

МОДЕЛЬ КОАГУЛЯЦИИ УГЛЕРОДНЫХ КЛАСТЕРОВ ПРИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

А. Л. Куперштох, А. П. Ершов, Д. А. Медведев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск

Методом молекулярной динамики в двумерной постановке моделируется коагуляция углеродных частиц при высоких температурах и плотностях, соответствующих условиям за фронтом детонации. При взаимодействии малых частиц происходит их слияние подобно жидким каплям. Частицы, размер которых превышает 3 нм, слипаются гранями с сохранением своей формы. Однако поверхностные атомы способны мигрировать между соединившимися частицами, способствуя при этом их соединению. Расчеты демонстрируют возникновение во взаимодействующих частицах интенсивных волн сжатия и разрежения с амплитудой до 30 ГПа.

При детонации конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) с отрицательным кислородным балансом выделяется углерод в виде ультрадисперсных частиц. Интерес к этому явлению усилился, когда было обнаружено, что в ряде случаев образуется алмазная фаза [1, 2]. В [3] упоминается о первых экспериментах, проведенных еще в 1963–1965 гг.

Размеры получаемых при детонационном синтезе частиц (≈ 3 нм) практически не зависят от размера заряда ВВ (т. е. от времени, в течение которого возможна коагуляция) [1, 4]. Это связано с тем, что при взрыве типичных ВВ достигаются температуры, лежащие примерно на 1 000 К ниже линии плавления углерода (рис. 1). Поэтому с достижением характерного размера, при котором начинают преобла-

дать кристаллические свойства частиц, полное слияние кластеров сменяется слипанием с последующим образованием разреженных агрегатов. Недавние эксперименты с использованием ВВ, имеющих более высокую температуру в детонационной волне, показали, что в этом случае размеры частиц резко увеличиваются [5]. При этом параметры продуктов детонации соответствуют жидкому состоянию углерода. Коагуляция жидких капель и приводит к образованию крупных частиц [5, 6].

Процесс коагуляции в условиях устойчивости твердой фазы представляет несомненный интерес и заслуживает детального анализа. В работе [7] был проведен расчет роста кластеров, в котором использовался запрет на коагуляцию частиц при превышении ими определенного размера. При этом после окончания реакции возникает достаточно узкое распределение частиц по размерам. При определенных значениях параметров получены характерные размеры кластеров, близкие к наблюдаемым в экспериментах. Физический смысл такого запрета понятен на качественном уровне, в частности, он отражает уменьшение эффективной температуры плавления для мелких частиц [8]. Ясно, что реально вместо критического размера должна быть введена некоторая переходная область.

Более строгий подход вместо постулирования критического размера частиц требует рассмотрения динамики коагуляции на микроуровне. С этой целью в работах [9–11] для исследования взаимодействия кластеров между собой использовали метод молекулярной динамики. Данная работа является развитием под-

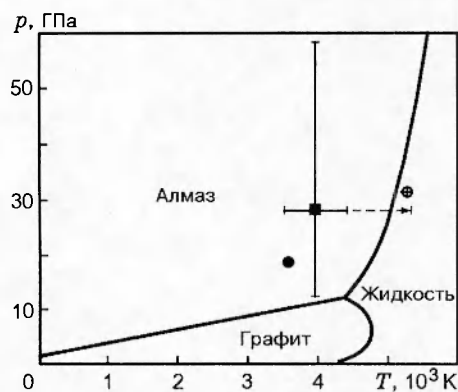


Рис. 1. Фазовая диаграмма углерода:

нанесены параметры в детонационной волне: ● — тротил; ■ — смесь ТГ 40/60; ⊙ — БТФ [6]

хода, предложенного в [11]. Здесь представлены расчеты, позволяющие проследить изменение механизма слипания кластеров при росте их размеров. Зафиксированы значительные механические напряжения переменного знака. Этот эффект может существенно влиять на фазовые переходы углерода, но до сих пор не моделировался. Проведены расчеты коагуляции в присутствии газообразных продуктов детонации.

МЕТОД РАСЧЕТА

Расчеты проводили методом молекулярной динамики (МД). В данной работе для атомов углерода использовали стандартный потенциал межчастичного взаимодействия Леннарда — Джонса

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{b}{r} \right)^{12} - \left(\frac{b}{r} \right)^6 \right)$$

с ограничением радиуса взаимодействия r на расстоянии $2,5b$. Здесь ϵ — энергия связи, b — характерная длина. Результаты расчетов с данным потенциалом автоматизированы по параметрам ϵ и b . Задавая численные значения этих параметров, можно описать поведение конкретных веществ.

Взаимодействие между частицами газа и углерода, а также молекул газа между собой описывалось потенциалом отталкивания

$$U = 4\epsilon_{ij} \left(\frac{b_{ij}}{r} \right)^{12}.$$

Для параметров взаимодействия между газом и атомами углерода использованы обычные соотношения: $b_{12} = (b + b_{22})/2$, $\epsilon_{12} = \sqrt{\epsilon\epsilon_{22}}$ [12].

Моделировалась замкнутая система, т. е. число частиц, объем и полная энергия в ходе расчетов сохранялись.

Уравнения движения частиц интегрировали с помощью алгоритма Верле в скоростной форме. В расчетах использовали следующие безразмерные параметры: температура и энергия в единицах ϵ , время в единицах $\tau = \sqrt{mb^2/\epsilon}$, скорость в единицах $\sqrt{\epsilon/m}$, где m — масса атома углерода. Шаг по времени ограничивался с учетом максимальной скорости частиц так, чтобы частицы смещались за время Δt не более чем на 0,005 характерного размера (b). Это предотвращает нефизическое попадание частиц в область резкого роста потенциальной энергии и обеспечивает лучшее сохранение полной энергии в ходе расчета, т. е. повышает точность. Средний шаг при расчетах Δt был примерно $0,005\tau$. Полная энергия в

ходе расчетов сохранялась с точностью не хуже 0,5%. Во всех расчетах использовали квадратную область с периодическими граничными условиями.

В работе рассмотрены четыре различных варианта начальных условий. Для расчетов квазиплавления начальная конфигурация представляла собой покоящийся уединенный кластер в центре ячейки. Для расчетов конденсации использовалась хаотическая смесь углеродных атомов и молекул газа. Для расчетов взаимодействия кластера с газом покоящийся кластер помещался в центре ячейки и окружался молекулами газа со случайными положениями и скоростями. При расчетах волн напряжения два кластера с нулевыми начальными скоростями помещались на расстоянии действия межатомных сил.

Температуру T вычисляли по средней кинетической энергии атомов. В случае кластера, взаимодействующего с окружающим газом, принималось во внимание движение центра масс кластера и его вращение как целого:

$$T = \frac{m}{(2N - 3)k} \sum_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_{c.m} - \boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{c.m}))^2,$$

где \mathbf{v}_i , \mathbf{r}_i — координаты и скорость i -го атома; $\mathbf{r}_{c.m}$, $\mathbf{v}_{c.m}$ — координаты и скорость центра масс кластера; $\boldsymbol{\Omega}$ — угловая скорость вращения; k — постоянная Больцмана.

Использовали следующие значения параметров: $m = 1,90 \cdot 10^{-22}$ г, $b = 1,54$ Å (соответствует длине связи между атомами углерода в алмазе). Энергия $\epsilon = 2$ эВ выбрана так, чтобы обеспечить некоторый компромисс между совпадением энергий связи (в нашей модели $6\epsilon/2 = 6$ эВ, в алмазе — 7,4 эВ) и совпадением температур плавления (≈ 5000 К для углерода и $0,39\epsilon \approx 8000$ К для двумерного леннард-джонсовского кристалла [13]). При этом масштаб времени $\tau = 3,83 \cdot 10^{-14}$ с, а скорости — $4,02 \cdot 10^5$ см/с. Средний шаг по времени $\Delta t = 1,9 \cdot 10^{-16}$ с. Для молекул газа приняты значения $b_{22} = 2,7b$ и $\epsilon_{22} = 0,01$ эВ.

Потенциал Леннарда — Джонса не воспроизводит кристаллическую решетку углерода, так как дает плотную упаковку с завышенным числом связей. Приведенное выше расхождение между энергиями связи и температурами плавления — одно из следствий грубости модели. Отсюда ясно, что при использовании данного потенциала трехмерные расчеты не приведут к повышению точности. С другой стороны, в двумерном случае для тех же характерных линейных размеров объем вычислений существенно

меньше (т. е. можно моделировать более крупные частицы). Как и во многих других задачах молекулярной динамики, двумерная модель является естественным первым шагом. Разумеется, она дает лишь качественное описание, но все же отражает многие свойства реальной системы.

Известны более сложные потенциалы, способные описать кристаллические состояния алмаза и графита [14, 15]. Однако для этих потенциалов свойства промежуточных состояний и потенциальные барьеры между основными фазами пока недостаточно достоверны. Поэтому такие модели неприменимы к неравновесным динамическим задачам, в которых происходят быстрые переходы между различными состояниями. Например, в [15] моделирование образования C_{60} потребовало специальной подгонки потенциала и дополнительных мер по стимуляции образования кластера. Реалистический потенциал позволил бы, например, воспроизвести фазовый переход, но пока это выглядит достаточно отдаленной перспективой.

Существует строгий подход, основанный на квантовомеханических расчетах [16]. Однако в этом случае объем вычислений очень велик, поэтому в настоящее время удается моделировать лишь поведение систем с малым числом атомов.

В принципе, классическая молекулярная динамика — это качественный подход из-за искусственного характера потенциала. Однако результаты, приведенные ниже, представляются не чувствительными к несовершенству модели. Разумеется, это значит, что цель данной работы — моделирование основных качественных эффектов.

КВАЗИПЛАВЛЕНИЕ

В [11] показано, что коагуляция малых углеродных кластеров — сильно экзотермический процесс, сопровождающийся значительным ростом температуры. Оценки [11] дают повышение температуры ΔT [K] $\sim 4000 \cdot N^{-1/3}$. Для кластера с характерным размером $N = 1000$ это составляет 400 К. На рис. 2, а–е приведен пример взаимодействия двух кластеров малого размера. Температура в этом случае повышается примерно на $0,1\epsilon \approx 2000$ К. Такое увеличение температуры (штриховая стрелка на рис. 1) может привести к тому, что состояние кластера окажется в области жидкости на p – T -диаграмме фазового равновесия углерода.

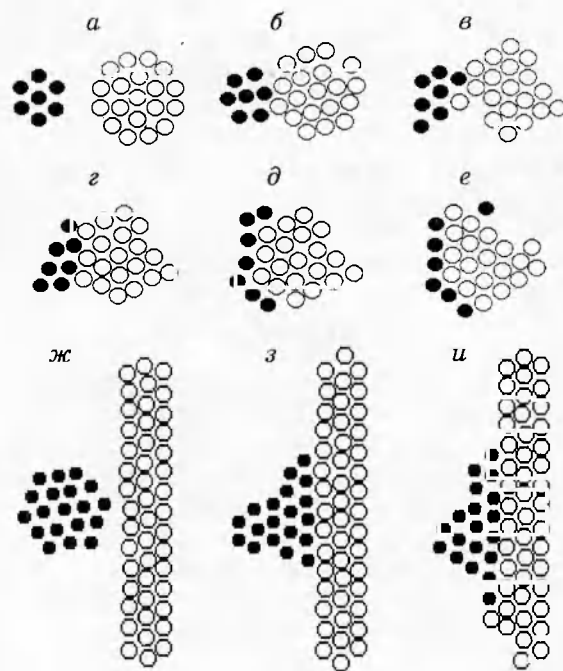


Рис. 2. Взаимодействие двух относительно малых частиц (7 и 19 атомов):

время после начала взаимодействия t , пс: а — 0; б — 0,5; в — 1,1; г — 1,5; д — 2,0; е — 2,9 [11]; моделирование взаимодействия малой (19 атомов) и большой частицы (стенка), t , пс: ж — 1,5; з — 6,1; и — 7,7

В частицах небольших размеров доля поверхностных атомов достаточно велика ($\sim N^{-1/3}$ в трехмерном и $\sim N^{-1/2}$ в двумерном случае). Для наших расчетов это составляет 0,1–0,2. Поверхностные атомы имеют в 1,5–2 раза меньшее число соседей, чем внутренние (3–4 вместо 6 в плоском случае), поэтому их энергия связи меньше. Наши расчеты выполнены для заранее приготовленных термализованных изолированных кластеров с нулевыми суммарными импульсом и моментом импульса и с заданной средней температурой. Построена гистограмма распределения средней потенциальной энергии каждого атома в поле остальных в зависимости от расстояния до центра кластера. Ее характерный вид приведен на рис. 3. Данные расчетов усреднялись в течение 2000 временных шагов.

Большая доля поверхностных атомов приводит к уменьшению средней энергии связи на один атом и к снижению температуры плавления кластера. Уменьшение температуры плавления на сотни градусов наблюдалось экспериментально для ряда веществ [8], а так-

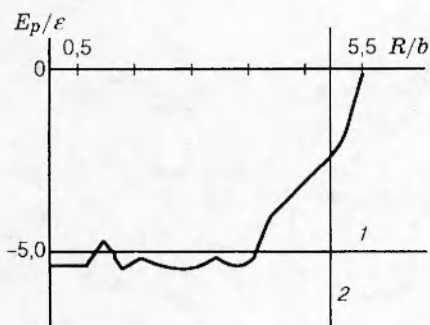


Рис. 3. Зависимость средней потенциальной энергии от расстояния от центра кластера из 61 атома: $kT = 0,2ε$, 1 — граница плавления, 2 — максимальный радиус кластера

же продемонстрировано в численных расчетах [12, 17].

В состоянии теплового равновесия внутри кластера кинетическая энергия всех атомов в среднем одинакова. При этом потенциальные барьеры для атомов поверхностного слоя ниже, чем для внутренних атомов. Это приводит к возможности миграции поверхностных атомов при температуре, недостаточной для полного плавления кластера. Можно сказать, что они находятся в квазирасплавленном состоянии. Такие атомы составляют приблизительно один внешний слой. Их доля выше для кластеров, имеющих незаполненные внешние оболочки. При повышении температуры возможно послеполное плавление кластеров.

Изменение относительной величины нерасплавленной части с ростом числа атомов в кластере показано на рис. 4. Малые частицы (7 атомов) расплавлены полностью.

При взаимодействии больших кластеров поверхностные атомы за счет флуктуаций энергии могут мигрировать вдоль общей поверхности частиц, приводя к образованию единой более компактной структуры. Вероятность таких флуктуаций порядка $\exp(-2ε/kT) \approx 5 \cdot 10^{-5}$ при $T \approx 4000$ К. Поэтому, судя по нашим расчетам, для больших кластеров этот процесс очень длительный, и они просто слипаются гранями, сохраняя форму. При агрегации большого числа таких индивидуальных кластеров образуются фрактальные структуры. Существование таких структур в продуктах детонации подтверждено экспериментальными данными малоуглового рентгеновского рассеяния [7].

Для плоской модели кластеры размером 20

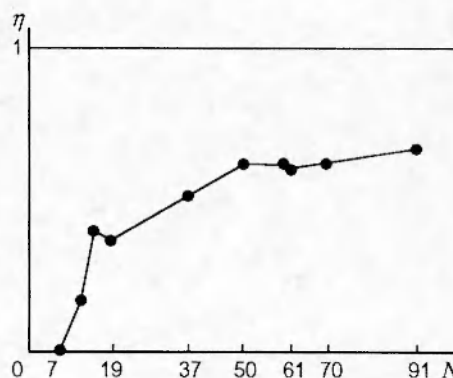


Рис. 4. Зависимость доли атомов в нерасплавленной части кластера от его размера ($kT = 0,2ε$)

частиц почти наполовину расплавлены. В трехмерном случае это соответствует кластерам с $N \approx 100$ атомов, которые при начальной температуре $T_0 = 4000$ К нагреваются за счет экзотермичности примерно на 1000 К. При этом весь кластер окажется в расплавленном состоянии.

Как показано в [7], в процессе выделения углерода крупные частицы растут главным образом за счет потока на их поверхность мелких частиц. Поэтому интерес представляет взаимодействие частиц, одна из которых достаточно крупная. На рис. 2, ж-и показано взаимодействие малой (19 атомов) частицы и большой, которая моделируется стенкой из трех слоев, самый правый из которых фиксирован. Видно растекание малой частицы по поверхности большой. При этом средняя температура повышается более чем на 1000 К.

Проведена также серия расчетов взаимодействия двух кластеров разного размера с $kT_0 = 0,2ε$. Оказалось, что самые маленькие кластеры из 7 атомов, которые полностью расплавлены, всегда сливаются с остальными, причем время этого процесса практически не зависит от размера большего кластера.

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛООБМЕНА

При взаимодействии частиц важную роль играет теплообмен с окружающим газом. Рассматривалась конденсация кластеров из первоначальной смеси атомов углерода с другими (газообразными) продуктами детонации. Начальные концентрации углерода $n_1 = 0,083/b^2$, газа — $n_2 = 0,225/b^2$; $T_0 = 0,1ε \approx 2 \cdot 10^3$ К. Та-

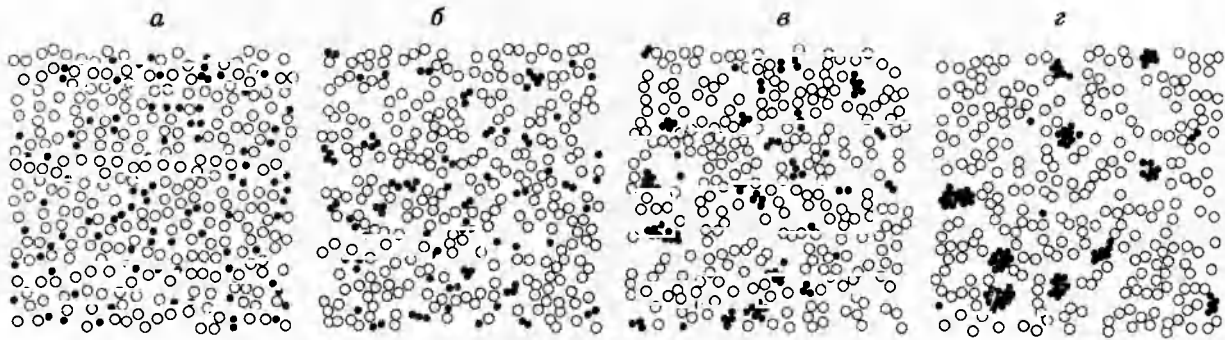


Рис. 5. Конденсация кластеров из исходной газовой смеси:
время после начала взаимодействия t , пс: а — 0; б — 1,7; в — 3,7; г — 8,0

кие концентрации и температура соответствуют параметрам в детонационной волне. Последовательные стадии процесса показаны на рис. 5. Конденсация углерода в основном завершается за $8 \cdot 10^{-12}$ с (210τ). При этом выделяется значительная энергия, соответствующая вкладу конденсации в общую экзотермичность реакции.

Оценим повышение температуры в продуктах детонации за счет коагуляции углерода. Пусть углерод вначале находится в виде одиночных атомов с исходной концентрацией n_1 . При полной коагуляции выделяется энергия $\Delta E = 3\epsilon n_1$. После установления теплового равновесия энергия равномерно распределяется между углеродом и газообразными продуктами детонации, начальная концентрация которых n_2 . Так как при характерных значениях давления и температуры газ представляет собой в основном смесь двухатомных и трехатомных молекул с возбужденными колебательными степенями свободы, теплоемкость в среднем можно считать примерно равной $5k$ на молекулу. В этом случае повышение температуры при постоянном объеме составит

$$\Delta T \approx \frac{n_1 \cdot 3\epsilon}{(3n_1 + 5n_2)k} = \frac{\epsilon}{k} \frac{1}{1 + 5n_2/3n_1}$$

В данном случае $\Delta T \approx 3,2 \cdot 10^3$ К при $n_1/n_2 = 0,27$. В действительности дополнительных скачков температуры такой амплитуды не наблюдается. Это свидетельствует о том, что конденсация углерода происходит одновременно с основной химической реакцией, являясь ее частью.

Были исследованы также флуктуации температуры кластера за счет теплообмена с окружающим газом. Один кластер с $kT \sim 0,2\epsilon$

помещался в центр ячейки, заполненной молекулами газа с той же температурой. Средние концентрации углерода и газа в ячейке те же, что и в предыдущем случае. Исследовали флуктуации температуры кластера в течение $7,7 \cdot 10^{-12}$ с (200τ). В ходе всего расчета кластер оставался связным, что контролировалось визуально.

На рис. 6 представлен характерный график доли времени, проводимого кластером в каждом интервале температур. Видно, что распределение близко к нормальному. Поэтому можно определить среднеквадратичное отклонение температуры $\langle \delta T \rangle$.

Среднеквадратичное отклонение температуры уменьшается при росте числа атомов в кластере как $\langle \delta T \rangle \sim 1/\sqrt{N}$. Флуктуации температуры для характерного размера кластера

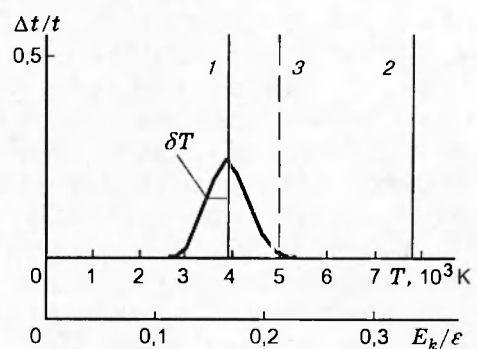


Рис. 6. Доля времени, в течение которого кластер из 61 атома находится при различных температурах:

1 — средняя температура кластера, 2 — температура плавления для двумерной модели, 3 — температура плавления алмаза при давлении ~ 30 ГПа

показаны горизонтальными линиями на рис. 1. Величина $\langle \delta T \rangle$ того же порядка, что и повышение температуры за счет экзотермичности коагуляции. Следовательно, такое энергетическое взаимодействие с окружающим газом тоже надо принимать во внимание. Для трехмерного случая повышение температуры за счет экзотермичности уменьшается с ростом числа частиц как $\sim N^{-1/3}$, а величина флуктуации температуры — как $\sim N^{-1/2}$. Поэтому следует ожидать, что термические флуктуации состояния трехмерного кластера в целом будут играть заметную роль только для самых малых частиц.

ВОЛНЫ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ КОАГУЛЯЦИИ

При взаимодействии двух первоначально покоящихся кластеров сначала заметная часть потенциальной энергии их притяжения переходит в кинетическую энергию их сближения. Затем происходит столкновение частиц и их сжатие. При этом скорость соударения $u \sim 5 \cdot N^{-1/6}$ км/с (оценка [11]) значительно больше тепловой скорости броуновского движения $v \sim 3 \cdot \bar{v}^{-1/2}$ км/с. Амплитуда давления в волне сжатия, возникающей при таком столкновении, $p \sim 3 \cdot 10^{10}$ Па [11].

При моделировании процесса взаимодействия двух частиц вычисляли средние по сечению продольное напряжение σ_{xx} и давление внутри каждого кластера $p = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$. Для расчетов σ_{xx} через центр каждого кластера проводили контрольную поверхность, перпендикулярную прямой, соединяющей их центры. Напряжение вычисляли по формуле

$$\sigma_{xx} = \frac{\sum \Delta p_x}{S \Delta t},$$

где $\sum \Delta p_x = \sum'_{i,j} \mathbf{f}_{ij} \cdot \mathbf{n}_x \Delta t + \sum''_i m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_x$ — суммарный поток импульса через данную поверхность. Здесь \mathbf{f}_{ij} — сила взаимодействия атомов i и j , \mathbf{n}_x — единичный вектор в направлении оси x , S — площадь поперечного сечения, \sum' — сумма по парам атомов, находящихся по разные стороны контрольной поверхности, \sum'' — сумма по атомам, пересекающим поверхность за последний временной шаг. Для расчетов давления контрольную поверхность задавали в виде окружности, центр которой находился в центре масс кластера, а радиус равнялся среднему расстоянию атомов от центра. Полученные результаты осреднялись за 500–750 шагов, что соответствует 2–3 периодам колебаний атомов.

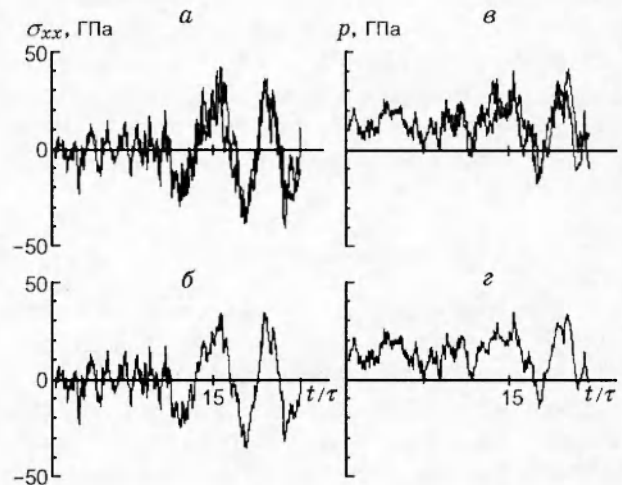


Рис. 7. Напряжение σ_{xx} (а, б) и давление p в центральной области частиц (в, з):

на а и в (на каждом) приведены графики напряжений и давлений в левой и правой частицах, на б и з — средние по обеим частицам величины

На рис. 7 показаны осредненные напряжения при соударении двух одинаковых кластеров, содержащих по 91 атому с начальной температурой $kT_0 = 0,205\epsilon$. Первоначально кластеры находились в состоянии покоя на расстоянии действия межатомных сил. Видно, что вначале кластеры притягиваются слой за слоем, что приводит к возникновению первичной волны разрежения. После соударения идет волна сжатия, которая затем отражается от задней поверхности в виде волны разрежения. Амплитуда как фазы сжатия, так и фазы разрежения достигает 30 ГПа. Графики давления включают положительную постоянную составляющую — лапласовское давление. (Поскольку величина σ_{xx} осреднялась по всему сечению кластера, она учитывает как повышенное давление в центральной части, так и натяжение поверхностной пленки, которые в среднем компенсируются.) Растягивающие и сдвиговые напряжения появляются также из-за боковой разгрузки.

Таким образом, частицы при взаимодействии подвергаются знакопеременной нагрузке амплитудой в десятки гигапаскалей. Изменение состояния кластера за счет волн напряжения представлено вертикальными линиями на $p - T$ -диаграмме (см. рис. 1). Этот эффект, возможно, объясняет необходимость значительного запаса по давлению для заметного выхода алмазов [18], чтобы в волне разгрузки

не попасть в область фазовой диаграммы углерода (см. рис. 1), где возможен переход алмазной фазы в графит. Другим объяснением может являться сдвиг кривой фазового равновесия для малых углеродных частиц [19]. В реальности, видимо, важны оба процесса.

ВЫВОДЫ

При взаимодействии малых кластеров выделяется значительная энергия, поэтому частицы сильно разогреваются. Расчеты дают повышение температуры, согласующееся с теоретической оценкой [11]. Кроме того, атомы, находящиеся вблизи поверхности, имеют меньшую потенциальную энергию, что позволяет говорить о квазиплавлении поверхности. Оба эффекта действуют в одном направлении и приводят к возможности коагуляции достаточно мелких частиц при температуре заметно ниже температуры плавления. Для рассмотренных кластеров влияние экзотермичности и квазиплавления одного порядка.

Полученные при расчетах флуктуации температуры кластера за счет взаимодействия с окружающим газом имеют тот же порядок величины, что и повышение температуры за счет экзотермичности. Их знак, однако, может быть любым. Кроме того, флуктуации быстрее спадают при увеличении размеров кластера, поэтому их роль в процессе коагуляции, по видимому, мала.

При столкновении кластеров наблюдаются волны механических напряжений переменного знака с амплитудой, достигающей 30 ГПа, которые могут влиять на фазовые переходы углерода.

Рассмотрена конденсация кластеров из исходной газовой смеси. Она в основном завершается за время порядка нескольких пикосекунд. Наличие газа не препятствует конденсации. Наблюдаются значительное энерговыделение и повышение температуры, соответствующее вкладу конденсации углерода в общую экзотермичность реакции.

Проведенные расчеты показали, что температура и давление при взаимодействии углеродных кластеров могут существенно отклоняться от средних значений (см. рис. 1). Это позволяет качественно объяснить основные особенности образования алмазных частиц непосредственно во фронте детонационной волны.

Работа выполнена при частичной поддержке Ливерморской лаборатории (контракт N В 232589).

ЛИТЕРАТУРА

1. Greiner N. R., Phillips D. S., Johnson J. D., Volk F. Diamonds in detonation soot // *Nature*. 1988. V. 333, N 6172. P. 440-442.
2. Лямкин А. И., Петров Е. А., Ершов А. П. и др. Получение алмазов из взрывчатых веществ // Докл. АН СССР. 1988. Т. 302, № 3. С. 611-613.
3. Волков К. В., Даниленко В. В., Елин В. И. Синтез алмаза из углерода продуктов детонации ВВ // *Физика горения и взрыва*. 1990. Т. 26, № 3. С. 123-125.
4. Выскубенко Б. А., Даниленко В. В., Лин Э. Э. и др. Влияние масштабных факторов на размеры и выход алмазов при детонационном синтезе // *Физика горения и взрыва*. 1992. Т. 28, № 2. С. 108-109.
5. Мальков И. Ю., Филатов Л. И., Титов В. М. и др. Образование алмаза из жидкой фазы углерода // *Физика горения и взрыва*. 1993. Т. 29, № 4. С. 131-134.
6. Углерод в детонационных процессах (часть В): Отчет по контракту с Ливерморской Национальной лабораторией им. Лоуренса // Титов В. М., Мальков И. Ю., Ершов А. П., Куперштох А. Л., Митрофанов В. В. Новосибирск: Ин-т гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 1994.
7. Ершов А. П., Куперштох А. Л. Образование фрактальных структур при взрыве // *Физика горения и взрыва*. 1991. Т. 27, № 2. С. 111-117.
8. Петров Ю. И. Физика малых частиц. М: Наука, 1982.
9. Казакова И. В., Анисичкин В. Ф., Гадияк Г. В. Молекулярно-динамическое моделирование процессов столкновения двумерных кластеров. Новосибирск, 1992. (Препр. / РАН. Сиб. отд-ние. Институт теоретической и прикладной механики; № 15-92).
10. Казакова И. В., Анисичкин В. Ф., Гадияк Г. В. Моделирование столкновения двумерных кластеров // *Хим. физика*. 1994. Т. 13, № 3. С. 35-44.
11. Ершов А. П., Куперштох А. Л. Экзотермическая коагуляция малых кластеров во фронте детонационной волны // *Письма в ЖТФ*. 1993. Т. 19, № 2. С. 76-80.
12. Broughton J. Can clusters be superheated? // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 67, N 21. P. 2990-2993.

13. **Broughton J. Q., Gilmer G. H.** Molecular dynamics investigation of the crystal-fluid interface. I. Bulk properties // *J. Chem. Phys.* 1983. V. 79, N 10. P. 5095-5104.
14. **Tersoff J.** Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 38, N 14. P. 9902-9905.
15. **Chelikowsky J. R.** Nucleation of C₆₀ clusters // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 67, N 21. P. 2970-2973.
16. **Car R., Parrinello M.** Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory // *Phys. Rev. Lett.* 1985. V. 55, N 22. P. 2471-2474.
17. **Lynden-Bell R. M., Wales D. J.** Free energy barriers to melting in atomic clusters // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 101, N 2. P. 1460-1476.
18. **Титов В. М., Анисичкин В. Ф., Мальков И. Ю.** Исследование процесса синтеза ультрадисперсного алмаза в детонационных волнах // *Физика горения и взрыва.* 1989. Т. 25, № 3. С. 117-126.
19. **Губин С. А., Одинцов В. В., Пепкин В. И., Сергеев С. С.** Влияние формы и размера кристаллов графита и алмаза на фазовое равновесие углерода и параметры детонации ВВ // *Хим. физика.* 1990. Т. 9, № 3. С. 410-417.

*Поступила в редакцию 1/IV 1996 г.,
в окончательном варианте — 27/III 1998 г.*
