникает для изотропного графита со сравнительно большим временем фазового перехода и мишени с радиусом основания конуса порядка 5 мм.

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.

Определена 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 свинца, а не углерода. В частности, откол в ударнике не влияет на разгрузку углерода.

Дальнейшее совершенствование модели будет связано в первую очередь с учетом теплопроводности, поскольку кумулятивный эффект приводит к появлению высокотемпературного «пятна» углерода ($4 - 5 \cdot 10^3$ К, см. рис. 2), в то время как свинец остается сравнительно хо-

лодным (порядка 1000 К).

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.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 00-01-00551).

Список литературы

- [1] Ломоносов И.В., Фортов В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чаракчьян А.А., Шуршалов Л.В. // ДАН. 1998. Т. 360. №2. С. 199-201.
- [2] Erskine D.J., William J.N. // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. No. 10. P. 4882-4886.
- [3] Жук А.З., Иванов А.В., Канель Г.И. // ТВТ. 1991. Т. 29. №3. С. 486-493.
- [4] Vlodarchik E., Trebinski R. // Shock Waves. 1997. V. 7. P. 231-248.
- [5] Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л., Фортов В.Е. Теплофизика и динамика интенсивных импульсных воздействий. Черногловка: ИХФ АН СССР, 1988.
- [6] Чижев В.Е. // Прикл. механ. и технич. физ. 1995. Т. 36. №6. С. 158-164.
- [7] Нигматулин Р.И. Механика многофазных сред. М.: Наука, 1987.
- [8] Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S., Hemley R.J., Mao H.K., Goncharov A.F. // Carbon. 1996. V. 34. No. 2. P. 141-153.
- [9] Неуважаев В.Е. // Мат. моделирование. 1991. Т. 3. №7. С. 10-28.
- [10] Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: «Янус-К», 1996.

Таблица. Максимальное по времени давление p_{max} (ГПа) для разных материалов мишени и значений угла раствора конуса ϑ (градусы).

МИШЕНЬ	ϑ	p_{max}
свинец	60	170
свинец	75	290
свинец	90	420
алюминий	60	120
алмаз	60	580

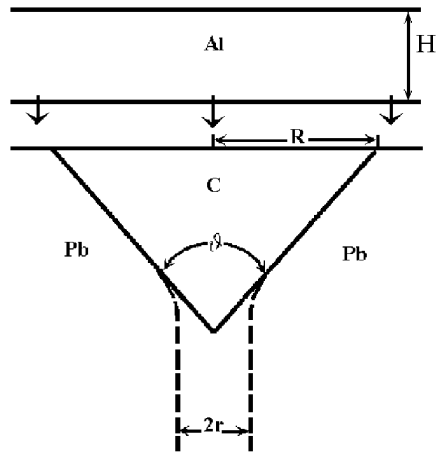


Рис. 1. Постановка задачи.

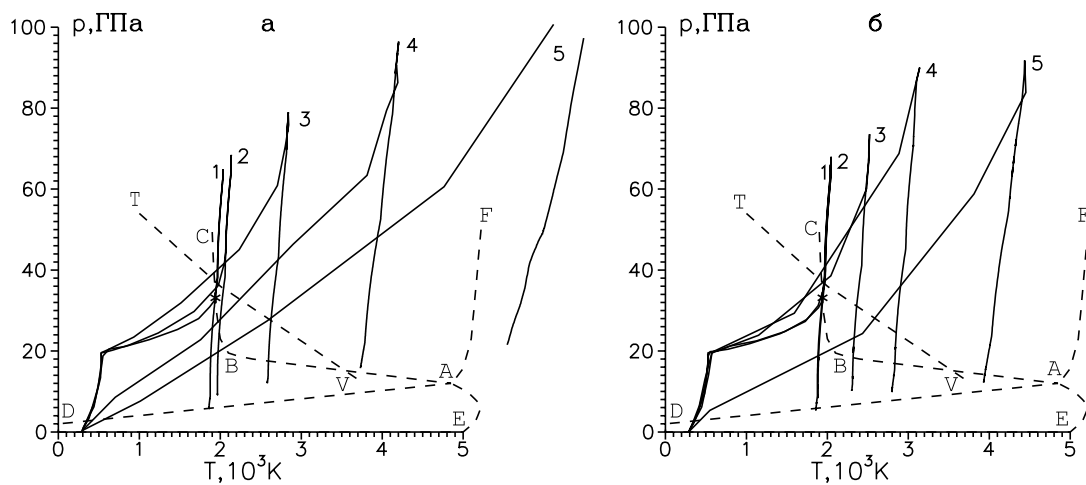


Рис. 2. Эволюция пяти лагранжевых частиц углерода на оси симметрии в плоскости (T, p) ; а — мишень без канала, б — мишень с каналом.

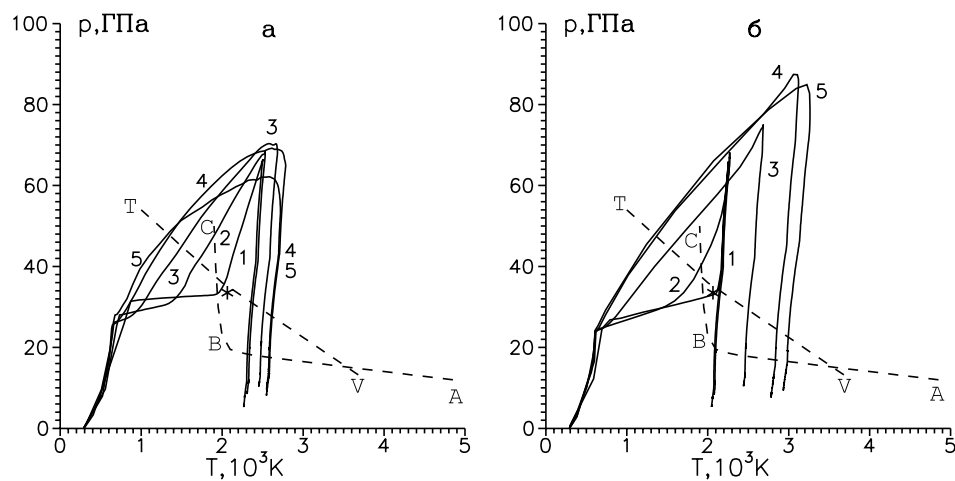


Рис. 3. Эволюция лагранжевых частиц для параметров кинетики фазового перехода изотропного графита [3] $P_0=24$ ГПа, $\tau=0,09$ мкс; а — $R=5$ мм, б — $R=20$ мм.

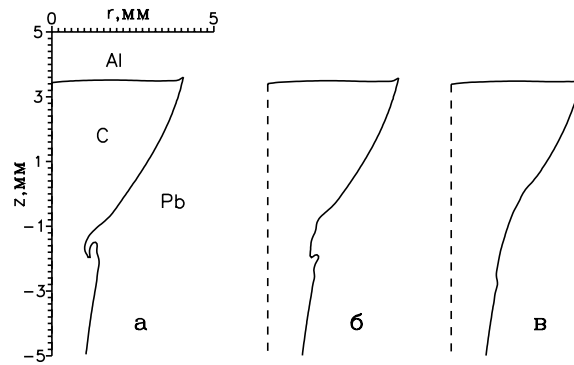


Рис. 4. Граница углеродного объема для разных длин h области перехода; $R = 5$ мм, $\vartheta = 60^\circ$, $r = 1$ мм, $t = 1,75$ мкс; а — $h = 0,5$ мм, б — 1 мм, в — 2 мм.

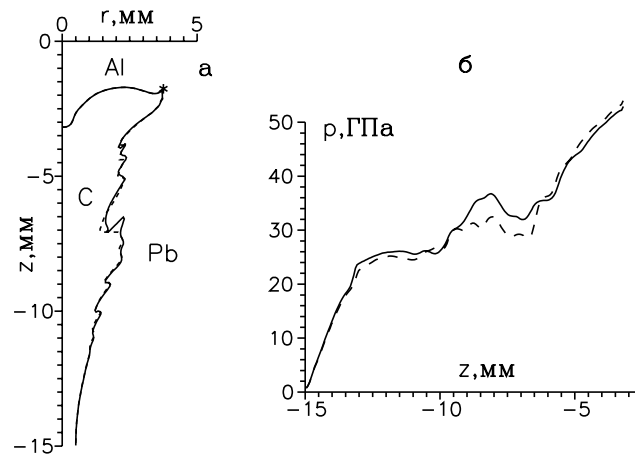


Рис. 5. Сравнение расчетов с разным искусственным ограничением неустойчивости границы углерода и свинца; штриховая линия — $\varphi_{\max} = 0^\circ$, сплошная линия — $\varphi_{\max} = 45^\circ$; а — граница углеродного объема; б — давление вдоль оси симметрии.

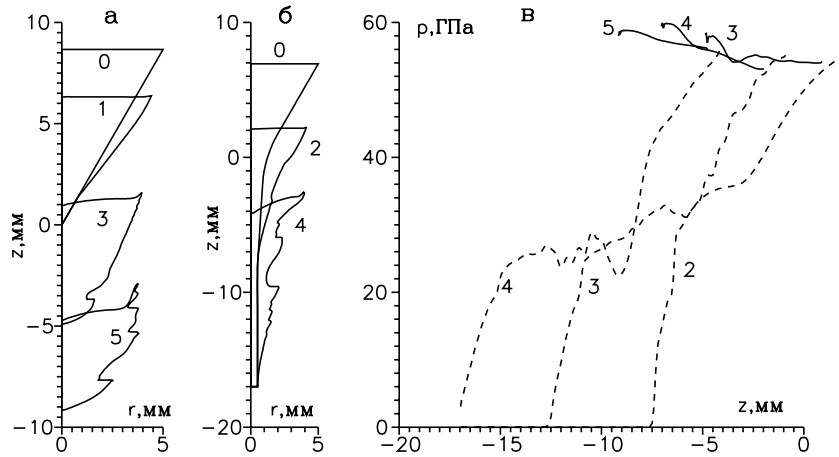


Рис. 6. Ударник с $H \gg R = 5$ мм; а — граница углеродного объема в разные моменты времени (мкс) для мишени без канала; б — то же самое для мишени с каналом; в — давление вдоль оси симметрии для мишени без канала (сплошные линии) и с каналом (штриховые линии).

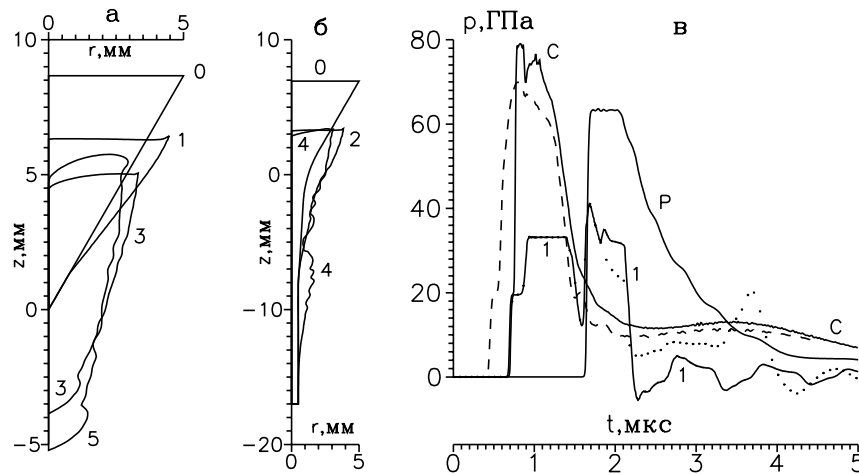


Рис. 7. Ударник с $H = R$; а — мишень без канала; б — с каналом; в — зависимость давления в лагранжевой частице от времени: 1 — одномерный расчет с учетом откола, точки — одномерный расчет без учета откола, «С» — коническая мишень без канала, штриховая линия — мишень с каналом, «Р» — одномерная задача со свинцом вместо углерода.