

УДК 51.72

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО УДАРНОМУ СЖАТИЮ СМЕСИ ГРАФИТА С ВОДОЙ

Л. В. Шуршалов¹, А. А. Чарахчян¹, К. В. Хищенко²

¹Вычислительный центр им. А. А. Дородницына ФИЦ «Информатика и управление» РАН, 119333 Москва
lshur@ccas.ru

²Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва

Рассмотрена задача о поведении смеси мелких графитовых частиц с водой в условиях ударно-волнового воздействия при давлении до 32 ГПа и температуре до $1\,200 \div 1\,600$ К. При таких давлениях и температурах графитовые частицы могут превратиться если не в кубический алмаз, то по крайней мере в его гексагональную форму — лонсдейлит. Показано, что для достаточно мелких графитовых частиц порядка 1 мкм их смесь с водой за время порядка 10 нс может нагреться до вышеуказанных температур и претерпеть фазовое превращение, затем находиться в таких условиях примерно 50 нс, а в последующие 50 нс эффективно охладиться до температур меньше 300 К, сохранившись в алмазной фазе.

Ключевые слова: искусственные алмазы, математическое моделирование, графитовые частицы, смесь графита с водой.

DOI 10.15372/FGV20170411

ВВЕДЕНИЕ

Первые удачные ударно-волновые опыты по превращению графита в алмаз (с небольшим выходом) [1] были выполнены еще в 60-е годы прошлого века (см. обзор подобных экспериментов в монографии [2], из которой взяты и другие приводимые ниже данные). Основной причиной небольшого выхода алмаза в тех экспериментах была его высокая остаточная температура после снятия давления, которая приводит к графитизации алмаза. Следующим шагом стало использование смеси графита с металлом, который имеет меньшую по сравнению с алмазом остаточную температуру и тем самым играет роль охладителя. Эксперименты с разными металлами показали, что выход алмаза растет с увеличением коэффициента теплопроводности металла. Наибольшим достижением стала созданная в 1976 г. фирмой «Дюпон» установка для промышленного получения алмазного порошка с размером частиц до 60 мкм из смеси пористого графита и меди (по цилиндрической ампуле со смесью ударяет коаксиально метаема с помощью взрывчатого вещества оболочка). Содержание графита в смеси было в пределах $3 \div 12$ %, максимальное давление в процессе сжатия — до 40 ГПа, степень превращения графита — до 76 %.

Вода в экспериментах по ударно-волновому синтезу алмаза использовалась в связи с ее способностью превращаться в пар и создавать остаточное давление внутри ампулы, что также ослабляет графитизацию алмаза [3]. Если не считать ранних неудачных экспериментов с выстреливанием ударно-сжатых образцов в воду [2], в качестве охладителя вода не рассматривалась из-за низкой теплопроводности.

В настоящей работе исследуется возможность использования именно воды в качестве охладителя. По сравнению с металлами, это значительно упрощает извлечение алмаза из смеси.

Одним из важных преимуществ смеси графита с водой является то, что при разгрузке и возникновении отрицательных давлений разрыв (откол) будет происходить по наименее прочной части смеси, т. е. по воде. После этого отрицательные давления превращаются в нулевые, уже не разрушительные для алмазных частиц, поскольку к этому времени нулевым будет их собственное давление.

В качестве первого шага ранее рассматривалась задача для уравнения теплопроводности об охлаждении сферической частицы алмаза, окруженной водой. Начальные температуры обоих веществ различны и не зависят от пространственных координат. Качественно решение этой задачи выглядит следующим образом.

Вблизи границы с алмазом быстро образуется тонкий слой горячей воды, после чего поток тепла через границу становится очень маленьким и охлаждение алмаза практически прекращается.

На первый взгляд, этот результат делает невозможным использование воды в качестве охладителя. На самом деле это не так. Если вода получает возможность расширяться при разгрузке давления до нулевого, то при расширении она очень быстро теряет температуру, охлаждаясь не только до нормальных, но и до более низких температур. В расширяющейся и охлаждающейся воде постоянно возникает отрицательный градиент температуры на поверхности алмазной частицы, обеспечивающий отвод тепла от нее. Здесь уже не так важны малая теплопроводность воды и образование запирающего тепло тонкого горячего слоя воды вокруг частицы алмаза. Этот тонкий слой неизбежно будет остывать вместе с остальной водой при ее расширении, а остывая, эффективно отбирать тепло у алмаза. К тому же в реальных условиях частицы в воде, подвергшиеся воздействию ударных волн, скорее всего, не находятся в состоянии покоя, а хаотически двигаются в условиях турбулентного течения, омываясь все новыми порциями воды, что препятствует образованию запирающего теплового слоя вокруг частиц.

В работах [4, 5] предложена оригинальная схема ударного сжатия материалов, которая используется и в настоящей работе (см. далее рис. 1). Цилиндрический образец с материалами находится внутри трубы и имеет возможность свободно скользить вдоль нее. С одной стороны на образец налетает ударник, а с другой стороны находится стальная пробка, которая также может свободно скользить вдоль трубы. Расчеты по одномерным уравнениям гидродинамики показали, что параметры ударника и пробки можно выбрать так, чтобы в течение длительного времени термодинамические функции в каждом материале внутри образца не зависели от пространственной переменной и изменялись только со временем. Такая пространственная однородность позволяет надеяться на создание условий, при которых фазовое превращение материала будет практически полным. Скорость образца при выбранных параметрах примерно 200 м/с. Скорость в каждом материале линейно зависит от пространственной координаты, что указывает на

принадлежность решения к известному семейству Л. И. Седова [6]. Плотность как функция времени в этом решении не зависит от уравнения состояния и с точностью до произвольной постоянной легко находится из уравнений движения и непрерывности [7].

В работе [5], помимо уравнений гидродинамики, рассматривалось также влияние теплопроводности на температуру окруженной водой плоского слоя графита, а затем алмаза при разной толщине слоя. Был сделан вывод о перспективности рассмотрения ударного воздействия на смесь графитовых частиц с водой. В настоящей работе в ходе численного эксперимента предпринята попытка более систематического анализа поведения смеси графитовых частиц с водой под воздействием ударных волн.

Вначале была рассмотрена вспомогательная задача о нагреве и охлаждении одной отдельно взятой сферической частицы в воде, подвергающейся ударному воздействию, а затем проведен расчет основной задачи об ударном воздействии на смесь графитовых частиц с водой.

Анализ решения вспомогательной задачи позволяет определить, каким должен быть размер частицы графита и позже алмаза, чтобы выполнялось условие термического равновесия (по температуре) частиц и окружающей воды. Это важно, поскольку используемые в основном расчете уравнения для смеси справедливы при условии термодинамического равновесия. Механическое равновесие (по давлению) достигается очень быстро и выполняется с большой точностью. Равновесие по температуре достигается за счет медленного процесса теплопроводности и поэтому имеет место лишь для достаточно мелких частиц.

1. СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА, ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ, ОПИСАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Схема численного эксперимента показана на рис. 1. Рассматривается одномерная модель течения в цилиндрическом канале, куда помещается смесь воды с частицами углерода. Толщина зоны смеси 1.5 см. Справа от этой зоны помещается стальная пробка толщиной 30.5 см, не связанная со стенками канала и имеющая возможность перемещаться вдоль канала в ходе процесса. Слева от смеси расположен стальной ударник толщиной 20.5 см, имеющий скорость 1400 м/с. Приведенные размеры удар-

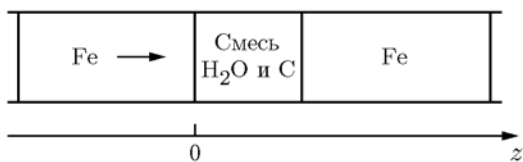


Рис. 1. Схема численного эксперимента

ника, пробки и зоны смеси выбраны такими для согласования результатов численного эксперимента с данными работ [4, 5], в которых рассматривался аналогичный эксперимент для слоя графита, окруженного двумя слоями воды. Скорость ударника здесь взята немного большей, чем в работах [4, 5]. Это связано с тем, что частицы графита в смеси с водой приобретают более высокую температуру и фазовое превращение их в алмаз в соответствии с принятой схемой перехода графита в алмаз [4, 5] требует более высокого давления.

Возникающее одномерное нестационарное течение описывается уравнениями вида

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial z} + \rho \frac{\partial u}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \rho \frac{u^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[u \left(\rho e + \rho \frac{u^2}{2} + p \right) - k \frac{\partial T}{\partial z} \right] = 0,$$

где t — время, z и u — координата и скорость вдоль оси трубы, ρ — плотность, p — давление, $e(p, \rho)$ — внутренняя энергия единицы массы вещества, T — температура, k — коэффициент теплопроводности.

Для расчета этих уравнений использовался метод Годунова [8] с выделением всех контактных границ раздела различных веществ в качестве сеточных границ.

Целью проводимого численного эксперимента является анализ поведения смеси графитовых частиц с водой при ударном воздействии, а также анализ особенностей превращения графитовых частиц в алмазные и их сохранения в алмазной фазе. Для расчета фазового перехода графитовых частиц применяется описанный в работах [4, 5] простой инженерный подход. Он основан на использовании экспериментальной диаграммы фазовых состояний углерода [9], на анализе перемещений параметров p - T графитовых или алмазных частиц по этой

диаграмме и введении некоторых характерных линий, пересечение которых ведет к фазовому превращению углерода. В настоящей работе используется только модель прямого перехода графита в алмаз, так как обратный переход не происходит из-за низкой в данном случае остаточной температуры алмаза. Линией прямого перехода в плоскости (p, T) является прямая, примерно параллельная линии термодинамического равновесия графита и алмаза и проходящая через точку $p = 30$ ГПа, $T = 1000$ К, наклон линии $\frac{dp}{dT} = 1.65$ ГПа/кК. При пересечении прямой термодинамические свойства смеси изменяются в соответствии с изменением свойств ее углеродного компонента.

2. ОБ УРАВНЕНИЯХ СОСТОЯНИЯ СМЕСИ ГРАФИТА ИЛИ АЛМАЗА С ВОДОЙ

В работах [4, 5, 10] для описания термодинамических свойств веществ, участвовавших в эксперименте, использовалось двучленное уравнение состояния вида

$$e = (p + \gamma p^*) / (\gamma - 1) \rho - \gamma p^* / (\gamma - 1) \rho^*,$$

$$p = (\gamma - 1) c_v \rho T + p^* [(\rho / \rho^*)^\gamma - 1], \quad (2)$$

$$p^* = \rho^* C_0^2 / \gamma,$$

где γ — показатель адиабаты; p^* — характерное для вещества давление; ρ^* — характерная плотность, при которой упругая часть давления обращается в нуль; $C_0 = \text{const}$ — характерная скорость звука, соответствующая нормальному давлению и плотности ρ^* ; c_v — удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Считается, что уравнение состояния (2) неплохо описывает свойства металлов и жидкостей при высоком давлении. Наряду с этим, оно еще хорошо отражает важную особенность рассматриваемых веществ при их разгрузке от больших давлений и температур до нормальных величин, а именно: сохранение высокой остаточной температуры металлов и твердых веществ типа графита и алмаза и сильное падение температуры воды (и, надо полагать, других жидкостей), которая ведет себя в этом случае как газ, сильно расширяясь и охлаждаясь (см., например, [10]).

В работе [10] уравнение состояния (2) было обобщено на случай смесей различных веществ в предположении их термодинамического равновесия в рассматриваемом физическом

процессе. При этом входящие в уравнения (2) константы вычислялись следующим образом.

Пусть α — объемная доля воды в ее смеси с графитом. Тогда начальная плотность смеси определяется как $\rho_{mix} = \alpha\rho_w + (1-\alpha)\rho_{gr}$, где ρ_w и ρ_{gr} — начальные плотности воды и графита. (Везде далее параметры, относящиеся к смеси, отмечаются индексом *mix*, к графиту и воде — соответственно *gr* и *w*.)

Из условия равенства времени прохождения звуковой волной образца смеси сумме времен прохождения звуковой волной соответствующих частей образца, состоящих из воды и графита, т. е. $t_{mix} = t_w + t_{gr}$, находим скорость звука смеси $C_{0,mix}$:

$$\frac{1}{C_{0,mix}} = \frac{\alpha}{C_{0,w}} + \frac{1-\alpha}{C_{0,gr}}.$$

Удельная теплоемкость смеси $c_{v,mix}$ определяется исходя из определения теплоемкости как количества тепла, необходимого для нагревания единицы объема смеси на один градус при постоянном объеме, и равенства этого количества сумме количеств тепла, необходимых для нагрева составляющих смеси на один градус:

$$\rho_{mix}c_{v,mix} = \alpha\rho_w c_{v,w} + (1-\alpha)\rho_{gr}c_{v,gr}.$$

При вычислении среднего показателя адиабаты для смеси γ_{mix} мы исходили из соотношения $\gamma_{mix} = c_{p,mix}/c_{v,mix}$, где c_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении:

$$\gamma_{mix} = \frac{\alpha\rho_w\gamma_w + (1-\alpha)\rho_{gr}\gamma_{gr}c_{v,gr}/c_{v,w}}{\alpha\rho_w + (1-\alpha)\rho_{gr}c_{v,gr}/c_{v,w}}.$$

Коэффициент теплопроводности смеси вычислялся по формуле

$$k_{mix} = \alpha k_w + (1-\alpha)k_{gr}.$$

Значение постоянной ρ_{mix}^* смеси подбиралось непосредственно в расчете из условия равенства начальной температуры смеси требуемой начальной температуре, за которую принималась температура 288 К, что соответствует температуре на уровне моря в таблицах стандартной атмосферы Земли.

В дальнейших расчетах удобнее иметь дело не с объемными долями воды и графита, а с их массовыми долями, поскольку при фазовом превращении графита в алмаз или обратной трансформации алмаза в графит их объемные

доли будут меняться, в то время как массовые доли сохраняются. Обозначим через β массовую долю воды в смеси с графитом. Тогда α и β связаны соотношениями

$$\alpha = \frac{\beta\rho_{gr}}{(1-\beta)\rho_w + \beta\rho_{gr}}, \quad \beta = \frac{\alpha\rho_w}{(1-\alpha)\rho_{gr} + \alpha\rho_w}.$$

После превращения графита в алмаз все входящие в уравнение состояния константы будут относиться уже к алмазу и обозначаться индексом *d*.

Приведем применявшиеся в расчетах значения констант для воды, графита и алмаза. Выбор этих постоянных подробно обсуждался в работах [4, 5, 10].

Для графита: $\rho_{gr} = 2.26$ г/см³, $\gamma_{gr} = 1.24$, $C_{0,gr} = 3950$ м/с, $c_{v,gr} = 674$ Дж/(кг·К), $\rho_{gr}^* = 2.266744043$ г/см³, $k_{gr} = 200$ Вт/(м·К).

Для алмаза: $\rho_d = 3.5$ г/см³, $\gamma_d = 2.15$, $C_{0,d} = 11270$ м/с, $c_{v,d} = 700$ Дж/(кг·К), $\rho_d^* = 3.50639456$ г/см³, $k_d = 1000$ Вт/(м·К).

Для воды: $\rho_w = 1$ г/см³, $\gamma_w = 4.3$, $C_{0,w} = 4043.8578$ м/с, $c_{v,w} = 3700$ Дж/(кг·К), $\rho_w^* = 1.3223454$ г/см³, $k_w = 0.6$ Вт/(м·К).

3. ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА О НАГРЕВЕ И ОХЛАЖДЕНИИ УГЛЕРОДНЫХ ЧАСТИЦ

Параметром задачи является начальный радиус пробной сферической частицы R_0 , а в качестве внешних условий используются зависимости $p = p_w(t)$, $T = T_w(t)$, полученные из решения плоской одномерной задачи об ударном воздействии на слой чистой воды ($\alpha = \beta = 1$), для определенности — в середине этого слоя. При указанных в начале § 1 параметрах плоской задачи термодинамические функции воды практически однородны по пространству, за исключением небольшого начального интервала времени.

Задача включает в себя окружающий частицу сферический слой воды с внешним радиусом $R_w = 1.5R_0$. Решаются полные сферически-симметричные уравнения гидродинамики, в которое входит слагаемое, отвечающее за теплопроводность (типа уравнений (1), но для сферической симметрии), и учитывается возможный фазовый переход. На внешней границе водяного объема ставятся условия $p = p_w(t)$, $T = T_w(t)$ и «мягкое» условие для скорости (с нулевой производной скорости по радиальной координате), позволяющее воде

свободно втекать или вытекать из объема воды, окружающего частицу.

Сначала приведем график температуры в воде, показывающий, в каких условиях будет проходить численный эксперимент с пробной частицей.

Изменение со временем температуры в центральной точке зоны воды показано на рис. 2. Имеются три характерных участка. На первом коротком участке температура быстро растет до ≈ 1400 К, что связано с прохождением сначала сильной ударной волны от ударника, затем отраженных ударных волн от пробки и ударника. На втором участке температура сохраняется на достигнутом уровне в течение ≈ 50 мкс. На третьем участке температура плавно уменьшается до ≈ 200 К также примерно в течение 50 мкс.

Аналогично ведет себя и давление в центральной точке зоны воды. Также наблюдаются три характерных участка: быстрый рост давления до ≈ 32 ГПа, сохранение давления на этом уровне в течение 50 мкс и падение давления до нулевых значений к моменту времени 110 мкс.

Что касается распределений температуры и давления по пространству во всей зоне воды, то давление сохраняет практически постоянные значения, меняясь лишь со временем, а температура изменяется весьма плавно и несильно, имея несколько большее значение со стороны ударника и также меняясь лишь со временем.

Перейдем к результатам расчета вспомогательной задачи. Важно заметить, что во всех нижеследующих расчетах как вспомога-

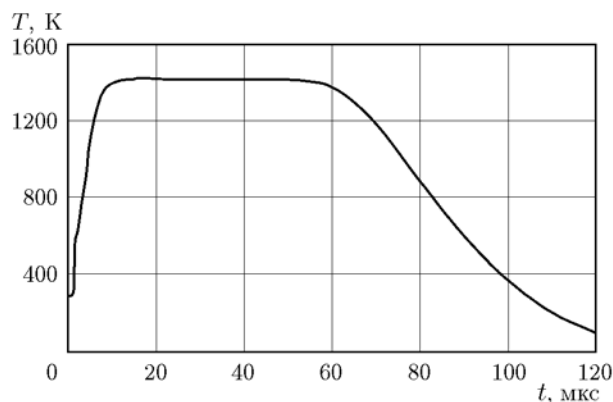


Рис. 2. Изменение температуры во времени в центральной точке зоны воды

ной, так и основной задачи для смеси графитовых частиц с водой фазовый переход графитовых частиц в алмазные происходит в конце первого короткого участка быстрого роста давления и температуры в воде.

Для численного эксперимента возьмем частицы с тремя последовательно уменьшающимися радиусами $R_0 = 0.1, 0.01$ и 0.001 мм. На рис. 3 в сравнении с температурой окружающей частицу воды (показана точками) приведены зависимости средней по массе температуры частиц от времени (кривые 1–3). Средняя по массе температура частицы представляет собой температуру наибольшей по массе внешней части частицы. Для рассмотренных весьма мелких частиц она мало отличается от температуры в центре частицы, особенно на стадии, когда графит превращается в алмаз, теплопроводность которого очень высока, и за счет этого температура по частице быстро выравнивается.

Как видно, температура наибольшей из частиц сильно отличается от температуры внешней воды $T_w(t)$. И нагревание, и охлаждение такой частицы происходят довольно медленно. Температура средней по размеру частицы значительно приближается к температуре окружающей воды, но от полного термодинамического равновесия такая частица все-таки еще далека. Частица же микронного размера практически полностью следует за температурой окружающей воды. Для такой частицы (и, естественно, для частиц еще меньших размеров) термодинамическое равновесие по температуре уже имеет место. Поэтому в основной

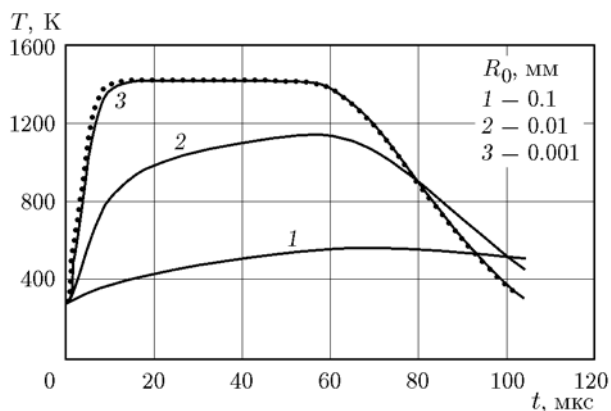


Рис. 3. Зависимость температуры частиц разного размера от времени (точки — функция $T_w(t)$ из рис. 2)

задаче для смеси воды с графитовыми частицами предполагается, что $R_0 = 0.001$ мм.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ УДАРНОГО СЖАТИЯ СМЕСИ ГРАФИТОВЫХ ЧАСТИЦ С ВОДОЙ

Перейдем к описанию результатов для смеси графитовых частиц с водой в разных пропорциях. Сначала рассмотрим смесь с равными массовыми долями воды и графитовых частиц, т. е. при $\beta = 0.5$.

На рис. 4 для ряда моментов времени начиная с $t = 15$ мкс, соответствующего максимальной температуре, показаны распределения температуры в смеси по лагранжевой координате $L = 20z/h_{mix}$, где z и h_{mix} — координата и толщина зоны смеси при $t = 0$. Распределения по пространству менее однородны, чем в чистой воде. Наибольшая температура наблюдается со стороны ударника. Различия в температуре не очень велики и постепенно сглаживаются. Соответствующие распределения давления в диапазоне приведенных времен практически постоянны по пространству.

Зависимости максимальной и минимальной температуры смеси от времени показаны на рис. 5. Качественно кривые ведут себя так же, как в чистой воде. Количественные отличия также невелики. Имеют место те же три характерных участка: быстрый рост температуры на коротком начальном участке, завершающийся переходом графитовых частиц в алмазную фазу, значительный участок практиче-

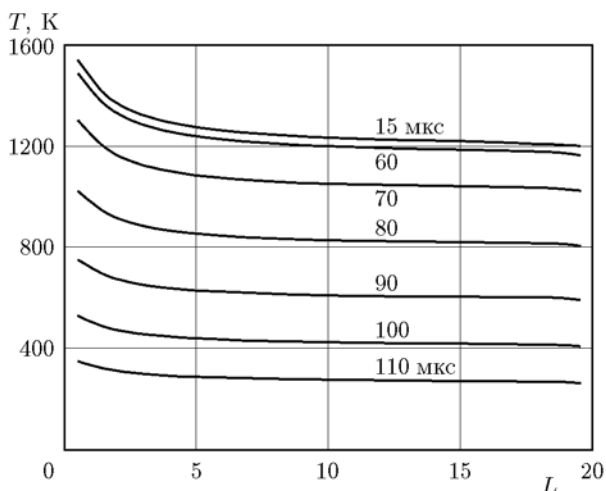


Рис. 4. Распределение температуры в смеси при $\beta = 0.5$ по лагранжевой координате

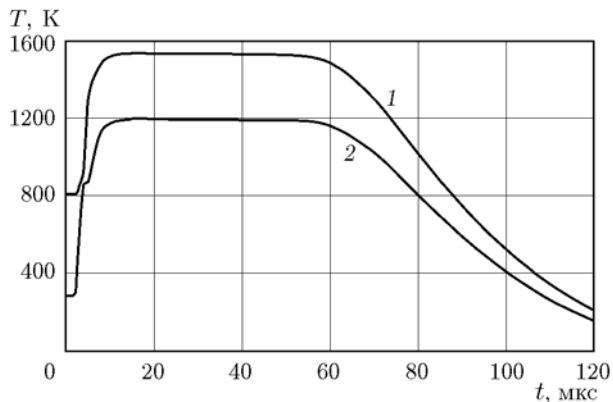


Рис. 5. Максимальная (1) и минимальная (2) температура смеси при $\beta = 0.5$

ски постоянной температуры и плавное понижение температуры до весьма малых значений на заключительном участке.

Интересно отметить уменьшение со временем разницы между максимальной и минимальной температурами смеси на стадии охлаждения. Более нагретая часть смеси охлаждается быстрее. Это связано с тем, что в процессе охлаждения смеси происходит переток тепла от более нагретой части смеси к менее нагретой и их температура постепенно выравнивается.

На рис. 6 показана диаграмма нагрузки и разгрузки образца смеси при $\beta = 0.5$, т. е. при одинаковой массовой доле воды и графитовых частиц (цифрами указаны моменты времени). Наглядно видно, каких значений достигают давление и температура смеси, как долго она

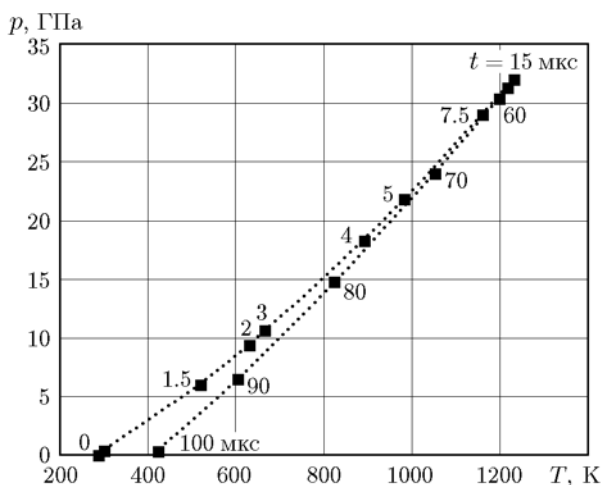


Рис. 6. Диаграмма нагрузки и разгрузки образца смеси при $\beta = 0.5$

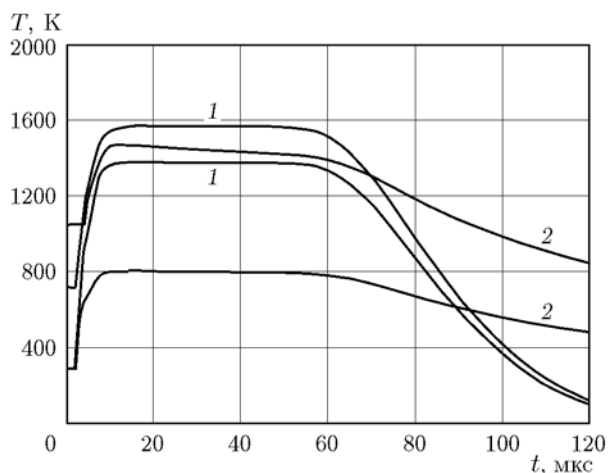


Рис. 7. Максимальная и минимальная температура смеси при $\beta = 0.9$ (кривые 1) и $\beta = 0.1$ (кривые 2)

находится в том или ином состоянии, насколько быстрее нагружается по сравнению с разгрузкой, какова величина остаточной температуры. Очевидно, что в соответствии с представленной диаграммой, если при максимальном давлении частицы графита превратились в алмаз, то они останутся алмазными и в конце процесса.

Для иллюстрации зависимости результатов от массовой доли воды в смеси β приведем данные при двух ее наиболее удаленных друг от друга значениях: $\beta = 0.1$ и 0.9 .

На рис. 7 показаны зависимости от времени максимальной и минимальной температуры смеси при наибольшем ($\beta = 0.9$) и наименьшем содержании воды в ней ($\beta = 0.1$). В случае наименьшего содержания воды обращают на себя внимание два факта: гораздо большее различие между максимальной и минимальной температурами и медленное и менее значительное понижение температуры на участке охлаждения смеси. В случае наибольшего содержания воды в смеси разница между максимальной и минимальной температурами гораздо меньше, а охлаждение смеси происходит гораздо быстрее и до значительно более низких температур. Очевидно, что для сохранения алмазных частиц это более предпочтительно.

Рассмотрим температуру, которую приобретает смесь алмазных частиц с водой к моменту времени $t = 110$ мкс, при разном содержании воды в смеси (рис. 8). Как видно, температура уменьшается до начального значения и ниже

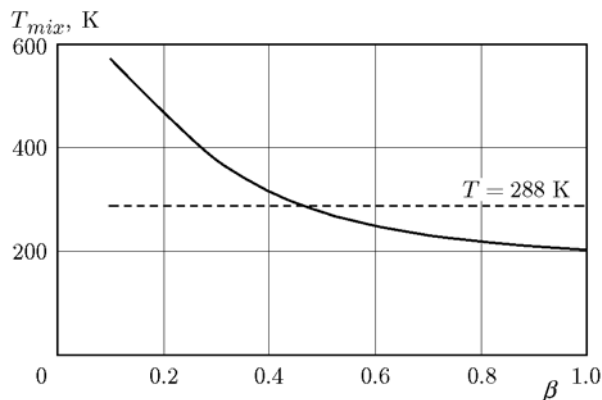


Рис. 8. Температура смеси при $t = 0$ (штриховая линия) и $t = 110$ мкс (сплошная линия) в зависимости от массовой доли воды β

при любых $\beta > 0.5$. То есть при таком содержании воды в смеси результаты эксперимента по динамическому превращению алмаза из графита должны быть наилучшими.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрена одномерная модель ударного сжатия смеси графита и воды в цилиндрическом канале. Сама смесь, налетающий на нее стальной ударник и расположенная с другой стороны стальная пробка могут перемещаться вдоль канала. Модель смеси применительно к уравнениям гидродинамики с теплопроводностью основана на предположении равенства давлений и температур графита и воды и учитывает фазовый переход графита в алмаз. При выбранных параметрах ударника и пробки давление в смеси достигает 32 ГПа, а температура — $1200 \div 1600$ К. При таких давлениях и температурах графитовые частицы могут превратиться если не в кубический алмаз, то по крайней мере в его гексагональную форму — лонсдейлит. Показано, что для смеси с массовой долей воды $\beta > 0.5$ графит примерно за 10 мкс может нагреться до вышеуказанных температур и претерпеть фазовое превращение, затем находиться в таких условиях около 50 мкс, а в последующие 50 мкс эффективно охладиться до температур, меньших 300 К, сохранившись в алмазной фазе.

Для определения размера частицы графита и позже алмаза, который гарантирует близость температур частицы и окружающей воды, решена вспомогательная задача о нагреве и охлаждении одной отдельно взятой сфериче-

ской частицы в воде, подвергающейся ударному воздействию. Показано, что размер частиц должен быть порядка 1 мкм.

Конечно, это очень маленький размер частиц. Хотелось бы, чтобы они были побольше. Кое-какие возможности для этого есть. Первая возможность — это увеличение каким-либо образом коэффициента теплопроводности воды. Для этого вместо простой воды можно использовать воду с добавлением наночастиц высокотеплопроводных веществ (серебра, меди, самого графита или даже алмаза), так называемые наножидкости. Эксперименты [11–13] показывают, что таким образом теплопроводность можно значительно повысить. Другая возможность присутствует в самом изучаемом течении, но в расчете не учитывается — это турбулентный характер течения воды вокруг частиц. Турбулентность может значительно увеличить теплообмен между частицей и окружающей водой. Степень турбулентности течения может быть повышена в эксперименте и искусственно. Еще одна возможность увеличения размеров частиц — укрупнение масштабов эксперимента. Оценочные расчеты показывают, что увеличение всех линейных размеров численного эксперимента (и, соответственно, времени эксперимента) в N раз приводит к увеличению размера частиц в $N^{1/2}$ раз.

Заметим также, что для реального физического эксперимента некоторое отклонение от равновесия по температуре вряд ли имеет принципиальное значение. Важно лишь, чтобы частицы графита нагревались до требуемого для их превращения в алмаз уровня температуры, а затем по возможности быстро охлаждались. Например, если этому условию удовлетворяет кривая 2 на рис. 3, то можно надеяться на удачный эксперимент с частицами размером 10 мкм.

Полученные в настоящей работе результаты численного эксперимента по ударному сжатию смеси графитовых частиц с водой дают полезную информацию, которая может пригодиться в дальнейшем при проведении натурального физического эксперимента.

ЛИТЕРАТУРА

1. De Carlie P. S., Jamieson J. C. Formation of diamond by explosive shock // Science. — 1961. — V. 133. — P. 1821–1822.
2. Даниленко В. В. Синтез и спекание алмаза взрывом. — М.: Энергоатомиздат, 2003.
3. Бацанов С. С. Динамико-статическое сжатие (управление разгрузкой в системах сохранения) // Физика горения и взрыва. — 1994. — Т. 30, № 1. — С. 125–130.
4. Шуршалов Л. В., Хищенко К. В., Чарахчян А. А. Численные эксперименты по ударному сжатию графита. — М.: ВЦ РАН, 2015.
5. Shurshalov L. V., Charakhch'yan A. A., Khishchenko K. V. Shock loading of graphite between water layers: numerical experiments // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — V. 774. — P. 012013-1–012013-9.
6. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. — М.: Наука, 1972.
7. Хищенко К. В., Чарахчян А. А. О некоторых свойствах плоских волн термоядерного горения // ПМТФ. — 2015. — Т. 56, № 1. — С. 104–115.
8. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976.
9. Bundy F. P., Bassett W. A., Weathers M. S., Hemley R. J., Mao H. K., Goncharov A. F. The pressure-temperature phase and transformation diagram for carbon; updated through 1994 // Carbon. — 1996. — V. 34, N 2. — P. 141–153.
10. Чарахчян А. А., Шуршалов Л. В. Численный эксперимент по ударному сжатию и разгрузке некоторых веществ. — М.: ВЦ РАН, 2008.
11. Das S. K., Choi S. U. S., Patel H. E. Heat transfer in nanofluids — a review // Heat Trans. Eng. — 2006. — V. 27, N 10. — P. 3–19.
12. Özerinç S., Kakaç S., Yazicioğlu A. G. Enhanced thermal conductivity of nanofluids: a state-of-the-art review // Microfluidics and Nanofluidics. — 2010. — V. 8, iss. 2. — P. 145–170.
13. Жаров А. В., Савинский Н. Г., Павлов А. А., Евдокимов А. Н. Экспериментальный метод измерения теплопроводности наножидкости // Фундаментальные исследования. — 2014. — № 8. — С. 1345–1350.