

Available online at www.sciencedirect.com**SciVerse ScienceDirect**

Procedia Engineering 27 (2012) 1364 – 1372

**Procedia
Engineering**www.elsevier.com/locate/procedia

2011 Chinese Materials Conference

The model of structure place transformation for phase change from graphite to diamond through explosion

Kai Zhang^{*}, Luqing Zhang*Dalian Kai-Feng Super Hard Material Ltd. Co.; Guang-ian road, no 107, Dalian High-tech industrial Zone, Dalian 116025, P.R.China*

Abstract

Graphite powder subjected high velocity impact, under high pressure and temperature can be changed from graphite to diamond according to solid phase structure, The cubic face-centred lattice of diamond is constituted of 18 carbon atoms, among which, there are 14 atoms which is formed 16 covalent bond pairs, so correspondingly, in four net plane layers of the ABCA type graphite, also have 16 proper atoms corresponding to each other. This paper has founded the model to illustrate that the 14 carbon atoms of diamond and graphite are how to correspondence, then may be to obtain the maximal shifting distance of atom in 16 covalent bond pairs x^* and activated energy U , at last, may be to calculate the transformation rate under the pressure p and temperature T ; it takes key effect to design explosive parameters

© 2011 Published by Elsevier Ltd. Selection and/or peer-review under responsibility of Chinese Materials Research Society Open access under [CC BY-NC-ND license](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

Keywords: Graphite; Diamond; Phase Transformation; Solid Phase Structure

石墨通过爆炸相变为金刚石的一种结构位置转变模型

张凯, 张路青

中国大连凯峰超硬材料有限公司; 中国大连高新技术园区广贤路 107 号, 116025

^{*} Corresponding author. Tel.: +86-15940869591.
E-mail address: kzh5@163.com.

摘要

石墨粉层受到击波高速冲击后，在高温高压下，会以固相结构方式转变为金刚石，金刚石的面心立方单元晶胞是由 18 个碳原子组成，其中有 14 个原子相互构成 16 对共价键，对应的在 ABCA 型石墨的 4 层网格平面上，亦应有 16 个原子彼此相互与之对应。本文创立了一个模型，说明金刚石与石墨的这 14 个碳原子是如何对应的，从而可求出 16 对共价键中大的一对原子移动距离 x_s ，活化能 U ，最终可预测出 ABCA 型石墨在压力 p 和温度 T 下有何样转化率；这对爆炸参数的设计将起到关键作用。

关键词：石墨；金刚石；相变；固相结构

爆炸金刚石理论中载明石墨相变为金刚石时，其吉布斯自由能 G 是下降的，即 $dG < 0$ ，因此相变过程是自动进行的不可逆过程。石墨受到强击波作用，在高压下石墨层间受到很大压缩，碳原子间距离接近，同时，在高温下，碳原子振动加剧，靠原子之间相互作用力，会以固相结构转变方式克服“势垒”从石墨势阱进入金刚石势阱^[2]。

1. 邵模型理论

邵丙瑛教授在 1977 年^[3]提出了石墨转变为金刚石的活化能概念，并以数学形式表达出来，用波尔兹曼量子统计理论可推测出金刚石的转化率。

$$U = 3A \left(\frac{E_T}{3n} + \frac{1}{2} h\nu_s \right) \left[\left(\frac{x_s}{H} \right)^2 - 1 \right] \text{ erg/g} \quad (1)$$

$$x_{石} = \frac{\nu_d}{\nu_d + \nu_s} x_* = \frac{\nu_d}{\nu_d + \nu_s} \times \frac{1}{2} (\delta_s - \delta_d) \quad (2)$$

式中 U —1 克石墨的活化能； $n = \frac{A}{M}$ —1 克石墨的碳原子数， $A = 6.023 \times 10^{23}$ ， $M = 12.01$ ；

$h = 6.62 \times 10^{-27} \text{ erg.s}$ ，普朗克常数； ν_s —石墨原子振动频率； ν_d —金刚石原子振动频率； H —石墨碳原子在三个自由度上振幅。 δ_s —压缩后的石墨层间距， δ_d —压缩后的金刚石原子间距。邵丙瑛教授提出的这套完整理论认定，在 ABCA 型石墨中，遵循苟清泉教授在 1974 年提出的：ABCA 型石墨已有金刚石结构雏形观点，把石墨网格平面间的压缩后的间距 δ_s 作为石墨原子间的标称性距离，按(式 2)计算出 x_s (见图 1)，从而完成以后全部的理论计算^{[3][4]}。

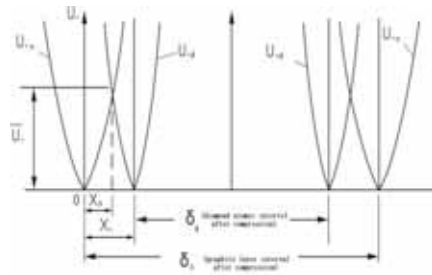


图1 石墨与金刚石势阱关系图 Fig1 The relation chart of potential trap for graphite and diamond

2. 凯模型理论

但从石墨到金刚石转变是整个晶胞的转变，组成面心立方晶金刚石的一个单元晶胞有 18 个碳原子,其中有 14 个原子组成 16 对共价键,因此必然有 18 个石墨碳原子,且其中 14 个还与 16 对共价键原子相对应。然而在 16 对共价键中任意一对的 2 个原子的对应座标跃迁移动量都不一样,若用(2)

式的 $(\delta_s - \delta_d)/2$ 来表示 x^* 值是不够确切的。

本文提出一个直接转变的模型，从本质上说，任何此类移动模型根本不能代表微观变化中的真实运动，量子力学告诉我们，微观粒子的运动是没有轨道的，是靠机率，用波函数来描述微观粒子的运动的，微观石墨原子变到金刚石结构时，其过程和途径可能“上亿千万”，从这个角度看，结构位置移动模型实在太过“机械”与“直观”，但毕竟从宏观找到了一个非常确切而清楚的位移途径，可用这个位移过程来估量活化能的大小。可以使活化能的计算不会导致过于大的偏差。图 2 是金刚石晶胞在空间位置，图 3 是 ABCA 型石墨转变为金刚石时的原子配置图。在图 2 中，有 16 对共价键：11-5，11-18，11-13，11-16，12-7，12-18，12-15，12-14，9-2，9-17，9-14，9-13，10-4，10-16，10-15，10-17；

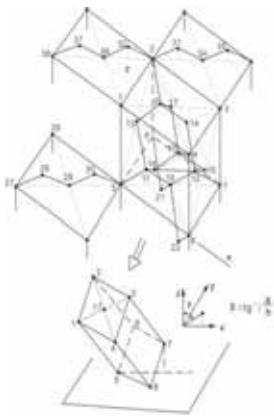
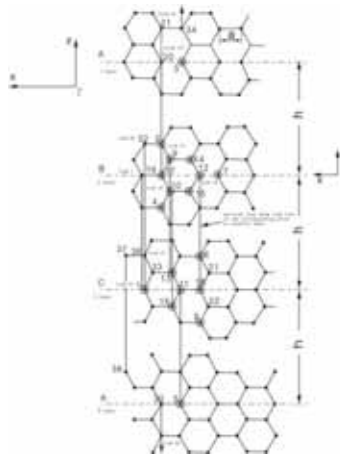


图2 晶胞在空间位置

Fig2 The location of crystal unit in space



图(3) 石墨转变为金刚石时的原子配置图

Fig 3 The disposition plan of atom in transformation From graphite to diamond

在图 3 中座标原点取在第二层(B层)上的 7 点, 每一层的平面都旋转 90° 后画在纸面上, 石墨晶胞中的点名与金刚石点名以及座标轴完全一致, x 轴向左, y 轴从纸面向外, z 轴向上。图 2 金刚石晶胞中 7-12-18-11-5 五个点构成 5-7 对角线上的垂直平面上的五个原子, 7, 18, 5 点在金刚石相胞上虽在同一平面上, 恰分别占据了石墨结构上的不同层次, 7 点在 B 层上, 18 点在 C 层, 而 5 点在最下面的 A 层上; 金刚石晶胞上的 2-9-17-10-4 五个原子是在金刚石晶胞的上表面对角线 2-4 的垂直平面上, 但都在石墨结构的同一 B 层上的原子。这样在图 2 的金刚石晶胞是图 3 所示的石墨晶胞逆时针方向旋转了 45°, 且 z 轴也倾斜了, 如图 2 下方的倾斜立方体, 其中金刚石晶胞底面上的对角线 5-7 与垂直线成一角度 $\beta = \text{tg}^{-1}(\frac{a}{h})$, a — 压缩后的石墨键距, h — 压缩后的石墨层间距; 在金刚石晶胞上, 都在同一平面上的 y 值相同各点对应在图 3 上各层的 x、z 值不同, 也都有相同 y 值。要具体计算相应石墨原子进入相应金刚石原子位置时应移动位置, 这个移动位置是要靠系统能量起伏来提供的, 这就是计算活化能的依据; 为此先要把每个石墨原子的座标(x, z) 计算出来, 再把金刚石的原子座标也计算出来, 然后计算它们的座标差。举实例说明: b—金刚石压缩后的晶胞边长, 选 11, 12, 5, 18 点(见图 4),座标原点取在第二层的 7 点上。

A. 11, 12, 5, 18 点的石墨原子座标:

11 点: $x=2a, y=0, z=-h$; 12 点: $x=a, y=0, z=0$;

18 点: $x=a, y=0, z=-h$; 5 点: $x=2a, y=0, z=-2h$;

B. 金刚石原子的对应座标:

11 点: $x = \frac{b}{4}(3\sqrt{2} \sin \beta + \cos \beta)$; $y=0$;

$z = -\frac{b}{4}(3\sqrt{2} \cos \beta - \sin \beta)$

12 点: $x = \frac{b}{4}(\sqrt{2} \sin \beta + \cos \beta)$; $y=0$;

$z = -\frac{b}{4}(\sqrt{2} \cos \beta - \sin \beta)$

18 点: $x = \frac{\sqrt{2}b}{2} \sin \beta$; $y=0$;

$z = -\frac{\sqrt{2}b}{2} \cos \beta$

5 点: $x = \sqrt{2}b \sin \beta$; $y=0$; $z = -\sqrt{2}b \cos \beta$

C. 石墨原子应移动距离, 以达到金刚石原子的位置:

11 点: $\Delta x = \frac{b}{4}(3\sqrt{2} \sin \beta + \cos \beta) - 2a$; $\Delta y = 0$; $\Delta z = -\frac{b}{4}(3\sqrt{2} \cos \beta - \sin \beta) + h$;

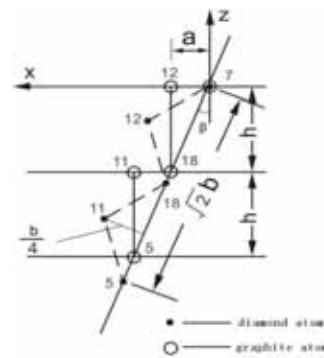


图 4 石墨与金刚石原子的坐标关系图

Fig 4 The coordinate relation of atoms between graphite and diamond

$$12 \text{ 点: } \Delta x = \frac{b}{4}(\sqrt{2} \sin \beta + \cos \beta) - a; \quad \Delta y = 0; \quad \Delta z = -\frac{b}{4}(\sqrt{2} \cos \beta - \sin \beta);$$

$$18 \text{ 点: } \Delta x = \frac{\sqrt{2}b}{2} \sin \beta - a; \quad \Delta y = 0; \quad \Delta z = -\frac{\sqrt{2}b}{2} \cos \beta + h; \quad \alpha = \arcsin\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = 35.26^\circ;$$

$$5 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{2}b \sin \beta - 2a; \quad \Delta y = 0; \quad \Delta z = -\sqrt{2}b \cos \beta + 2h;$$

其它各点的应移动距离直接将结果写在下面:

$$14 \text{ 点: } \Delta x = \frac{\sqrt{6}}{4}b \cos(\beta - \alpha_1) - 1.5a; \quad \Delta y = -\frac{\sqrt{2}}{4}b + a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = \frac{\sqrt{6}}{4}b \sin(\beta - \alpha_1);$$

$$15 \text{ 点: } \Delta x = \frac{\sqrt{6}}{4}b \cos(\beta - \alpha_1) - 1.5a; \quad \Delta y = \frac{\sqrt{2}}{4}b - a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = \frac{\sqrt{6}}{4}b \sin(\beta - \alpha_1);$$

$$13 \text{ 点: } \Delta x = \frac{\sqrt{2}}{2}b \left(\sin \beta + \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\alpha_2 + \beta - \frac{\pi}{2}) \right) - 2.5a; \quad \Delta y = -\frac{\sqrt{2}}{4}b + a \sin 60^\circ;$$

$$\Delta z = -\frac{\sqrt{2}}{2}b \left(\cos \beta - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\alpha_2 + \beta - \frac{\pi}{2}) \right) + h; \quad \alpha_1 = \arcsin\left(\frac{\sqrt{2}}{3}\right) = 35.26^\circ;$$

$$16 \text{ 点: } \Delta x = \frac{\sqrt{2}}{2}b \left(\sin \beta + \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\alpha_2 + \beta - \frac{\pi}{2}) \right) - 2.5a; \quad \Delta y = \frac{\sqrt{2}}{4}b - a \sin 60^\circ;$$

$$\Delta z = -\frac{\sqrt{2}}{2}b \left(\cos \beta - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\alpha_2 + \beta - \frac{\pi}{2}) \right) + h; \quad \alpha_2 = \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = 54.74^\circ;$$

$$2 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{\frac{3}{2}}b \cos(\beta - \alpha) - 3a; \quad \Delta y = -\frac{\sqrt{2}}{2}b + 2a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = \sqrt{\frac{3}{2}}b \sin(\beta - \alpha);$$

$$4 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{\frac{3}{2}}b \cos(\beta - \alpha) - 3a; \quad \Delta y = \frac{\sqrt{2}}{2}b - 2a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = \sqrt{\frac{3}{2}}b \sin(\beta - \alpha);$$

$$17 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{\frac{3}{2}}b \cos(\beta - \alpha) - 3a; \quad \Delta y = 0; \quad \Delta z = \sqrt{\frac{3}{2}}b \sin(\beta - \alpha); \quad \theta = \arcsin\left(5\sqrt{\frac{2}{51}}\right) = 8.05^\circ;$$

$$9 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{\frac{17}{16}}b \cos(\alpha + \theta - \beta) - 2.5a; \quad \Delta y = -\frac{\sqrt{2}}{4}b + a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = -\sqrt{\frac{17}{16}}b \sin(\alpha + \theta - \beta);$$

$$10 \text{ 点: } \Delta x = \sqrt{\frac{17}{16}}b \cos(\alpha + \theta - \beta) - 2.5a; \quad \Delta y = \frac{\sqrt{2}}{4}b - a \sin 60^\circ; \quad \Delta z = -\sqrt{\frac{17}{16}}b \sin(\alpha + \theta - \beta);$$

以上公式中如果 $\beta < \alpha, \beta < \alpha_1, (\alpha_2 + \beta) < \frac{\pi}{2}$, 则上面诸式中的

$\sin(\beta - \alpha), \sin(\beta - \alpha_1), \sin(\alpha_2 + \beta - \frac{\pi}{2})$, 都要换成 $\sin(\alpha - \beta), \sin(\alpha_1 - \beta), \sin[\frac{\pi}{2} - (\alpha_2 + \beta)]$ 。上面

诸式中 $\Delta x, \Delta z$ 的大小与座标原点选取有关, 选取 7 点为原点时, $\Delta x, \Delta z$ 中有正有负, 且负与正的最大值的值并不相等, 可以变换座标原点, 让负最大值与正最大值的值相等, 即让其平均值趋于零, 这样可使 $\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$ 诸值中的最大值(包括正与负)降到最小(或基本上接近于最小), 因为从能量观点看, 从石墨原子到金刚石原子位置的转变, 其途径一定是按最小能量的途径变过去的。

3. 模型的实验评价

在以 2350m/s 的飞片打击速度打击初密度为 71.2% 的铜和石墨的混合粉末, 在以作者建立的压力计算模型下, 计算得出压力 $p = 3.89925 \times 10^4 \text{MPa}$, $(v/v_0)_{\text{石}} = 0.6351113$, 热内能 $E_T = 1835.4873 \text{J/g}$, 温度 $T = 1475^\circ\text{C}$, 按以往作者所做过的大量实验证实, 其金刚石的转化率为 0%, 也就是在后处理之后, 没有得到金刚石, 至少是未见到有明显的金刚石粉末存在。现用以上所提出的二个模型理论来计算一下在此打击条件下的金刚石转化率是否与实验相接近?

按邵模型: 并按其提出的整套理论得到以下的计算:

1) 从 $E_T = \frac{3nh\nu_{\text{石}}}{e^{h\nu_{\text{石}}/kT} - 1}$, 求得 $\nu_{\text{石}} = 2.91875 \times 10^{13} \text{ 1/s}$; 同理金刚石振动频率

$$\nu_{\text{金}} = 2.87276 \times 10^{13} \text{ 1/s};$$

2) 从 $H = \left[\frac{2 \left(\frac{E_T}{3n} + \frac{1}{2} h\nu_{\text{石}} \right)}{\mu (2\pi\nu_{\text{石}})^2} \right]^{\frac{1}{2}}$ 求得石墨原子振幅 $H = 0.08074 \text{ \AA}$;

3) $\left(\frac{v}{v_0} \right)_{\text{金}} = \left(\frac{3.89925}{21.7} + 1 \right)^{-1/2.5} = 0.9360369587$, 金刚石键距 $\delta_{\text{金}} = 1.54 (0.9360369587)^{1/3} = 1.5064 \text{ \AA}$; 石

墨网格垂直方向压缩后的距离 $h = \delta_{\text{石}} = 3.35 \times 0.6351113 / (0.9568899601)^{2/3} = 2.2235 \text{ \AA}$; 石墨

网格内压缩后的原子键距长 $a = 1.42 \times (0.9360369587)^{1/3} = 1.389 \text{ \AA}$;

4) 1 克石墨变为 1 克金刚石所降低的吉布斯自由能 $\Delta G(p)_T = 2.39723 \times 10^{10}$ erg/g ;临界晶核半径 $r_k = 12.871 \text{ \AA}$; 形成 1 个克原子量的具有临界晶粒的金刚石的最大自由能值

$$\Delta g_{\max} = G(p)_r \cdot M/2 = 14.3953 \times 10^{10} \text{ erg/mol};$$

5) $x_* = (\delta_{\text{石}} - \delta_{\text{金}})/2 = 0.35855 \text{ \AA}$; $x_{\text{石}} = x_* v_{\text{金}} / (v_{\text{金}} + v_{\text{石}}) = 0.1779 \text{ \AA}$; $U = 152.268 \times 10^{10}$ erg/mol;

6) 生长速度 $C_1 = \frac{\Theta}{8} v_{\text{石}} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta g_{\max}}{kT}\right) \right] \exp\left(-\frac{U}{kT}\right)$; 其中 $\Theta = 3.356^3 \times (V/V_0)_{\text{金}} = 40.09 \text{ \AA}^3$ 为金刚石晶体

压缩后的单元体积, $C_1 = 4.28296 \times 10^8 \text{ \AA}^3/\text{s}$;

7) 金刚石转化率 $m = 1 - \exp\left\{-v_{\text{石}} t \left(1 + \frac{3C_1 t}{8\pi r_k^3}\right) \exp\left(-\frac{\Delta g_{\max} + U}{kT}\right)\right\} = 1 - 0.00102 = 0.99898$; 其中

$t = 0.1883 \times 10^{-6} \text{ s}$ 为相变起迄时间。

以上计算表明, 用邵模型来测算此实例, ABCA 型石墨将几乎是全部转变, 因一般国产石墨中含 10-20% 的 ABCA 型石墨, 即至少应有 5-15% 的转变率才对, 但结果与实验所得相差甚远。

按凯模型, 求出金刚石晶核原子 16 对共价键的每个原子的位移值 $\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$, 最后也同样用邵模型理论所推出的上述公式来求出其转化率 m 值。

Table 1 The calculated vales of atom shifting distance

点名	$\Delta x_0 \text{ \AA}$	$\Delta z_0 \text{ \AA}$	$\Delta x \text{ \AA}$	$\Delta y \text{ \AA}$	$\Delta z \text{ \AA}$	$\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \text{ \AA}$
2	0.0868	0.2428	0.1291	-0.0541	0.45745	0.4784
4	0.0868	0.2428	0.1291	0.0541	0.45745	0.4784
5	-0.1714	0.2744	-0.1291	0	0.48905	0.5058
7	0	0	0.0423	0	0.21465	0.2188
9	0.0437	-0.7037	0.086	-0.0271	-0.48905	0.4973
10	0.0437	-0.7037	0.086	0.0271	-0.48905	0.4973
11	-0.0854	-0.4452	-0.0431	0	-0.23055	0.2345
12	0.0003	-0.5824	0.0426	0	-0.36775	0.3702
13	-0.0423	0.2586	0	-0.0271	0.47325	0.4740
14	0.0434	0.1214	0.0857	-0.0271	0.33605	0.3479
15	0.0434	0.1214	0.0857	0.0271	0.33605	0.3479
16	-0.0423	0.2586	0	0.0271	0.47325	0.4740
17	0.0868	0.2428	0.1291	0	0.45745	0.4753

18	-0.0857	0.1372	-0.0434	0	0.35185	0.3545
----	---------	--------	---------	---	---------	--------

按 $a=1.389\text{\AA}$, $h=2.2235\text{\AA}$, $b=\sqrt{(16/3)} \times \delta_{\text{金}}=3.4789\text{\AA}$, $\beta = th^{-1}\left(\frac{1.389}{2.2235}\right) = 31.993^\circ$, 应注意到现

在有 $\alpha > \beta$, $\alpha_1 > \beta$, $\pi/2 > (\alpha_2 + \beta)$; 进行 14 个点的计算, 计算值列于上表 1, 表中的 $\Delta x_0, \Delta z_0$ 是以 7 点为座标原点按前面导出的公式计算出来的, 把座标原点移到 $x_0=0.0423\text{\AA}$, $z_0=0.21465\text{\AA}$, y 座标不动, 这样得到 $\Delta x, \Delta z$, 记在上表中。然后计算金刚石每对共价键的 2 个原子与对应石墨的 2 个原子点的距离的平均值:

$$11-5: \frac{1}{2} \left[\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \Big|_{11} + \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2} \Big|_5 \right] = 0.3702\text{\AA}; \text{ 同理可算得其它各点:}$$

11-18: 0.2945 Å; 11-13: 0.3543Å; 11-16: 0.3543Å; 12-7: 0.2945Å; 12-18:

0.3624Å;

12-15: 0.3591Å; 12-14: 0.3591Å; 9-2: 0.4879 Å; 9-17: 0.4863 Å; 9-14:

0.4226Å;

9-13: 0.4857 Å; 10-4: 0.4879 Å; 10-16: 0.4857 Å; 10-15: 0.4226Å; 10-17: 0.4863

Å;

其中具有最大值的一对共价键移动量是 9-2 点与 10-4 点: 0.4879 Å, 即 $x_*=0.4879\text{\AA}$, ∴

$$x_{\text{石}} = \frac{v_{\text{金}}}{v_{\text{金}} + v_{\text{石}}} \cdot x_* = \frac{2.87276}{2.87276 + 2.91875} \times 0.4879 = 0.242\text{\AA}; \text{ 而活化能:}$$

$$U = 3 \times 6.023 \times 10^{23} \left[\frac{1835.4873 \times 10^7}{3 \times 5.015 \times 10^{22}} + \frac{1}{2} \times 6.62 \times 10^{-27} \times 2.91875 \times 10^{13} \right] \left[\left(\frac{0.242}{0.08074} \right)^2 - 1 \right] = 315.36 \times 10^{10} \text{ erg/g},$$

$$\square g_{\text{max}} + U = (14.395 + 315.36) \times 10^{10} = 329.7553 \times 10^{10} \text{ erg/g}; \text{ 生长速度 } C_i = 715.05 \text{ \AA}^3/\text{s};$$

$$m = 1 - \exp \left\{ -v_{\text{石}} t \left(1 + \frac{3c_1 t}{8\pi r_k^3} \right) \exp \left(-\frac{\Delta g_{\text{max}} + U}{kT} \right) \right\} =$$

$$1 - \left\{ -2.91875 \times 10^{13} \times 0.1883 \times 10^{-6} \left(1 + \frac{3 \times 715.05 \times 0.1883 \times 10^{-6}}{8\pi (12.871)^3} \right) \cdot \left(-\frac{329.7553 \times 10^{10}}{1.38 \times 10^{-16} \times 1475 \times 6.023 \times 10^{23}} \right) \right\}$$

$$= 1 - 0.9999885523 = 1.144773 \times 10^{-5} \approx 1.15 \times 10^{-5} = 0.0000115 \%$$

凯模型的计算说明在 2350m/s 速度打击 71.2%初密度的粉末时，几乎不会有金刚石转化。这样一个理论基本上为实验所证实。

另一实例：飞片以 2500m/s 速度打击初密度 71.2%的铜和石墨的混合粉末，计算结果： $p_{\max}=4.29765 \times 10^4$ MPa，温度 $T=1615$ K；按以往大量实验得知，此种情况转化率仅远在 1%以下，而用邵模型计算，ABCA 型石墨的转化率是 100%；而用凯模型计算为 0.0245%，说明凯模型更为实验所证实。

Reference

- [1] Zhang K. The theory and new technique of explosive polycrystalline diamond. (to be published).2011.
- [2] Gou Qq. The mechanism of structure transformation from graphite to diamond under high temperature and pressure. *Journal of Jilin University* 1974; 2:52-61.
- [3] Shao BH, Wang JT. The dynamics of phase change from graphite to diamond under the action of strong shock-wave. *Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences*. Internal technological datum 1971;11.
- [4] Shao BH, Wang JT. The calculation of thermodynamics parameters for phase transformation from graphite to diamond under the shock action of plane flying plate. Institute of Mechanics, *Chinese Academy of Sciences*. Internal technological datum. 1971;11.