



Прямое численное моделирование  
распространения оптических фотонов  
через порошковое вещество.

А.Э. Муханов, Д.Б. Рогозкин,  
[mukhanov@vniia.ru](mailto:mukhanov@vniia.ru)

# План

- Цель и актуальность
- Постановка задачи
- Описание численного моделирования
- Сравнение с экспериментом
- Статистические данные на сетке
- Кинетика теплового разложения
- Распределение поглощённой энергии
- Выводы и перспективы

# Цель и актуальность

## Актуальность

Оптимизация светодетонатора (например, уменьшение пороговой энергии инициирования)

## Цель

Модель распространения лазерного пучка через порошковое вещество. Описание разогрева вещества. Оценка возможности инициирования детонации при заданных энергиях в лазерном импульсе.

# Постановка задачи

## Исследуемое порошковое взрывчатое вещество

тэн (пентаэритрита тетранитрат, PETN)

химическая формула  $C_5H_8N_4O_{12}$ , при н.у. кристалл с тетрагональной решёткой с двумя молекулами в элементарной ячейке ( $\alpha$ -фаза/PETN-I)

## Исследуемый спектральный диапазон и ожидаемые физические процессы

- Средний инфракрасный (ИК/IR/MIR) → как любое органическое соединение обладает сильным поглощением
- **Ближний инфракрасный (NIR)**
- **Видимый (Vis)**
- Ближний ультрафиолетовый (UV) → как большинство диэлектриков демонстрирует сильно поглощение, как только энергия фотона достигает ширины фундаментальной запрещённой зоны

# Модели поглощения оптического излучения в среде

- закон Бугера (прозрачные среды)

Описание поглощения без учёта рассеяния

- уравнение переноса излучения (мутные среды)

Описание поглощения в среднем, отсутствие флуктуаций, отсутствие необходимых характеристик среды (показателя рассеяния, индикатрисы рассеяния)

- Монте-Карло моделирование транспорта фотонов в среде с резкими вариациями показателя преломления

Описание в рамках геометрической оптики

# Схема численного моделирования методом Монте-Карло (Geant4\*)

- библиотека Geant4: отслеживание фотона, построение среды, физическая оптика (закон Бугера, формулы Френеля)
- модель среды: случайно-ориентированные выпуклые многогранники
- геометрия: плоский слой (поперечные размеры в несколько раз больше толщины слоя)
- импульс лазера: одиночные фотоны, область возможных координат совпадает с диаметром пучка, распределение равномерное, нормальное падение на пластину
- влияние краёв: путём подсчёта фотонов, вылетающих через боковые поверхности параллельные пучку

# Характеристики среды

Показатель  
преломления\*

$$n_{\text{ТЭН}} = 1,55; n_{\text{воздух}} = 1$$

Показатель  
поглощения

$$k_{\text{ТЭН}} = 0,3 \text{ мм}^{-1}$$

(длина поглощения 3 мм)\*\*

Размеры плоского слоя  
 $0,4 \times 0,4 \times 0,2 \text{ мм}^3$

Длина волны: 1,06 мкм

Размеры частиц  
однородное распределение от 3 до 5 мкм, средний размер - 4 мкм

Фактор заполнения объёма частицами: 0,5

\* Gibbs, Popolato, LASL Explosive Property Data, 1980; \*\* Хрулёва и др., Труды VII ЗНЧ, 2003

## Коэффициенты отражения и прохождения

Толщина: 200 мкм

Численное моделирование:

$$R = 0,78 \pm 0,02$$

$$T = 0,06 \pm 0,02$$

Эксперимент «на просвет»

$$R = 0,94 \pm 0,05 (5 \%)$$

$$T = 0,0300 \pm 0,0015 (5 \%)$$

$$A_{\text{экс}} = 0,03$$

$$A_{\text{теор}} = 0,16 \pm 0,03$$

Толщина: 50 мкм

Численное моделирование:

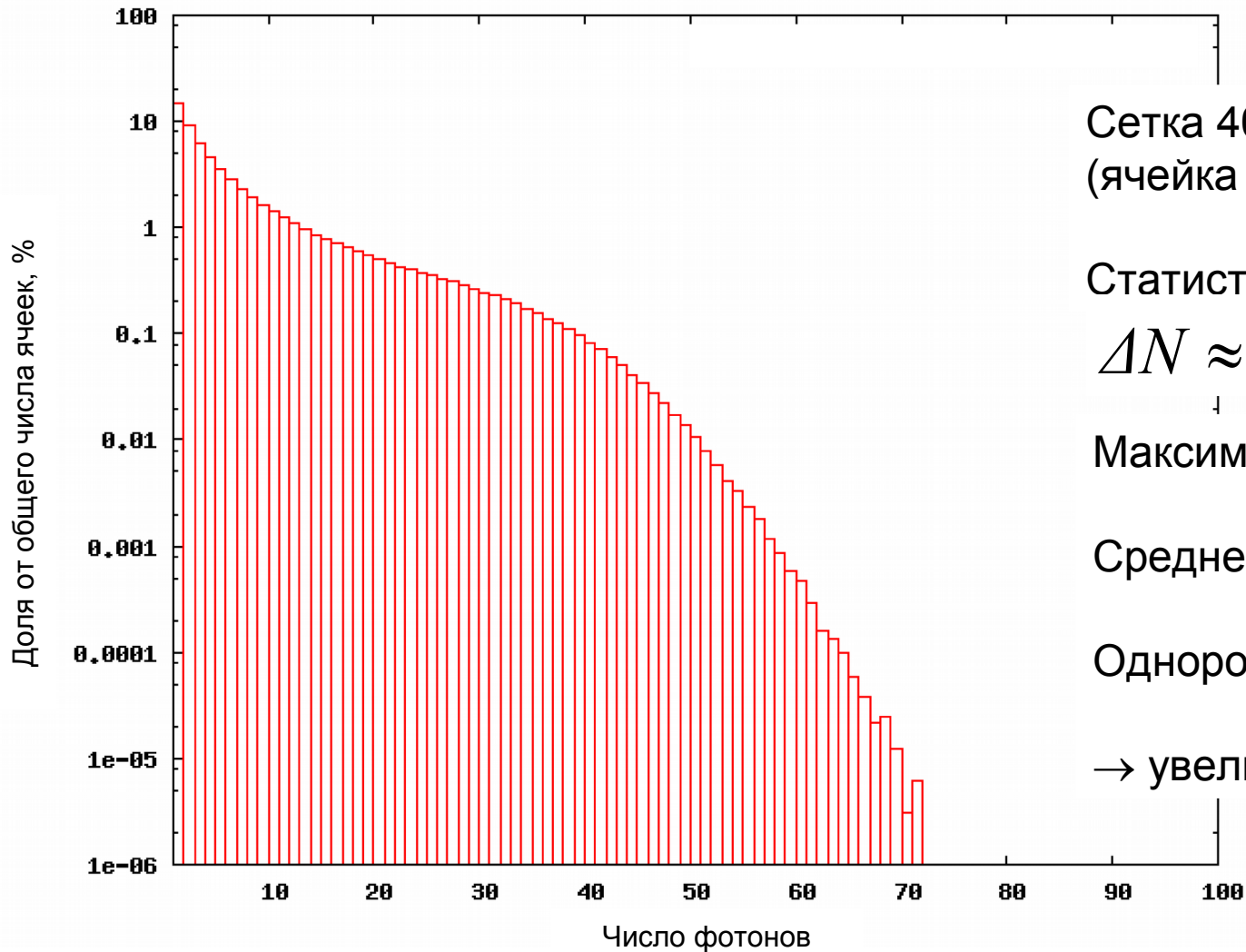
$$R = 0,58 \pm 0,07$$

$$T = 0,31 \pm 0,07$$

$$A_{\text{теор}} = 0,11 \pm 0,09$$



# Анализ статистики



Сетка  $400 \times 400 \times 200$   
(ячейка  $1 \times 1 \times 1 \text{ мкм}^3$ )

Статистическая ошибка

$$\Delta N \approx \sqrt{N}$$

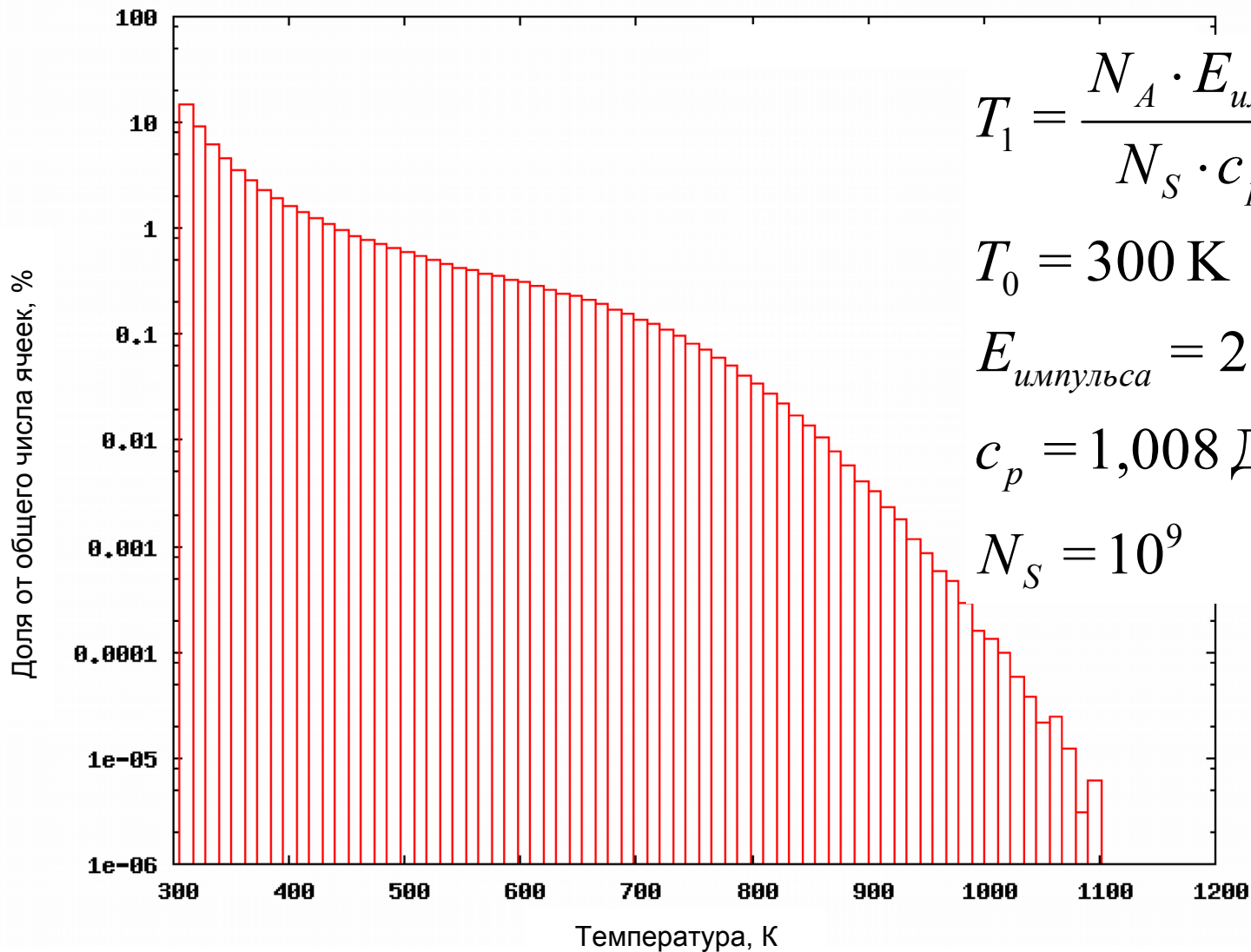
Максимум  $\sim 71 \pm 8$

Среднее значение  $\sim 4$

Однородная среда  $\sim 4$

→ увеличение  $\sim 17$  раз

# Нагрев частиц порошка



$$T_1 = \frac{N_A \cdot E_{\text{импульса}}}{N_S \cdot c_p \cdot m} + T_0$$

$$T_0 = 300 \text{ К}$$

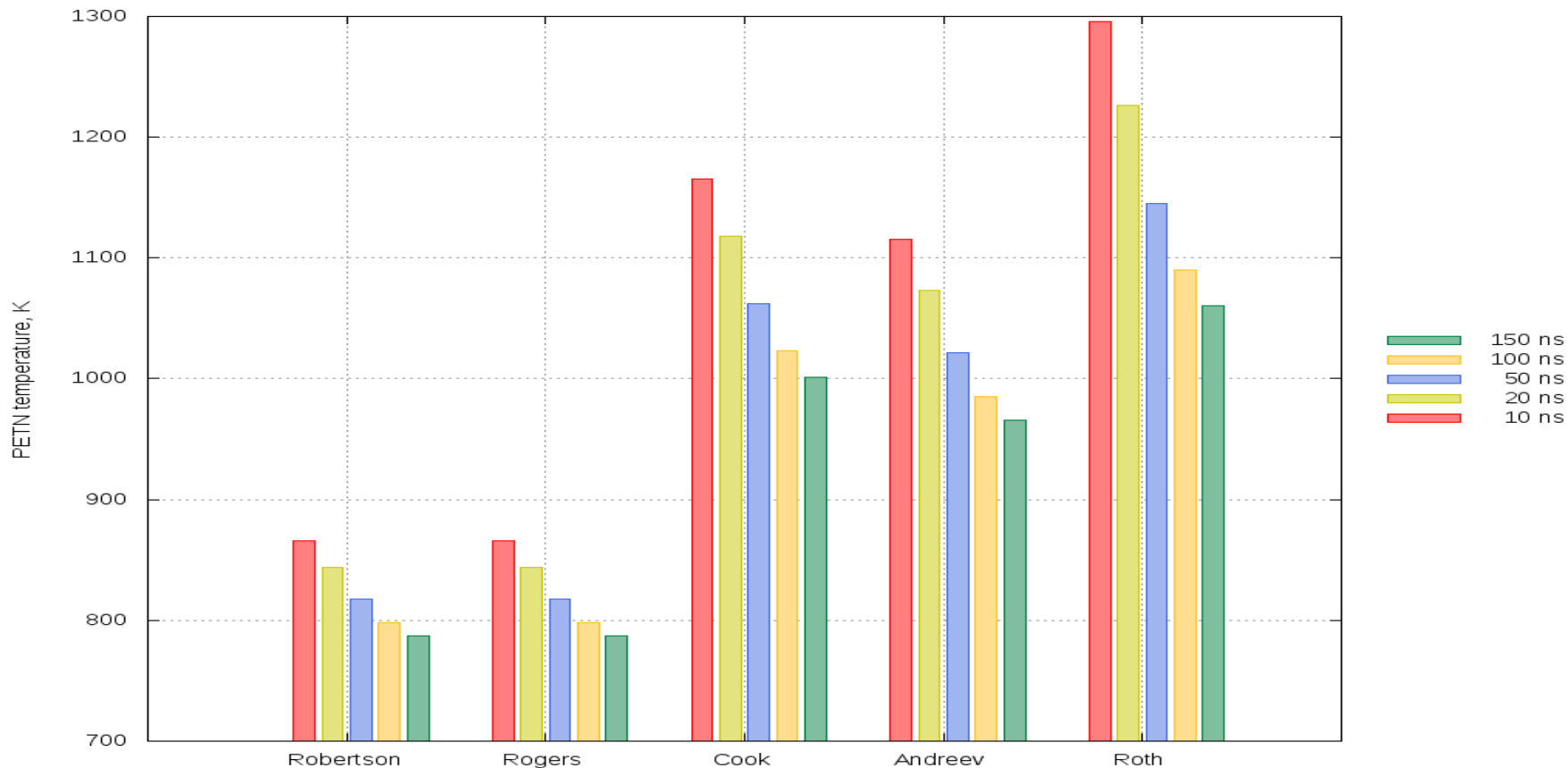
$$E_{\text{импульса}} = 20 \text{ мДж}$$

$$c_p = 1,008 \text{ Дж}/(\text{г} \cdot \text{град.})$$

$$N_S = 10^9$$

# Кинетика теплового разложения тэна\*\*

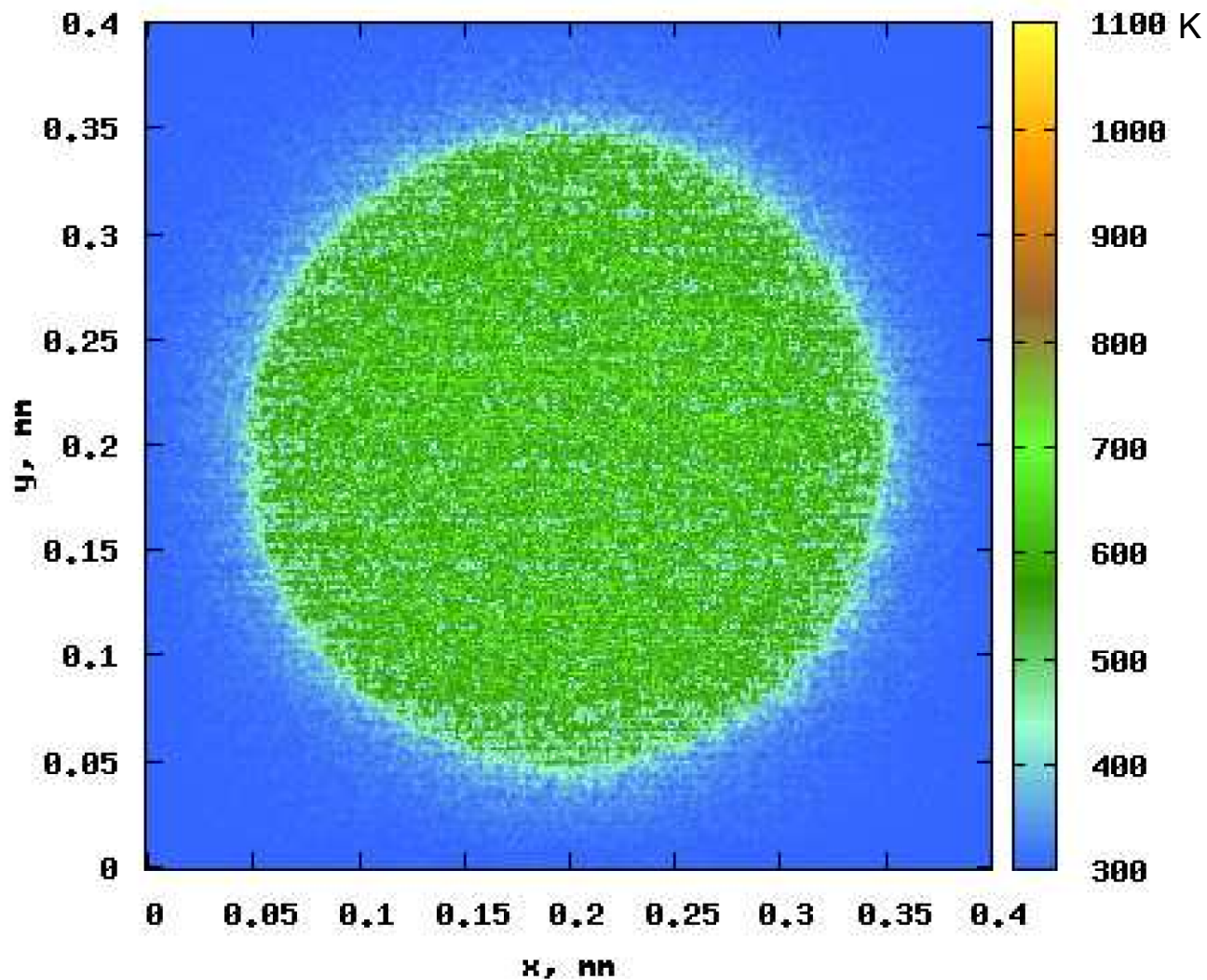
\*\*Kaye, Encyclopedia of explosives and related items, 1978



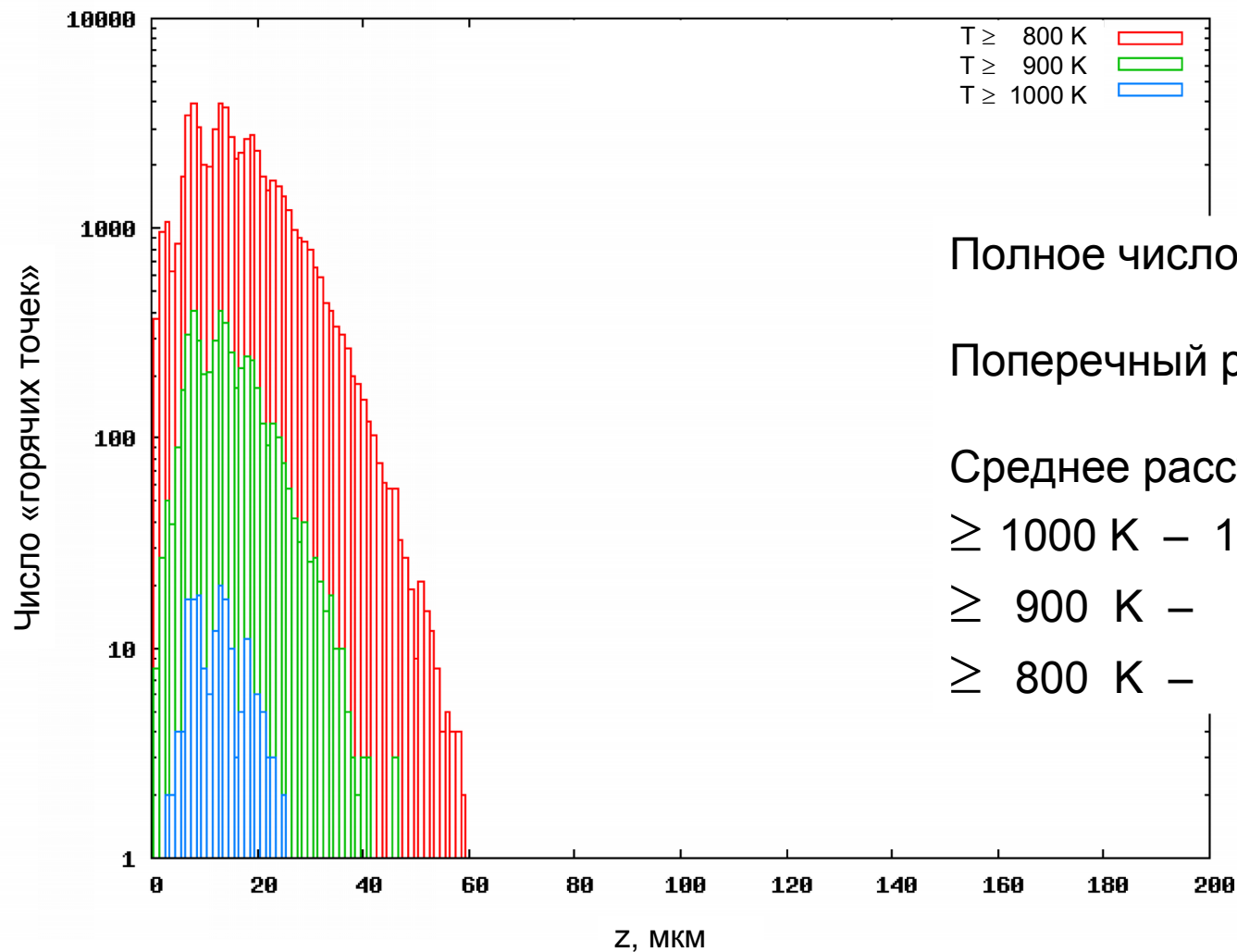
$$t_p = 1/k = Z^{-1} \exp \{T'/T\}; \text{ одна стадия}$$

Порог ~ 20 мДж, минимальное избыточное время (эксп.) ~ 120 нс при 41 мДж\*

# Распределение «горячих точек» (поперечное) $z = 4$ мкм



# Распределение «горячих точек» (продольное)



Полное число ячеек:  $32 \cdot 10^6$

Поперечный размер: 300 мкм

Среднее расстояние:

$\geq 1000 \text{ K}$  – 14 мкм

$\geq 900 \text{ K}$  – 6 мкм

$\geq 800 \text{ K}$  – 3 мкм

## Выводы

- Распределение поглощённой энергии характеризуется существенной пространственной неоднородностью. Что приводит к появлению областей, нагретых до температур существенно превышающих средние по объёму значения
- Основная доля энергии поглощается на небольших расстояниях от границы. Характерная глубина распространения лазерного импульса может быть оценена по оказываемому тепловому воздействию (до температуры 900 К и выше разогреваются слои среды на глубине не более 40 мкм при энергии 20 мДж)
- «Горячие точки» с температурой 800 К и выше образуются на среднем расстоянии между ними ~ размеров частиц
- Среднее время реакции при температуре 800 К сопоставимо с временем индукционного периода, измеряемым в детонационных экспериментах

# Перспективы

- Использование результатов в качестве **распределённого источника** для **гидродинамического** моделирования
- Исследование флуктуаций и случайных фокусировок

# Благодарности

- Дмитрию Ивановичу Савину
- Илье Владимировичу Кудинову
- Алексею Витальевич Янилкину
- Сергею Евгеньевичу Куратову
- Игорю Владимировичу Туру