

8. А. И. Климов, А. Н. Коблов, Г. И. Мишин и др. Письма в ЖТФ, 1982, 8, 9, 551.
9. Н. В. Евтюхин, А. Д. Марголин, В. М. Шмелев. Хим. физика, 1984, 3, 9, 1322.
10. Г. И. Мишин. Письма в ЖТФ, 1985, 11, 5, 274.
11. А. М. Галкин, Н. Н. Сысоев, Ф. В. Шугаев. Вест. Моск. ун-та. Сер. 3, 1985, 26, 2, 77.
12. Л. П. Грачев и др. ЖТФ, 1985, 55, 5, 972.
13. Э. М. Бархударов, В. Р. Березовский, М. О. Мдивнишвили и др. Препринт ФП-20 ИФАН ГрузССР. Тбилиси, 1983.
14. В. Н. Кондрашов, Н. Б. Родионов, С. Ф. Ситников и др. Препринт ИАЭ-4154/7. М., 1985.
15. А. И. Жмакин, А. А. Фурсенко. ЖВМ и МФ, 1980, 20, 4, 1021.

Поступила в редакцию 27/III 1986

УДК 539.893

## ИЗОТЕРМА ХОЛОДНОГО СЖАТИЯ УГЛЕРОДА НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ ГРАФИТ-АЛМАЗ

В. Д. Андреев, В. Р. Малик

(Киев)

В теории вещества при высоких давлениях нулевая изотерма (при  $T = 0$ ) — одна из важнейших функциональных характеристик, определяющих полное уравнение состояния вещества. Особый интерес она представляет для веществ, претерпевающих фазовые превращения под давлением, так как позволяет установить силовые параметры перехода, величину энергетического барьера и получить другие сведения о термодинамике и физике превращения.

Для системы графит — алмаз имеются экспериментальные данные различных авторов по изотермическому сжатию графита при комнатной температуре до давлений  $p = 2,5 \div 19,5$  ГПа, не достигающих фазового перехода, а также по сжатию алмаза до  $p = 30$  ГПа. Однако этих данных недостаточно для однозначного построения кривых холодного сжатия графита и алмаза как единой нулевой изотермы вещества, претерпевающего фазовый переход.

В настоящей работе получено решение для холодной изотермы сжатия углерода в системе графит — алмаз на основе потенциалов ковалентных и ван-дер-ваальсовых сил межатомного взаимодействия. При этом оказалось, что всестороннее сжатие решетки графита, приводящее к одновременному уменьшению параметров  $c$  и  $a$ , происходит за счет уменьшения расстояния в направлении межслоевых связей и одновременной гофрировки слоев с увеличением длины связей. В отличие от подхода [1], где вклад гофрировки в общий баланс энергии сжатия оценивался по косвенным данным о силовых константах внешкоскостных колебаний ароматических молекул [2], в данной работе выполнен прямой расчет сил сопротивления сжатию и повороту  $\pi$ - и  $\sigma$ -связей при сжатии решетки графита с привязкой к наиболее полным экспериментальным результатам [3].

При расчете сил межатомных взаимодействий в решетках графита и алмаза использовались потенциалы вида:

для ковалентных  $\sigma$ -связей

$$U^\sigma(r) = U_0^\sigma \frac{nm}{n-m} \left[ -\frac{1}{m} \left( \frac{r_0^\sigma}{r} \right)^m + \left( \frac{r_0^\sigma}{r} \right)^n \right], \quad \text{МДж/кг}, \quad (1)$$

для ван-дер-ваальсовых  $\pi$ -связей

$$U^\pi(r) = (-Ar^{-6} + C \exp(-\beta r)), \quad \text{МДж/кг}. \quad (2)$$

Принятые в (1), (2) коэффициенты пропорциональности и энергии связей определены из известных межатомных расстояний и параметров решеток (для графита  $a_0 = \sqrt{3} r_0^\pi$ ,  $c_0 = 2r_0^\pi$ , для алмаза  $a = \frac{4}{\sqrt{3}} r_0^\sigma$ ), а также из соотношений для энергий решеток (графит,  $E_{\text{реш}} = \frac{1}{2}(3U_0^\pi + 2U_0^\sigma)$ ; алмаз,  $E_{\text{реш}} = \frac{1}{2} 4U_0^\sigma$ ) при заданных их экспериментальных значениях.

Равновесное состояние деформированной в соответствии со схемой перестройки [4] графитовой 5-атомной группы будет описываться в рамках центрально-силового приближения системой уравнений

$$pS_1 \vec{n}_1 = \vec{F}^\pi(r) + 3\vec{F}^\sigma(r),$$

$$\vec{M} = (pS_2 \vec{n}_2 + \vec{F}^\sigma(r)) r^\sigma \cos \alpha, \quad (3)$$

в которой величины межатомных сил  $F^\pi(r)$  и  $F^\sigma(r)$  определяются соответствующими потенциалами (1), (2):  $F = dU/dr$ . Кроме того, из геометрических построений следует  $S_1 = \sqrt{3}/2 \cdot a^2$ ,  $S_2 = ac$ ,  $a = \sqrt{3} r^\sigma \sin \alpha$ ,  $c = 2(r^\pi + r^\sigma \cos \alpha)$ ,  $\vec{n}_1$  и  $\vec{n}_2$  — векторы, перпендикулярные площадкам  $S_1$  и  $S_2$ . Экспериментальные данные для графита при  $p = 0 \div 19,5$  ГПа [3] позволяют получить дополнительные аппроксимирующие зависимости

$$\cos \alpha = 0,64(\Delta c/c)^{0,6593} + 0,0334(\Delta c/c)^{0,0427}, \quad (4)$$

$$\Delta c = 43,14 \Delta a, \quad (5)$$

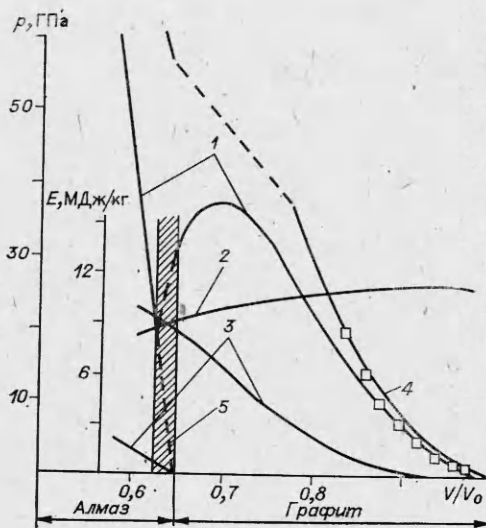
экстраполяции которых используются при решении системы (3) для всего расчетного диапазона давлений. Такая экстраполяция является дополнительным приближением в расчете, что необходимо иметь в виду при анализе полученных в работе результатов.

Расчет всестороннего сжатия алмаза в силу симметричности направлений одинаковых по величине ковалентных связей в атомной группе не представляет сложности и сводится к пересчету силы межатомного взаимодействия  $F^\sigma(r)$  в давление по формуле  $p = \frac{F^\sigma(r)}{1/2 \cdot a^3}$ . Перевод функции  $p(r)$  в искомую  $p(V)$  осуществлялся с помощью соотношений между объемом  $V$  и параметрами решетки  $a$  и  $c$  (для графита  $V = \sqrt{3}/2 \cdot a^2 c$ , для алмаза  $V = a^3$ ).

Результаты выполненных расчетов приведены на рисунке. Полученное решение показало, что при таком механизме перестройки графита в алмаз нулевая изотерма сжатия имеет характерный вид ван-дер-ваальсовой изотермы с экстремумом на графитовом участке при  $p = 37,5$  ГПа и относительном сжатии  $0,7V_{\text{гр}}$ . Алмазный объем  $V_{\text{алм}} = 0,647V_{\text{гр}}$  достигается уже на нисходящей ветви кривой при  $p = 29,5$  ГПа, когда внутренняя (накопленная за счет сжатия) энергия

Результаты расчета холодного сжатия углерода в системе графит — алмаз.

1 — изотерма графит — алмаз; 2 — энергетический барьер  $sp^2 \rightarrow sp^3$ -перехода; 3 — энергия изменения длины  $\pi$ - и  $\sigma$ -связей; 4 — ударная адиабата (данные [5]), 5 — энергетическая зона фазового перехода (точки — экспериментальные данные [3]).



системы  $E = 7,22$  МДж/кг, а пересечение кривых сжатия графита и алмаза происходит при  $V_{\text{алм}} = 0,626 V_{\text{гр}}$  и  $E = 7,57$  МДж/кг.

Как известно, для перехода графита в алмаз атомы углерода должны перейти из  $sp^2$ -гибридного состояния в более высокоэнергетическое  $sp^3$ -состояние. Энергия такого перехода по различным методам расчета  $\Delta E_{sp^2 \rightarrow sp^3} = 5,25 \div 5,93$  МДж/кг. Следовательно, накопленная внутренняя энергия сжатия системы позволяет осуществить необходимый фотопереход  $sp^2 \rightarrow sp^3$  после достижения максимального давления.

Таким образом, сам факт накопления системой энергии, достаточной для преодоления потенциального барьера перехода одной модификации углерода в другую, является условием возможности такого перехода, а также его физическим объяснением. Наконец, рассматриваемый участок заканчивается точкой пересечения изотерм графита и алмаза, которая также может обуславливать фазовый переход графита в алмаз. Совокупность перечисленных факторов позволяет на участке между изотермой алмаза и максимумом на изотерме графита выделить наиболее вероятную зону фазового перехода, ограниченную точками достижения величины энергетического барьера и пересечения изотерм двух фаз.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. J. R. Riter. J. Chem. Phys., 52, 10, 1970, 5008.
2. C. A. Coulson, S. Senent. J. Chem. Soc., 1955, 1813, 1819.
3. R. W. Lynch, H. G. Drickamer. J. Chem. Phys., 1966, 44, 1, 181.
4. K. Lonsdale, H. J. Milledge, E. Nave. Mineral Mag., 1959, 32, 185.
5. W. H. Gust. Phys. Rev. B, 1980, 22, 10, 4744.

Поступила в редакцию 27/III 1986

УДК 662.215

### ОСОБЕННОСТИ ИНИЦИИРОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВВ РАСХОДЯЩЕЙСЯ ДЕТОНАЦИЕЙ ТОНКОГО ДОНОРНОГО ЗАРЯДА

А. И. Погребов, В. И. Сдобнов, В. И. Таржанов  
(Москва)

При подрыве зарядов ВВ нередко используют промежуточные детонаторы в виде пашек другого, более мощного или более чувствительного ВВ<sup>1</sup>. При этом обычно в основном заряде-акцепторе реализуется квазисферическая расходящаяся волна. В данной работе рассматривается случай предельно тонкого заряда-донора, возбуждаемого инициатором с диаметром, меньшим критического диаметра ВВ заряда-акцептора.

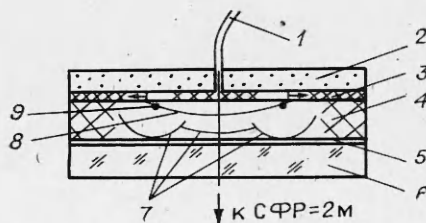


Рис. 1. Схема иницирования.  
1 — ДИ; 2 — корпус (пенопласт);  
3 — заряд-донор; 4 — заряд-акцептор;  
5 — воздушный зазор; 6 — пластина (оргстекло); 7 — тороидальный детонационный и ударный фронт; 8 — фронт кривой УВ в момент иницирования; 9 — окружность иницирования.

**Постановка опытов** (рис 1). Тонкий заряд-донор из флегматизированного тэна, возбуждаемый детонирующим шнуром, инициирует заряд-акцептор из литого тротила ( $\rho_0 = 1,57$  г/см<sup>3</sup>, размером  $120 \times 60$  мм) или

<sup>1</sup> См., например, А. Г. Грост. Пороха и взрывчатые вещества. М.: Машиностроение, 1972.