

УДК 51.72

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНОГО СЖАТИЯ ЖИДКОЙ И ПАРООБРАЗНОЙ ВОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА АЛМАЗА ИЗ ГРАФИТА

Л. В. Шуршалов

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

Рассмотрены примеры расчета ударного сжатия жидкой воды и водяного пара с использованием некоторым образом скорректированного упрощенного уравнения состояния воды Нигматулина — Болотновой. Основное внимание уделено достижению тех параметров численного моделирования (прежде всего, температуры воды), которые могут быть полезными при синтезе алмаза из графита. Показано, что благоприятным фактором для достижения требуемой температуры является ударное сжатие предварительного нагретого слоя жидкой воды. Еще более перспективным представляется использование вместо жидкой воды слоя нагретого водяного пара. В последнем случае для достижения нужных температур и давлений требуется существенно меньшая скорость ударника.

Ключевые слова: ударное сжатие, разгрузка воды в жидкой и парообразной фазе, корректировка уравнения состояния воды, синтез алмаза из графита, способы повышения температуры ударного сжатия.

DOI 10.15372/FGV20200113

## ВВЕДЕНИЕ

При численном моделировании физических экспериментов существенное значение имеют применяемые в расчетах уравнения состояния сред. От правильности представления ими реальных свойств веществ во многом зависит соответствие получаемых результатов численного моделирования реальному ходу физических процессов. В работах [1–4] проводилось численное моделирование ударного сжатия графита в условиях, когда он был погружен в жидкую воду или представлял собой мелкие частицы, смешанные с водой. При этом в качестве уравнения состояния воды использовалось некоторое идеализированное, так называемое двучленное уравнение состояния (подробнее см. в [1, 5, 6]). Был получен ряд интересных результатов, часть из которых, очевидно, не зависит или зависит слабо от применявшегося уравнения состояния, а другая часть требует проверки либо в реальном физическом эксперименте, либо в расчетах с применением уравнения состояния воды, более приближен-

ного к реальности.

В настоящее время еще нет общепринятого уравнения состояния воды, пригодного для ее описания в требуемом диапазоне термодинамических параметров (давление в диапазоне от нулевого до  $100 \div 200$  ГПа, температура от нормальной до  $2000 \div 4000$  К, удельный объем от  $0.0002 \div 0.0003$  до  $10 \text{ м}^3/\text{кг}$  и более). Из имеющихся уравнений состояния воды как в жидком, так и в парообразном состоянии наиболее продвинутыми и надежными, на наш взгляд, представляются уравнения состояния из работ [7–9]. При этом уравнение состояния воды из [7, 8] является наиболее общим, но и очень сложным по форме, что затрудняет его широкое использование. Это подвигло авторов данного уравнения состояния разработать его упрощенную версию, которая, несмотря на определенные ограничения, «достоверно описывает термодинамические свойства парожидкостной системы и существенно облегчает и ускоряет процесс гидродинамических расчетов» [9].

В данной работе упрощенное уравнение состояния воды [9] с некоторой его корректировкой используется в условиях, приближенных к требуемым при численном моделировании ударного сжатия смеси воды с графитом.

Работа частично выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 2019-0054-6.

Получающиеся результаты сопоставлены с теми, которые были получены ранее на основе двучленного уравнения состояния. Выявлены сходство и расхождение результатов. И главное, намечены наиболее подходящие условия для проведения будущих расчетов по ударному сжатию графита в водном окружении, имеющих конечной целью нахождение наиболее благоприятных условий для получения из графита алмаза.

Здесь мы ограничиваемся рассмотрением ряда задач об ударном сжатии и разгрузке чистой жидкой воды или водяного пара без присутствия графита в какой-либо форме. Однако, как показали наши предыдущие исследования [3], при концентрации графитовых частиц в воде, не превышающих по объемной доле 0.1, поведение воды практически не зависит от присутствия графитовых частиц. Поэтому полученные в данной работе результаты в какой-то мере могут рассматриваться и как относящиеся к смеси жидкой воды или водяного пара с графитовыми частицами, но при их малой объемной концентрации.

### УПРОЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВОДЫ И ЕГО КОРРЕКТИРОВКА

Применяемое упрощенное уравнение состояния воды имеет следующий общий вид (дальнейшие обозначения несколько отличаются от представленных в работе [9]):

$$p = f(v) + F(v)T, \quad (1)$$

$$E(v, T) = c_v T + E_1(v) + \varepsilon_0.$$

Здесь  $T$  — температура,  $v$  — удельный объем,  $f(v)$  — упругая (холодная) часть давления воды,  $F(v)$  — температурный коэффициент давления,  $E(v, T)$  — внутренняя энергия воды,  $E_1(v) = -\int f(v)dv$  — ее упругая часть,  $c_v$  — изохорная удельная теплоемкость. Последняя предполагается кусочно-постоянной. В области жидкой воды она равна значению удельной теплоемкости воды при нормальных условиях, т. е.  $c_v = c_{vw} = 4150$  Дж/(кг · К). В области водяного пара  $c_v = c_{vv} = 1430$  Дж/(кг · К). При любой температуре области жидкости отвечает объем  $v < v_{cr}$ , области пара —  $v > v_{cr}$ , где  $v_{cr}$  — удельный объем, соответствующий критической точке воды. Произвольная постоянная в выражении для внутренней энергии в области жидкой воды принимается равной нулю. В области пара из условия согласования энергий на

линии насыщения  $\varepsilon_0 = 1.93 \cdot 10^6$  Дж/кг. В качестве нормальных условий принимаются давление  $p_1 = 1.01325 \cdot 10^5$  Па, температура  $T_1 = 293$  К и соответствующий им удельный объем воды  $v_1 = 1.0018v_{00}$ , где  $v_{00} = 10^{-3}$  м<sup>3</sup>/кг. Приведем входящие в (1) функции из [9].

Упругая часть давления:

$$f(v) = A(v/v_0)^{\beta-1} \exp\{b[1 - (v/v_0)^\beta]\} - K(v/v_0)^{-\xi-1}. \quad (2)$$

Упругая часть внутренней энергии:

$$E_1(v) = Av_0 \exp\{b[1 - (v/v_0)^\beta]\} / (\beta b) - (Kv_0/\xi)(v/v_0)^{-\xi} + \varepsilon^0, \quad (3)$$

где  $v_0 = 1.001803v_{00}$ ,  $A = 0.6726$  ГПа,  $b = 11.55$ ,  $\beta = 0.3333$ ,  $\xi = 0.85$ ,  $K = 1.15$  ГПа,  $\varepsilon^0 = 1.2381 \cdot 10^6$  Дж/кг.

Температурный коэффициент давления:

$$F(v) = \{a^{(0)} + (1 - a^{(0)}) \exp[-(v^{(0)}/v)^{1.7}] + a^{(1)} \exp[-(v^{(1)}/v)^{-3.5}] + a^{(2)} \exp[-(v^{(2)}/v)^{-5}]\} R / (M_w v), \quad (4)$$

где  $R = 8310$  Дж/(кмоль · К),  $M_w = 18$  кг/кмоль,  $a^{(0)} = 2.95$ ,  $a^{(1)} = 2.408$ ,  $a^{(2)} = 12.151$ ,  $v^{(0)} = v_0/0.5273$ ,  $v^{(1)} = v_0/1.0904$ ,  $v^{(2)} = v_0/1.3927$ .

Теперь отметим одно существенное обстоятельство, которое не всегда принимается во внимание.

Приведем выражение для ударной адиабаты жидкой воды относительно начального состояния с давлением  $p_1$ , температурой  $T_1$  и удельным объемом  $v_1$ :

$$E(v_2, T_2) - E(v_1, T_1) = 0.5(p_2 + p_1)(v_1 - v_2). \quad (5)$$

Здесь  $v_2$ ,  $T_2$ ,  $p_2$  — удельный объем, температура и давление за фронтом ударной волны. Для уравнения состояния рассматриваемого вида

$$p_2(v_2) = f(v_2) + F(v_2)T_2,$$

$$E(v_2, T_2) = c_{vw}T_2 + E_1(v_2) = c_{vw}[p_2(v_2) - f(v_2)]/F(v_2) + E_1(v_2).$$

Разрешая (5) относительно  $p_2$ , получаем

$$p_2(v_2) = [0.5p_1(v_1 - v_2) + c_{vw}f(v_2)/F(v_2) - E_1(v_2) + E_1(v_1) + c_{vw}T_1]/[c_{vw}/F(v_2) - 0.5(v_1 - v_2)].$$

Стоящее в знаменателе выражение, будучи положительным для самой слабой (звуковой) ударной волны с  $v_1 = v_2$ , должно оставаться таковым и для ударных волн любой интенсивности. Отсюда следует ограничение сверху на значение функции  $F(v_2)$ :

$$F(v_2) < c_{vw}/[0.5(v_1 - v_2)]. \quad (7)$$

Если в соотношении (7) взять знак равенства, то получится уравнение ограничивающей кривой, при приближении к которой снизу  $p_2(v_2)$  и  $T_2(v_2)$  будут стремиться к бесконечности.

В отношении функции  $F(v)$  вида (4) данное ограничение иллюстрирует рис. 1, на котором ограничивающая кривая показана линией 4, а функция  $F(v)$  вида (4) — линией 1. Здесь же линией 2 показан температурный коэффициент давления для двучленного уравнения состояния, использовавшегося нами ранее в работах [1–4], а линией 3 — график скорректированной функции  $F(v)$ , о получении которой пойдет речь ниже.

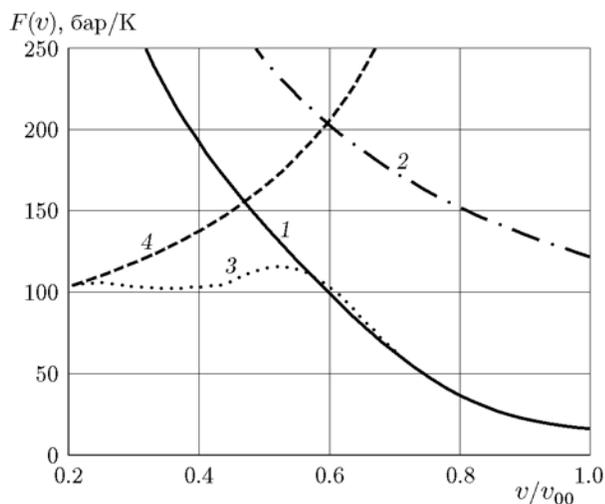


Рис. 1. Температурный коэффициент давления  $F(v)$ :

1 — упрощенное уравнение состояния из работы [9], 2 — двучленное уравнение состояния, 3 — скорректированное упрощенное уравнение состояния, 4 — ограничивающая кривая

О том, какие последствия имеет факт пересечения ограничивающей кривой, можно видеть из рис. 2, на котором в тех же обозначениях приведены ударные адиабаты, рассчитанные по вышеупомянутым уравнениям состояния. Точками на рисунке показаны результаты измерения давления на ударном фронте [10–14]. Видно, что ударная адиабата, построенная по упрощенному уравнению состояния воды [9], при приближении к тому значению удельного объема, при котором кривая  $F(v)$  пересекает ограничивающую линию, начинает отходить от экспериментальных значений и устремляется в бесконечность. Еще раньше такое же поведение демонстрирует ударная адиабата для двучленного уравнения состояния. Скорректированное упрощенное уравнение состояния воды, предлагаемое в данной работе, великолепно согласуется с экспериментом во всем рассмотренном диапазоне.

На рис. 3 в тех же обозначениях представлены зависимости температуры  $T_2$  на ударном фронте, демонстрирующие такие же закономерности поведения. Здесь точками показаны экспериментально измеренные значения температуры из работ [12–14]. Как и на предыдущем рисунке, температура, рассчитанная по скорректированному уравнению состояния, очень хорошо согласуется с экспериментом. Характерно, что при одинаковых удельных объемах значения температуры, получающиеся при использовании двучленного уравнения состояния

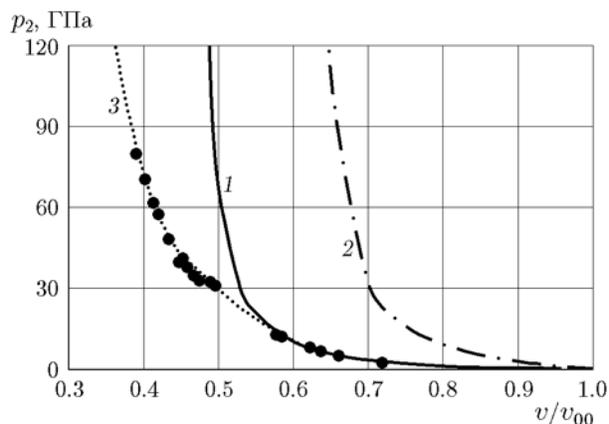


Рис. 2. Ударные адиабаты, рассчитанные по трем уравнениям состояния жидкой воды:

1 — упрощенное уравнение состояния из работы [9], 2 — двучленное уравнение состояния, 3 — скорректированное упрощенное уравнение состояния, точки — данные экспериментов [10–14]

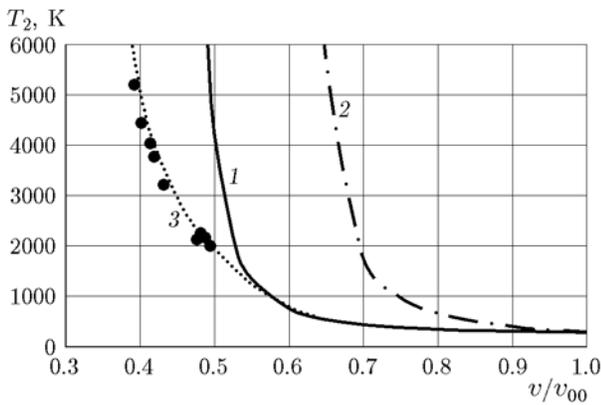


Рис. 3. Температура на ударной адиабате, рассчитанная по трем уравнениям состояния жидкой воды:

1 — упрощенное уравнение состояния из работы [9], 2 — двучленное уравнение состояния, 3 — скорректированное упрощенное уравнение состояния, точки — данные экспериментов [12–14]

и нескорректированного упрощенного уравнения состояния воды, оказываются существенно больше по сравнению с расчетом по скорректированному уравнению состояния, начиная с некоторых значений удельного объема.

Теперь о сути предлагаемой корректировки упрощенного уравнения состояния воды [9]. Прежде всего, эта корректировка никак не затрагивает функции упругого давления  $f(v)$  и упругой энергии  $E_1(v)$ . Они остаются в виде формул (2), (3). Температурный коэффициент давления  $F(v)$  сохраняет вид (4) для всех  $v \geq 0.7v_{00}$ .

Для меньших удельных объемов применяется следующая процедура.

Мы воспользуемся аппроксимацией экспериментальной ударной адиабаты воды  $D(u)$  из работы [15] в переменных  $D, u$ , где  $D$  — скорость ударного фронта,  $u$  — скорость воды за ударным фронтом, переведем ее в переменные  $p_2, v_2$ . В первоначальных переменных  $D, u$  эта аппроксимация имеет вид [15]

$$D = C_0 + Ku - \varepsilon u^2, \quad 0 \leq u \leq u_{12}, \quad (8)$$

$$D = D_0 + 1.27u, \quad u_{12} < u < \infty, \quad (9)$$

где  $C_0 = 1483$  м/с — скорость звука в начальной точке ударной адиабаты (при нормальных условиях),  $K = 2$ ,  $\varepsilon = 0.0001$  с/м,  $D_0 = 2610$  м/с,  $u_{12} = 5082.65$  м/с — точка перехода от квадратичной зависимости к линейной.

В переменных  $p_2, v_2$  зависимости (8), (9) представляются выражениями

$$p_2(v_2) = p_1 + D[u(v_2)]u(v_2)/v_1, \quad (10)$$

$$u(v_2) = [K(1 - v_2/v_1) - 1 + \{[K(1 - v_2/v_1) - 1]^2 + 4\varepsilon(1 - v_2/v_1)^2 C_0\}^{1/2}] / [2\varepsilon(1 - v_2/v_1)],$$

$$v_{12} \leq v_2 < v_1, \quad (11)$$

$$u(v_2) = D_0(1 - v_2/v_1) / [1 - 1.27(1 - v_2/v_1)],$$

$$v_{\min} < v_2 < v_{12},$$

где  $v_{12} = 0.440099v_{00}$ ,  $v_{\min} = 0.212981v_{00}$  — удельный объем предельного сжатия воды в ударной волне при принятой линейной аппроксимации ударной адиабаты при больших скоростях  $u$ .

Перейдем теперь непосредственно к нахождению функции  $F(v)$  для области  $v \leq 0.7v_{00}$ . Для этого надо вернуться к уравнению (5) с исключенной по формуле (6) температурой  $T_2$  и определить функцию  $p_2(v_2)$  формулами (10), (11). Разрешая (5) относительно  $F(v_2)$  и заменяя  $v_2$  на  $v$ , получаем искомую функцию

$$F(v) =$$

$$= c_{vw}[p_2(v) - f(v)] / \{0.5[p_2(v) + p_1](v_1 - v) + c_{vw}T_1 + E_1(v_1) - E_1(v)\}, \quad (12)$$

где  $f(v)$ ,  $E_1(v)$  и  $p_2(v)$  определяются формулами (2), (3) и (10), (11). Вид этой функции, представленный на рис. 1, показывает, что она практически гладко стыкуется в точке  $v = 0.7v_{00}$  с функцией  $F(v)$ , определяемой уравнением (4). Математически точной гладкой стыковки нет, так как ударные адиабаты, определяемые упрощенным уравнением состояния из [9] и аппроксимацией ударной адиабаты (8), (10), хотя и очень близки, но все же точно не совпадают. В частности, это ведет к различию значений скорости звука в точке стыковки примерно 3 %, что, на наш взгляд, не столь критично.

Приведем также формулу для температуры на ударной адиабате:

$$T_2 = \{0.5[p_2(v_2) + p_1](v_1 - v_2) + c_{vw}T_1 + E_1(v_1) - E_1(v_2)\} / c_{vw}, \quad (13)$$

которая следует из формул (1), (5).

Сделаем одно замечание по поводу скорректированного уравнения состояния. Упрощенное уравнение состояния Нигматулина — Болотновой [9] предназначено для описания свойств воды в ее молекулярной фазе. При выходе в область параметров, где имеют место процессы диссоциации и ионизации, авторы предлагают обращаться к разработанному ими более полному, но и более сложному уравнению состояния [7, 8]. Предлагаемая здесь коррекция упрощенного уравнения состояния воды расширяет область его применения за пределы молекулярной фазы воды, сохраняя простоту записи уравнения состояния. При этом, поскольку при построении этой коррекции использовались, по существу, экспериментальные данные по ударной адиабате воды, которые, очевидно, содержат в себе эффекты диссоциации, ионизации и даже фазового перехода [15], то и предлагаемая коррекция в какой-то степени может учитывать эти процессы.

### ЗАДАЧА ОБ УДАРНОМ СЖАТИИ СЛОЯ ВОДЫ У ЗАКРЫТОГО КОНЦА ТРУБЫ

Рассмотрим несколько вариантов задачи о воздействии стального ударника на покоящийся слой жидкой воды, расположенный у закрытого конца трубы с абсолютно жесткими стенками.

Сначала возьмем случай, когда слой жидкой воды, располагающийся у закрытого неподвижного конца трубы, имеет толщину 0.01 м. Поскольку рассматривается одномерное течение, то радиус трубы не имеет значения. Но для определенности будем считать его равным 0.005 м. Вода в начальный момент имеет плотность  $\rho_w = 998.2 \text{ кг/м}^3$ , температуру  $T_1 = 293 \text{ К}$ , давление  $p_1 = 1.01325 \cdot 10^5 \text{ Па}$  и нулевую скорость. По воде со скоростью 1300 м/с бьет стальной ударник такого же радиуса, толщиной 0.02 м. Давление и температура ударника такие же, как у воды, плотность  $\rho_{sh} = 7874 \text{ кг/м}^3$ . Требуется рассчитать возникающее течение и посмотреть, какие температуры и давления будут при этом достигаться.

Расчет поставленной задачи ведется на основе уравнений гидродинамики для одномерных течений теплопроводной сжимаемой жидкости (см. [3]). Применяется метод Годунова [5] с использованием подвижной разностной сетки с выделенными границами — линией раздела

между ударником и слоем воды и тыльной стороной ударника. Такой подход позволяет получать достаточно точные результаты решения на довольно грубых сетках.

В качестве уравнения состояния вещества ударника использовалось табличное уравнение состояния железа, основанное на экспериментально измеренных свойствах железа в широком диапазоне термодинамических параметров [16].

Теплопроводность сред предполагалась постоянной. В дальнейших расчетах эффекты теплопроводности проявляли себя очень слабо, в основном в малой окрестности границ раздела веществ.

На рис. 4 показаны давление и температура жидкой воды в точке, прилегающей к закрытому концу трубы, в зависимости от времени, полученные в расчетах с использованием скорректированного упрощенного уравнения состояния воды (линии 1) и двучленного уравнения состояния воды (линии 2). В обоих случа-

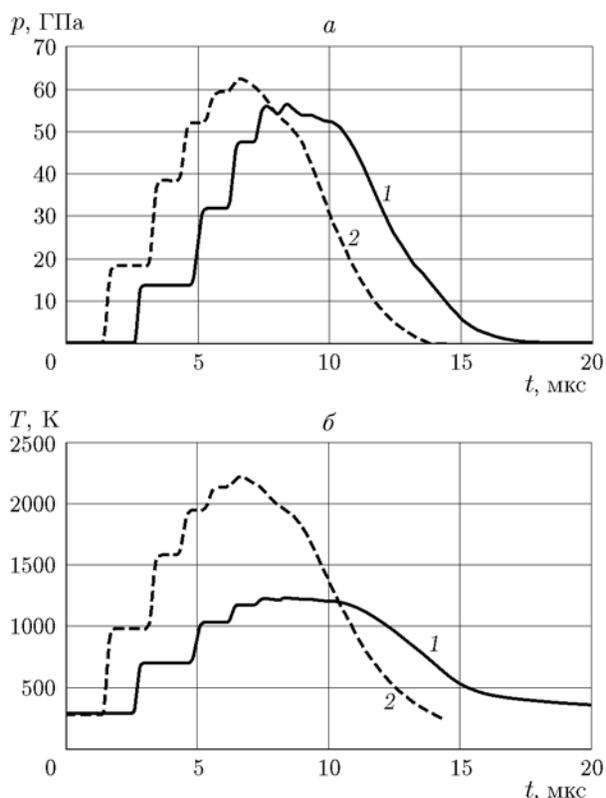


Рис. 4. Давление (а) и температура (б) при ударном сжатии жидкой воды, рассчитанные по скорректированному уравнению состояния (1) и двучленному уравнению состояния (2)

ях стадия нарастания давления и температуры имеет ступенчатый характер, связанный с последовательными отражениями ударной волны от стенки и от ударника. Стадия падения температуры и давления имеет более плавный, практически изоэнтропический характер в силу ослабления ударных волн, «гуляющих» между стенкой трубы и ударником.

Как видно, значения давления при расчетах по двум уравнениям состояния близки. Имеется лишь существенный сдвиг кривых по времени, связанный с различием скоростей распространения возмущений при использовании разных уравнений состояния. Что касается температуры, то здесь наблюдается большое различие. Максимальная температура в «реальной» воде оказывается почти вдвое меньше. Это очень существенно с точки зрения перспектив получения алмаза из графита в эксперименте с такими условиями. Данные работы [17] показывают, что область быстрого образования кубического алмаза начинается с температуры 1900 К и давления 25 ГПа. Если необходимые давления при данном численном ударном моделировании достигаются легко, то температуру «реальной воды» нужно увеличивать существенно. Ниже обсуждаются некоторые возможные модификации численной модели для достижения большей температуры.

Первым и, казалось бы, наиболее естественным способом повышения температуры представляется увеличение скорости ударника. Результаты расчетов с изменяющейся скоростью ударника  $V_{sh}$  при тех же начальных значениях температуры, плотности и давления воды и ударника, как и в предыдущем примере, представлены на рис. 5, *a* линией 1. Как видно, температуры, превосходящие 2000 К, получаются при скоростях ударника, превышающих 2100 м/с.

Усилить воздействие на воду можно и за счет увеличения массы ударника при той же скорости удара. Если материал ударника один и тот же, как в нашем случае, то можно говорить об увеличении толщины ударника. При этом, помимо усиления энергетического и импульсного воздействия, дополнительно увеличивается длительность стадии нагрузки воды, а разгрузка начинается позднее. Для тех же исходных параметров воды и материала ударника на рис. 5, *a* линией 2 показана максимальная температура, достигаемая при использовании ударника толщиной 0.04 м и, соответствен-

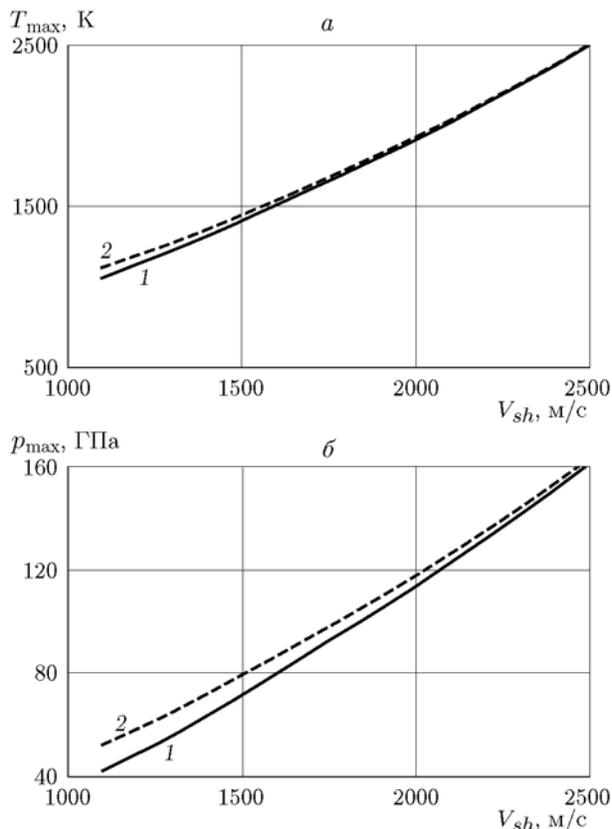


Рис. 5. Максимальная температура (*a*) и давление (*б*) в жидкой воде в зависимости от скорости ударника толщиной 0.02 (1), 0.04 м (2)

но, вдвое большей массы при разных скоростях ударника. Как видно, выигрыш в температуре здесь очень небольшой.

Интересно посмотреть, как при сохранении тех же исходных условий при увеличении скорости ударника повышается максимальное давление в воде. Соответствующие данные, приведенные на рис. 5, *б* для ударника толщиной 0.02 и 0.04 м, показывают, что увеличение температуры жидкой воды за счет увеличения скорости ударника или его массы достигаются «дорогой» ценой. Получающиеся давления возрастают до 120 ГПа. Такие высокие давления не являются необходимыми для получения алмаза и лишь осложняют реальный физический эксперимент. Поэтому попытки повысить температуру воды за счет увеличения скорости ударника (и тем более его массы) представляются малоперспективными. Гораздо более привлекательны другие подходы, излагаемые далее.

Посмотрим, как будет проходить процесс

сжатия покоящегося слоя жидкой воды, если он предварительно подогрет тем или иным способом до определенной температуры. Результаты соответствующих расчетов представлены на рис. 6. Начальная температура воды менялась в диапазоне от нормальной (293 К) до  $T_0 = 800$  К. Предполагалось, что при начальном нагреве воды ее плотность  $\rho_w = 998.2$  кг/м<sup>3</sup> не изменялась (т. е. она находилась как бы в прочной закрытой емкости с неизменяемым объемом). Начальное давление в воде при этом, естественно, возрастало от  $p_1$  до  $\approx 800$  МПа.

Как об этом говорилось выше, по такому слою жидкой воды толщиной 0.01 м ударяет стальной ударник толщиной 0.02 м со скоростью 1300 м/с, имеющий начальную температуру  $T_1 = 293$  К, давление  $p_1 = 1.01325 \cdot 10^5$  Па и начальную плотность  $\rho_{sh} = 7874$  кг/м<sup>3</sup>. Для нас наибольший интерес представляют максимальные температуры и давления, достигаемые при этом в слое воды.

На рис. 6,а представлены соответствующие данные по максимальной температуре.

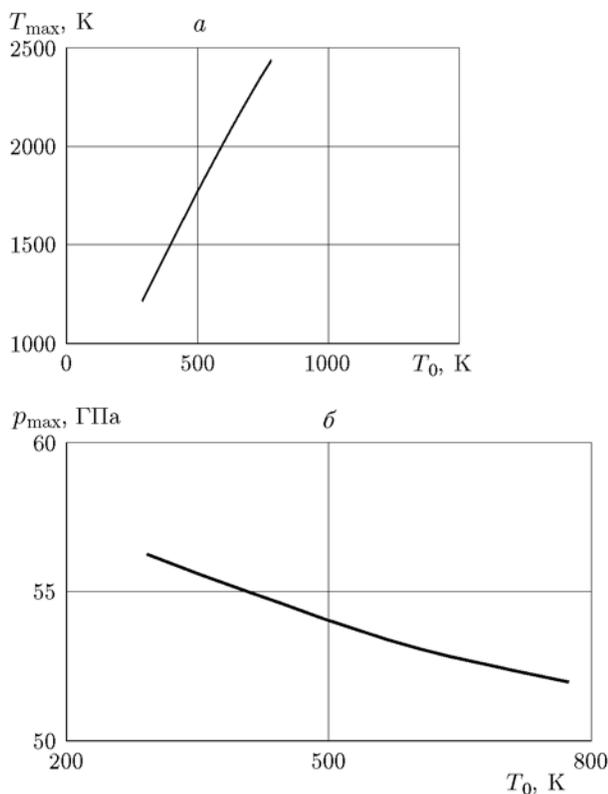


Рис. 6. Максимальные температура (а) и давление (б) в слое сжатой ударником жидкой воды в зависимости от ее начальной температуры

Они очень любопытны. Оказывается, максимальная температура при сжатии изменяется практически линейно с ростом начальной температуры слоя воды. И при этом при увеличении начальной температуры на 100 К максимальная температура в слое воды увеличивается более чем на 200 К, т. е. более чем вдвое. Это указывает на более выгодный путь достижения области температур  $T > 1900$  К, при которых происходит быстрое, за время менее 1 мс, образование кубического алмаза [17]. Для этого нужно нагреть начальный слой воды примерно до 600 К.

Характер изменения максимального давления при ударе по нагретому слою жидкой воды показан на рис. 6,б. Как видно, максимальное давление остается примерно на том же уровне в  $52 \div 56$  ГПа, что и для ненагретого слоя воды, но при этом немного снижается с ростом начальной температуры, что не критично, поскольку для образования кубического алмаза вполне достаточно давления порядка 30 ГПа [17].

#### ЗАДАЧИ О РАЗГРУЗКЕ ВОДЫ ПОСЛЕ МАКСИМАЛЬНОГО СЖАТИЯ

В проблеме получения алмазных частиц из графитовых достижение области температур, превышающих 1900 К, и давлений, превышающих 25 ГПа, является важной, но не единственной задачей. Второй, не менее важной задачей является быстрое понижение температуры смеси воды с образовавшимися алмазными частицами, с тем чтобы не допустить их обратной графитизации, которая может происходить при этих же температурах, но при более низком давлении. Кроме того, в окрестности температур порядка  $1100 \div 1300$  К алмаз может быстро сгореть за счет соединения с кислородом воздуха. Отсюда остаточные температуры после снижения давления должны быть более низкими и достигаться за максимально короткое время. Поэтому имеет смысл рассмотреть некоторые задачи о разгрузке воды начиная от высоких температур и давлений и выяснить, с какой интенсивностью и до каких значений происходит понижение температуры воды.

Рассмотрим вначале задачу об ударном сжатии стальным ударником толщиной 0.02 м с начальной скоростью 1300 м/с покоящегося слоя жидкой воды, нагретого до температуры 750 К. Начальная плотность слоя  $\rho_w = 998.2$  кг/м<sup>3</sup>, начальное давление  $p_0 =$

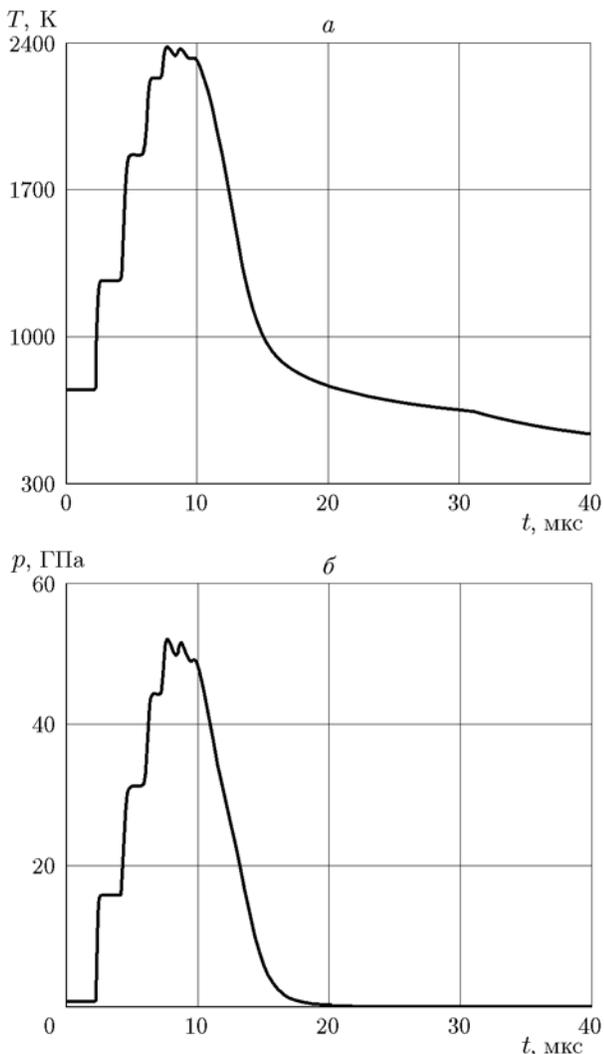


Рис. 7. Рост и падение температуры (а) и давления (б) во времени в случае нагретого до 750 К слоя жидкой воды

685.6 МПа, толщина 0.01 м. Параметры ударника соответствовали нормальным значениям давления и температуры и начальной плотности  $\rho_{sh} = 7874 \text{ кг/м}^3$ . Графики нарастания, а затем падения температуры и давления в слое воды представлены на рис. 7.

При построении графиков значения температуры и давления брали в точке, наиболее близкой к закрытому концу трубы. Как и на рис. 4, нарастание температуры и давления в воде происходит скачкообразно в соответствии с последовательными отражениями ударной волны от закрытого конца трубы и от ударника. Падение температуры и давления после достижения максимальных значений

происходит плавно, поскольку «гуляющие» по воде ударные волны уже мало отличаются от звуковых.

Давление падает до малых значений очень быстро, уже к 20-й микросекунде. Температура при этом уменьшается почти до начальной и затем продолжает снижаться, но уже медленнее. К 30-й микросекунде вода охлаждается примерно до 650 К. После этого жидкая вода превращается в пар, теплоемкость меняет свое значение с  $c_{vw}$  на  $c_{vv}$  и падение температуры несколько убыстряется.

Приведенные графики характеризуют температуру и давление во всем слое воды, поскольку на стадии разгрузки распределение этих величин по слою воды практически однородно. Для температуры этот факт иллюстрирует рис. 8. Распределения температуры соответствуют моментам времени 10, 12, 13, 14, 17, 40 мкс. Координата  $x$  измеряется от границы ударника к закрытому концу трубы, она отнесена к текущему значению толщины слоя воды  $d$ . Как видно, на стадии разгрузки температура практически постоянна во всем слое воды. Для давления распределения по слою воды однородны в еще большей степени.

Полученные результаты свидетельствуют о большой роли начальной температуры жидкой воды в достижении при ударном сжатии высоких температур, превосходящих 1900 К. Поэтому имеет смысл исследовать и другие возможности повышения температуры воды в ходе ударного сжатия. Одной из таких возможностей может быть использование горячего водяного пара вместо горячей жидкой воды. Со-

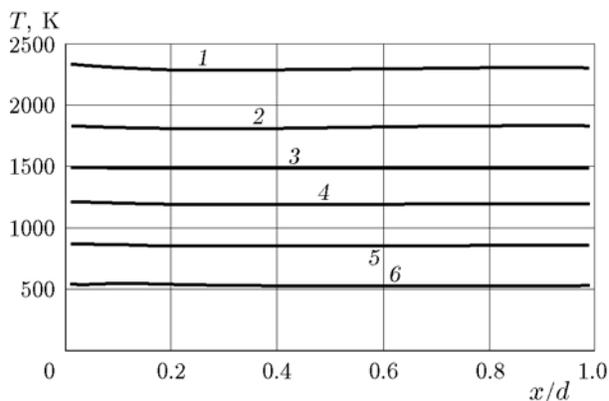


Рис. 8. Распределение температуры по слою воды на стадии разгрузки:

1–6 соответствуют моментам времени 10, 12, 13, 14, 17, 40 мкс

временные паровые котлы позволяют получать водяной пар с температурами, достигающими до 1000 К, и давлениями до 30 МПа и более. Интересно посмотреть, как будут происходить нагрев и сжатие водяного пара при ударном нагружении.

Рассмотрим следующую модификацию нашей основной задачи. Пусть у закрытого конца трубы с абсолютно жесткими стенками расположен слой горячего пара толщиной 0.01 м, по которому бьет стальной ударник толщиной 0.02 м с некоторой скоростью. Температура горячего пара, его давление (и соответствующая им плотность) могут варьироваться в широких пределах, как и скорость ударника. Проанализируем пока два примера такого расчета из множества возможных с тем, чтобы оценить характер процесса нагрузки и разгрузки водяного пара, порядок достигаемых температур и давлений и их последующее уменьшение со временем.

В первом варианте возьмем начальную температуру пара равной 750 К, как и в вышерассмотренном примере с горячей водой. Начальное давление пара примем равным 14.29 МПа, что примерно в 50 раз меньше, чем в примере с горячей водой (не слишком высокое начальное давление является положительным моментом в случае проведения реального физического эксперимента). Соответствующая им начальная плотность пара составляет  $55.71 \text{ кг/м}^3$ . Начальную скорость пара примем равной нулю. Скорость ударника уменьшим по сравнению со случаем горячей воды до 900 м/с. Давление, температуру и плотность ударника оставим прежними, соответствующими нормальным условиям.

Протекание процесса можно описать следующим образом. Вначале по пару идет относительно слабая ударная волна с давлением за фронтом 80 МПа, температурой 1300 К, плотностью  $160 \text{ кг/м}^3$ . После отражения от закрытого конца трубы давление возрастает до 330 МПа, температура — до 1800 К, а плотность пара — до  $330 \text{ кг/м}^3$ . Толщина слоя пара уменьшается к этому моменту времени примерно в четыре раза. После того как отраженная от закрытого конца трубы ударная волна возвращается к ударнику и отражается от него, давление повышается до 920 МПа, плотность — до  $560 \text{ кг/м}^3$ , а температура — примерно до 2100 К. Последующее отражение ударной волны от закрытого конца трубы при-

водит к росту давления до 2.3 ГПа, плотности — до  $860 \text{ кг/м}^3$ , температуры — до 2400 К. Слой пара, который к этому моменту времени уже превратился в слой жидкой воды, сжался до 0.7 мм. Ударная волна теперь практически мгновенно проходит путь от ударника до закрытого конца трубы, и происходит чрезвычайно резкий рост всех параметров. Давление возрастает до 41 ГПа, температура — до 3800 К, плотность — до  $1600 \text{ кг/м}^3$ . Слой пара оказывается сжатым более чем в 20 раз. Приведенные здесь числовые значения не следует понимать как абсолютно точные. Они даны специально с двумя значащими цифрами лишь для демонстрации порядка соответствующих величин.

Во втором варианте зададим начальную температуру покоящегося пара равной 400 К, а начальное давление — 5.0 МПа. Начальная плотность пара будет  $46.7 \text{ кг/м}^3$ . Скорость ударника примем равной 600 м/с. Температуру, давление и плотность ударника в начальный момент времени оставим прежними. Качественное протекание процесса сжатия пара, изменения его температуры, давления и плотности такие же, как и в первом варианте. Числовые значения достигаемых параметров, естественно, другие.

Графически описанные процессы представлены на рис. 9. Показаны изменения давления и температуры во времени. Их значения взяты у закрытого конца трубы, но они мало отличаются от значений во всем слое пар — жидкость после достижения максимальных параметров и на стадии разгрузки. Цифрами 1 и 2 отмечены данные, относящиеся к двум вышеописанным вариантам начальных параметров пара, цифрой 3 — вариант, в котором вместо неподвижной стенки труба закрыта стальной подвижной пробкой. Об этом будет сказано ниже.

Как видно, в вариантах 1 и 2 давление и температура достигают значений, при которых возможно образование кубического алмаза [17]. При этом скорость ударника значительно меньше той, которая необходима для достижения таких же параметров при ударном сжатии жидкой воды. Это несомненно является существенным преимуществом. Кроме того, сжатие пара происходит до очень маленького объема, и если его взять в начальный момент в смеси с графитовыми частицами, то и они будут сжаты до очень малого объема, что также может

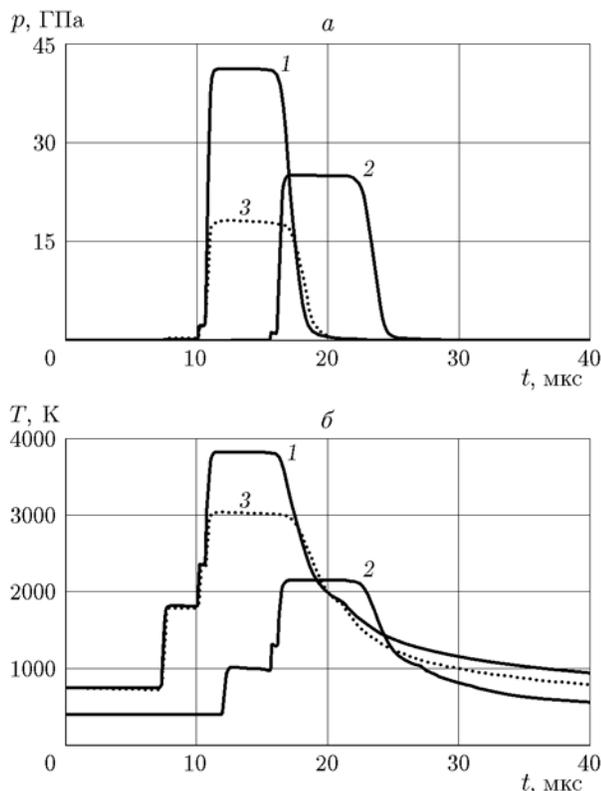


Рис. 9. Изменение во времени давления (а) и температуры (б) водяного пара при различных вариантах начальных данных:

1 —  $T_0 = 750$  К,  $p_0 = 14.29$  МПа, жесткая стенка;  
 2 —  $T_0 = 400$  К,  $p_0 = 5.0$  МПа, жесткая стенка; 3 —  
 $T_0 = 750$  К,  $p_0 = 14.29$  МПа, подвижная пробка

оказаться положительным фактором для образования алмаза из этих частиц.

Как видно, использование горячего пара существенно облегчает достижение температур, требуемых для быстрого синтеза алмаза из графита. Это позволяет нам вернуться к более перспективной с точки зрения простоты экспериментальной реализации модели численного эксперимента, предложенной и использованной нами ранее в работах [1–3]. В этой модели вместо неподвижной стенки, закрывающей трубу с одной стороны, используется стальная пробка некоторой толщины и того же радиуса, не связанная со стенками трубы и имеющая возможность под воздействием ударных волн и волн разрежения перемещаться вдоль нее в ходе процесса.

При расчетной реализации этой модели появляются дополнительная расчетная область — зона пробки, дополнительная подвижная граница — внешняя сторона пробки. Так-

же подвижной становится граница пара (воды) с пробкой.

Рассмотрим пока один пример расчета с использованием такой модели. Возьмем толщину пробки равной толщине ударника, т. е. 0.02 м. Начальные параметры пара и скорость ударника возьмем такими же, как в первом из вышерассмотренных случаев, т. е.  $T_0 = 750$  К,  $p_0 = 14.29$  МПа и  $V_{sh} = 900$  м/с. Температура, давление и плотность ударника, как и прежде, соответствуют нормальным условиям. Для пробки примем такие же их начальные значения, но при нулевой начальной скорости.

Результаты расчетов по такой модели зависимости давления и температуры от времени в точке, прилегающей к ограничивающей зону пара пробке, показаны на рис. 10 линиями 3. Максимальное давление при этом оказывается равным примерно 18 ГПа, а максимальная температура немного превосходит 3000 К. Эти параметры, возможно, не самые оптимальные для получения алмаза из графита (давление немного мало, а температура излишне высока). Но подходящие параметры легко подобрать. Например, можно слегка повысить скорость ударника, можно поднять давление до требуемого уровня, а слегка уменьшив начальную температуру пара — понизить достигаемую максимальную температуру. Меняя линейные размеры ударника и закрывающей пробки, можно изменять длительность стадии удержания требуемых параметров. В конечном итоге можно целенаправленно достигать требуемых условий.

При рассмотрении сжатия пара возникает большее разнообразие возможностей как по параметрам пара, так и по способам его сжатия, что позволяет надеяться найти тот оптимальный вариант, который приведет к успешному синтезу алмазов в таком процессе.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в данной работе примеры выявили целый ряд интересных особенностей ударного сжатия и разгрузки жидкой воды и водяного пара, которые могут оказаться полезными для постановки физических экспериментов, имеющих целью получение алмаза из графитовых частиц.

Автор благодарит А. А. Чарахчяна за полезные обсуждения ряда вопросов и К. В. Хищенко за предоставление материалов некоторых экспериментов по ударному сжатию воды.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Шуршалов Л. В., Хищенко К. В., Чарахчьян А. А. Численные эксперименты по ударному сжатию графита. — М.: ВЦ РАН, 2015.
2. 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, N 1. — 012013.
3. Шуршалов Л. В., Чарахчьян А. А., Хищенко К. В. Численный эксперимент по ударному сжатию смеси графита с водой // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 4. — С. 114–121.
4. Хищенко К. В., Чарахчьян А. А., Шуршалов Л. В. Об одной задаче теплообмена при резко меняющихся внешних условиях // Журн. вычисл. математики и матем. физики. — 2018. — Т. 58, № 2. — С. 304–310.
5. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. — М.: Наука, 1976.
6. Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. — М.: Физматлит, 2001.
7. Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Метод построения // Теплофизика высоких температур. — 2008. — Т. 46, № 2. — С. 206–218.
8. Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Результаты расчетов // Теплофизика высоких температур. — 2008. — Т. 46, № 3. — С. 362–373.
9. Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонное уравнение состояния воды и пара. Упрощенная форма // Теплофизика высоких температур. — 2011. — Т. 49, № 2. — С. 310–313.
10. Walsh J. M., Rice M. H. Dynamic compression of liquids from measurements on strong shock waves // J. Chem. Phys. — 1957. — V. 26, N 4. — P. 815–823.
11. Альтшулер Л. В., Баканова А. А., Трунин Р. Ф. Фазовые превращения при сжатии воды сильными ударными волнами // Докл. АН СССР. — 1958. — Т. 121, № 1. — С. 67–69.
12. Бордзиловский С. А., Караханов С. М., Хищенко К. В. Тепловое излучение воды за фронтом отраженной ударной волны // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 6. — С. 95–103.
13. Кормер С. Б. Оптические исследования свойств ударно-сжатых конденсированных диэлектриков // Успехи физ. наук. — 1968. — Т. 94, № 4. — С. 641–687.
14. Lyzenga G. A., Ahrens T. J., Nellis W. J., Mitchell A. C. The temperature of shock-compressed water // J. Chem. Phys. — 1982. — V. 76, N 12. — P. 6282.
15. Черепанов Г. П., Закиров К. Р. Уравнение состояния при высоких давлениях: метод  $D-U$ -диаграмм // Физ. мезомеханика. — 2014. — Т. 17, № 4. — С. 13–28.
16. Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортвов В. Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. — Черноголовка: ИХФЧ РАН, 1992.
17. Bundy F. P., Bassett W. A., Weathers M. S., Hemley R. J., Mao H. H., Goncharov A. F. The pressure-temperature phase and transformation diagram for carbon; updated through 1994 // Carbon. — 1996. — V. 34, N 2. — P. 141–153.

*Поступила в редакцию 03.12.2018.*

*После доработки 18.07.2019.*

*Принята к публикации 28.08.2019.*