

# РЕВИЗИЯ МЕХАНИЗМА ДЕТОНАЦИИ ВВ ПО *TARVER, С. М.*

**В. Ф. Анисичкин**

*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева  
Сибирского отделения РАН*

---

# THE REVISION OF *TARVER, С. М.* HE DETONATION MECHANISM

**V. F. Anisichkin**

*Lavrentyev Institute of Hydrodynamics,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences*

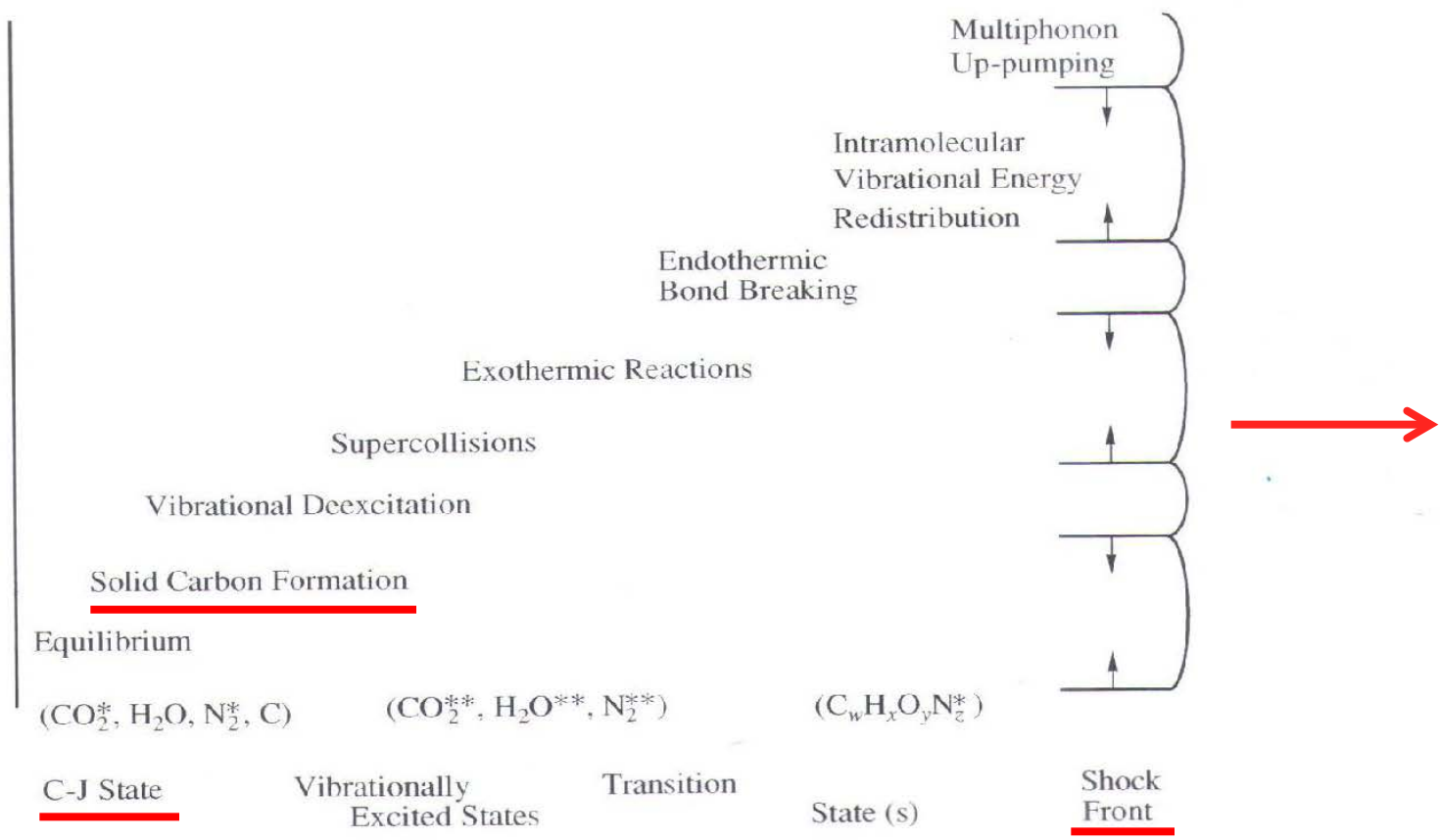
---

**ЗНЧ-2019**

**ZST-2019**

# Не равновесная Зельдович-фон Нейман-Деринг модель детонации конденсированных ВВ The Non-Equilibrium Zeldovich-von Neumann-Doring (NEZND) model of detonation for condensed phase explosives

[Tarver, C. M., Forbes, J.W., and Urtiew, P. A., Russ. J. Phys. Chem. B, Vol. 1, pp.39-45, 2007.]



(В этой модели кинетика по Аррениусу - горение из «горячих» точек. Конденсация углерода на последней стадии.)

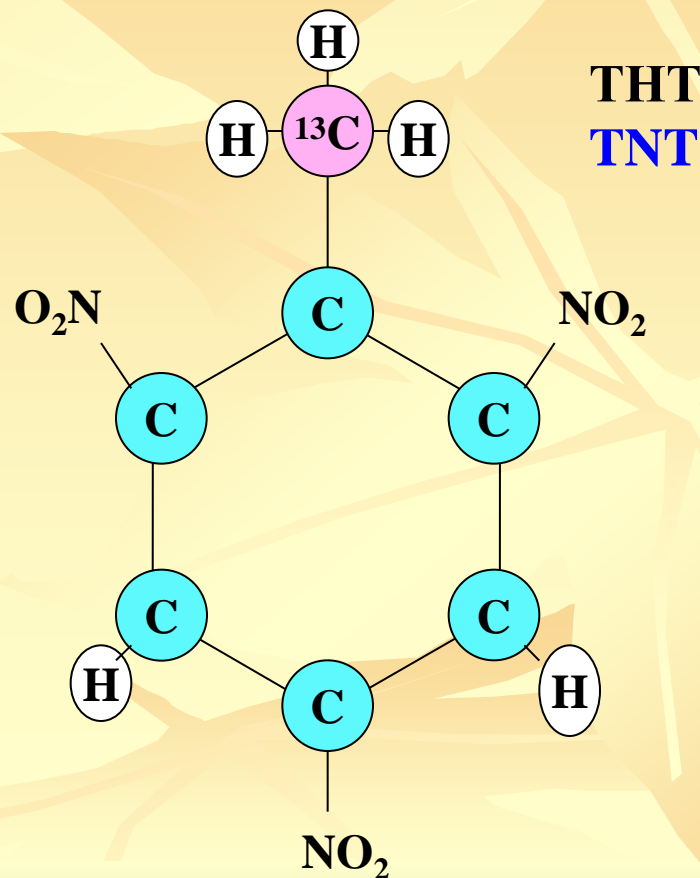
**Цель доклада:** на основе экспериментальных данных показать, что это не так. Показать, что на начальной стадии основную роль играют инициированные скачком давления реакции, и свободный углерод образуется преимущественно на начальной стадии детонационного разложения, а не на заключительной.

Первые, сомнения в механизме детонации по *Tarver, C.M.* появились при анализе результатов экспериментов с «мечеными» атомами в составе ВВ. **First, strictly reasonable doubts in the mechanism of detonation on *Tarver, C.M.* appeared when analyzing the results of experiments with the labeled atoms in the HE composition.**

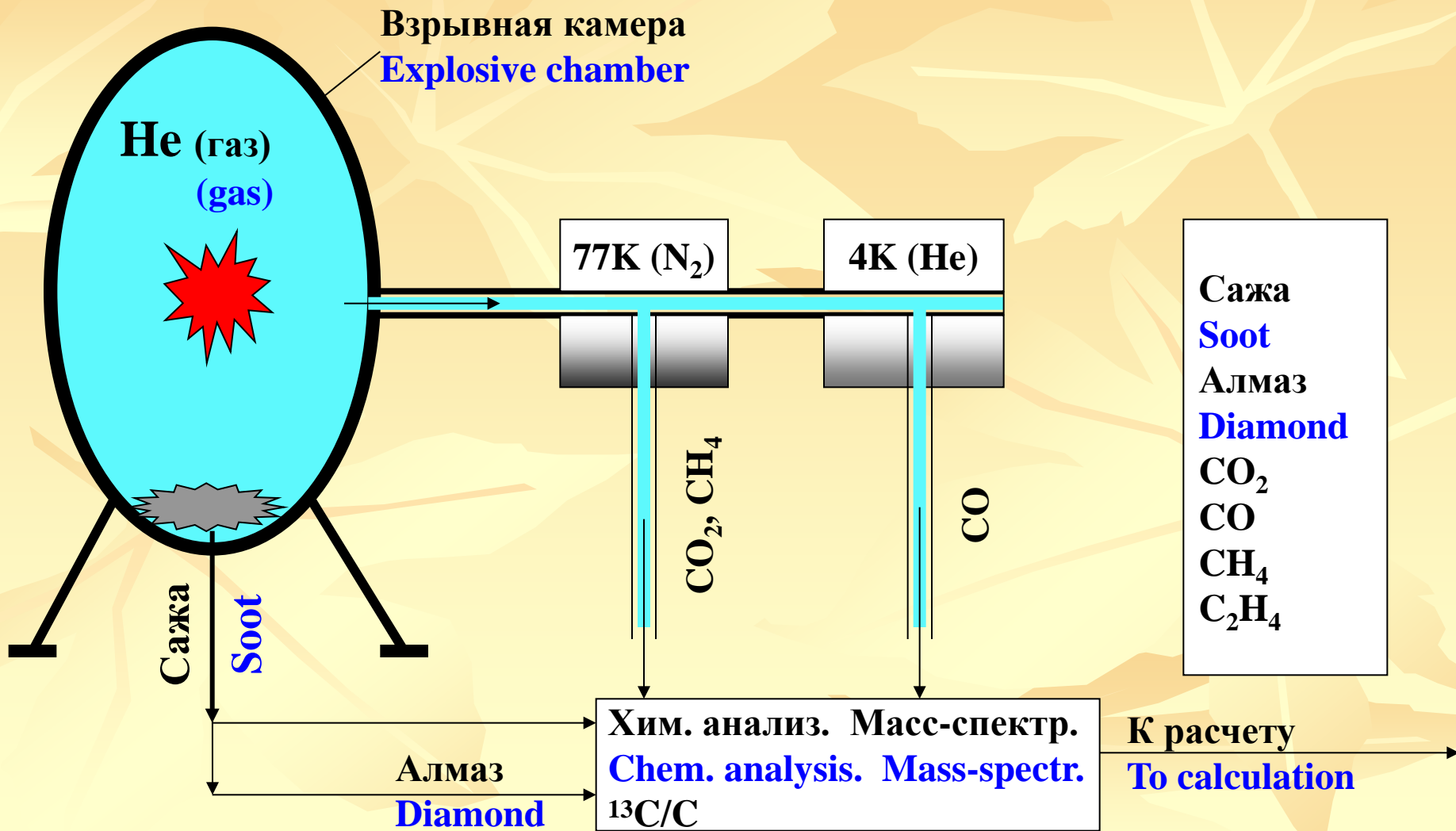
Состав заряда ВВ:  
Composition of HE charge:

«Меченые» атомы (изотопы  $^{13}\text{C}$ ) вводились в метильную группу молекул тротила (ТНТ).

Тротил смешивался с октогеном (ОГ).  
“Labeled” atoms (isotope  $^{13}\text{C}$ ) introduced in the methyl group of TNT molecules.  
TNT mixed with HMX.



Постановка эксперимента  
Experimental technique



(Газообразные продукты конденсировались последовательно до температуры жидкого гелия.)

Опыт №1: ТНТ – 40%; ГГ – 60% (размер частиц < 50 мкм)

Опыт №2: ТНТ – 40%; ОГ – 60% (размер частиц > 120 мкм)

Test No. 1: TNT – 40%; RDX – 60% (particle size < 50 μm)

Test No. 2: TNT – 40%; XMX – 60% (particle size > 120 μm)

Табл.1. Измеренное содержание  $^{13}\text{C}$  в компонентах исходных ВВ и ПД.

Table 1. Measured content of  $^{13}\text{C}$  in the HE components and DP.

Опыт № Test No.	$^{13}\text{C}/\text{C}_{\Sigma}$ , %					
	ТНТ TNT	ВВ <sub>Σ</sub> HE <sub>Σ</sub>	Продукты детонации (ПД) Detonation products (DP)			
			Сажа (в т.ч. алмаз) Soot	Алмаз Diamond	CO	CO <sub>2</sub>
1	9,2	5,4	5,5	<u>6,8</u>	4,2	4,6
2	9,2	5,0	5,9	<u>8,0</u>	4,9	3,8

[Анисичкин В.Ф., Дерендяев Б.Г., Коптюг В.А., Мальков И.Ю.,

Салахутдинов Н.Ф., Титов В.М. //Физика горения и взрыва. №3, 1988.]

Оказалось, что в алмазной фазе содержание «метки» выше, чем в других продуктах.

Следовательно, алмаз, как свободный углерод образовался раньше других ПД,

до смешивания компонентов ВВ (ТНТ и ОГ), то есть на начальной стадии детонационного разложения, в отличие от последовательности реакций по *Tarver, С.М.*

## Расчет распределения углерода ВВ по продуктам взрыва Calculation of HE carbon distribution throw detonation products

$N$  – число атомов углерода ВВ,  $C$  – число атомов свободного углерода продуктов взрыва,  $D$  – число атомов углерода алмазной фазы.

$$N_{\text{TNT}} + N_{\text{RDX}} = 100, \quad \text{где } N_{\text{TNT}} = 60,26 \quad N_{\text{RDX}} = 39,74 \quad (1)$$

– рассмотрение ведётся в расчёте на 100 атомов углерода в исходной смеси тротила (TNT) и гексогена (RDX).

$$^{13}N_{\text{RDX}} / ^{12}N_{\text{RDX}} = 0,011 \quad (2)$$

– природное соотношение числа меченых и не меченых атомов углерода в гексогене.

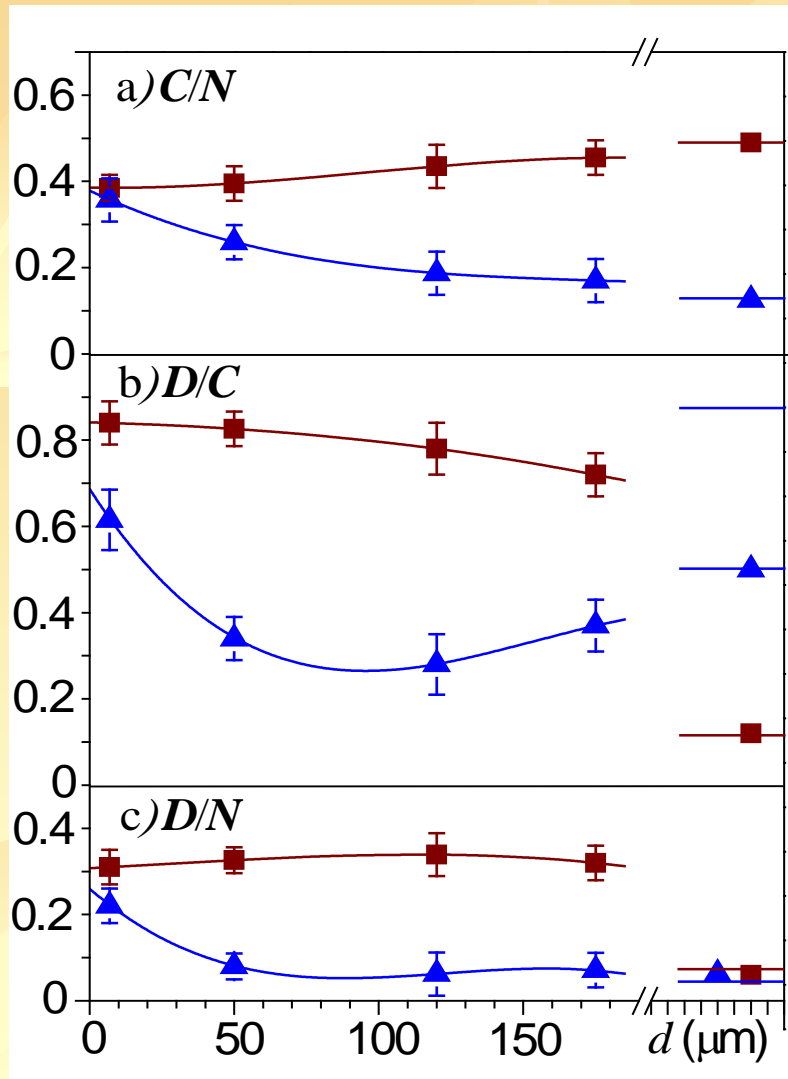
$$^{13}N_{\text{TNT}} / ^{12}N_{\text{TNT}} = 0,102 \quad (3)$$

– соотношение числа меченых и не меченых атомов углерода в обогащенном «меткой» тротиле.

.....

*И так далее (всего 36 соотношений). Et cetera....* (36)

**Решение этой системы уравнений позволило найти распределение атомов углерода компонентов смесового ВВ (ТНТ+Ок) по конденсированным и газообразным продуктам детонации.**



Зависимость состава конденсированных ПД  
компонентов ВВ от размера частиц ВВ.

Dependence of the composition of condensed detonation  
products of HE components on the size of HE grains.

■ – ТНТ TNT, ▲ – ГГ (ОГ) RDX (HMX)

a)  $C/N$  – доля углерода компонента ВВ,  
перешедшего в свободное состояние;

b)  $D/C$  – содержание алмазной фазы  
в свободном углероде компонента ВВ;

c)  $D/N$  – доля углерода компонента ВВ,  
перешедшего в алмазную фазу.

a)  $C/N$  – fraction of released carbon of the HE component;

b)  $D/C$  – content of the diamond phase in the free carbon  
of the HE component;

c)  $D/N$  – fraction of carbon of the HE component  
converted to the diamond phase.

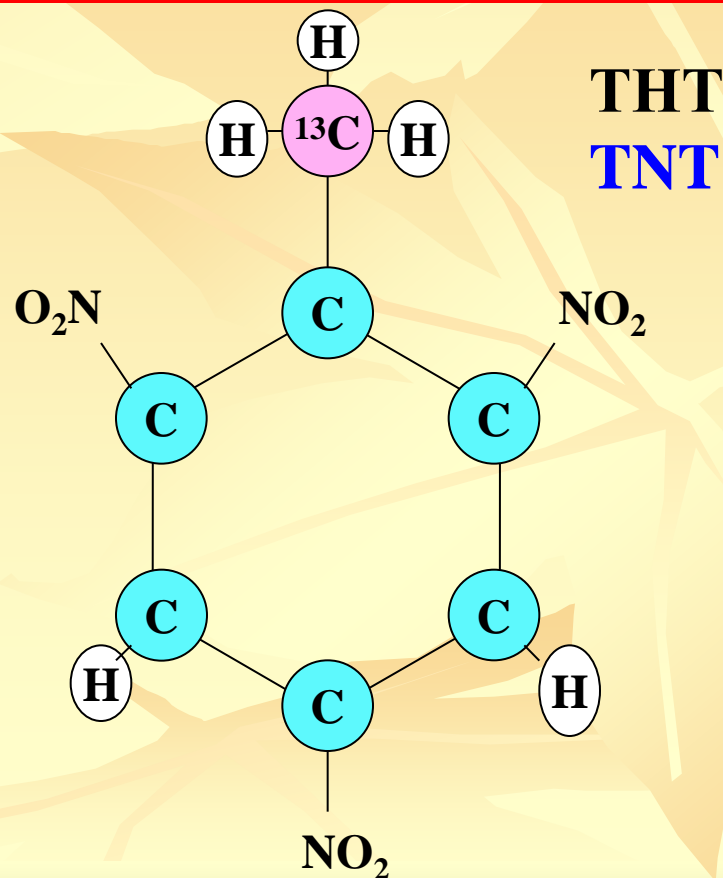
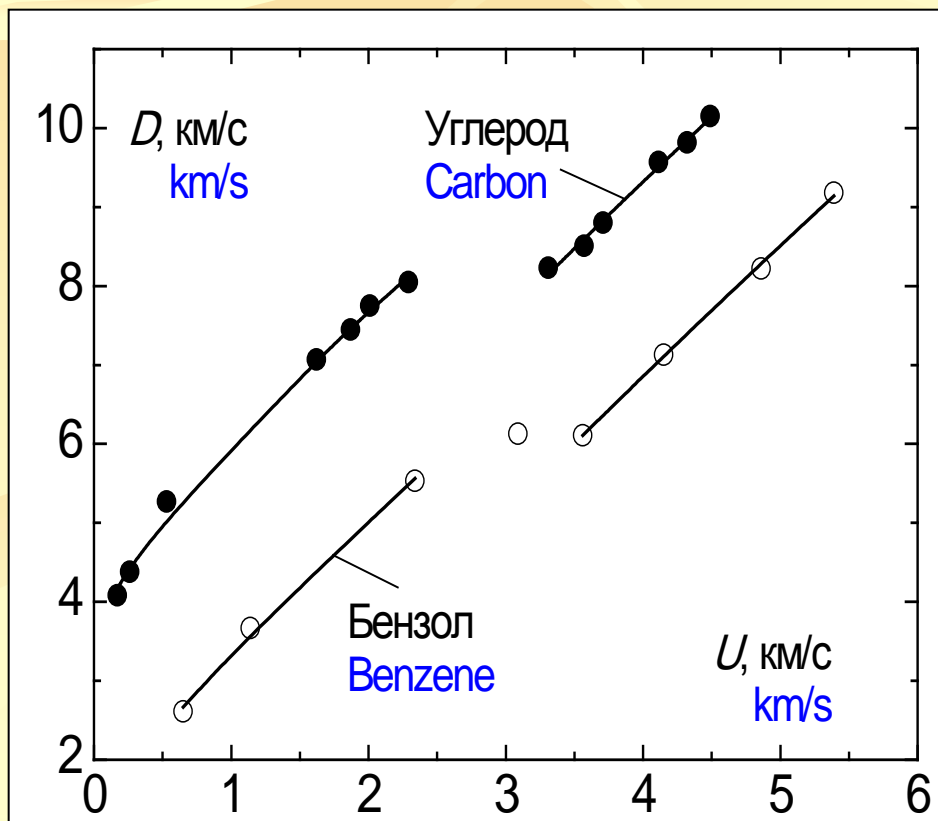
**В свободном углероде,  
выделившемся из тротила,  
содержание алмазной фазы существенно выше.**



**Почему атомы углерода тротила в большей степени выделяются в алмазной фазе?**

Предположение, что во фронте сильной УВ углеродосодержащие ВВ, химические соединения на начальной стадии разлагаются на метан, с участием всех атомов водорода, на алмаз и другие ПД. (Чем больше водорода, тем меньше алмаза!)

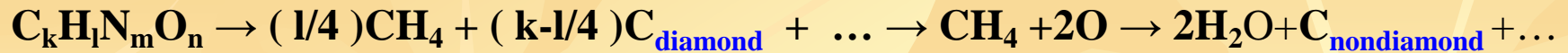
Hypothesis: in the strong SW carbon-containing HE and chemical substances on the initial stage decompose to diamond, methane, etc.





Примеры расчета разложения ВВ и инертных органических веществ в УВ по формуле:

Examples of calculation of HE and inert organic substances decomposition in SW under the formula:



Состав Composition		Алмаз/сажа Diamond/soot %	
		Расч. Calc.	Экспер. Expt.
ОГ+ HMX+	$C_{12}H_4N_8O_8$ (Tacot) - 70%	85	69
	$C_{12}H_4N_8O_{12}$ (HNAB) - 100%	91	71
	$C_3H_8N_4O_4$ (DNP) - 70%	40	32
	$C_3H_8O_3$ (glycerin)	*33	*33
	$C_3H_6O$ (allyl alcohol)	*50	*55
	$C_3H_4O$ (propargyl alcohol)	*67	*65
	$C_3H_7N$ (allyl amine)	*41	*42



\*В собственном конденсированном углероде (саже).

\*In own condensed carbon (soot)

(В слабых ВВ алмаза меньше расчетных значений из-за низких давлений детонации. В инертных добавках в мощный октоген параметры детонации выше – расчет более точен!)

**Пример:** Механизм детонационного разложения мелкозернистого Т/Г 40/60 (Основные стадии).

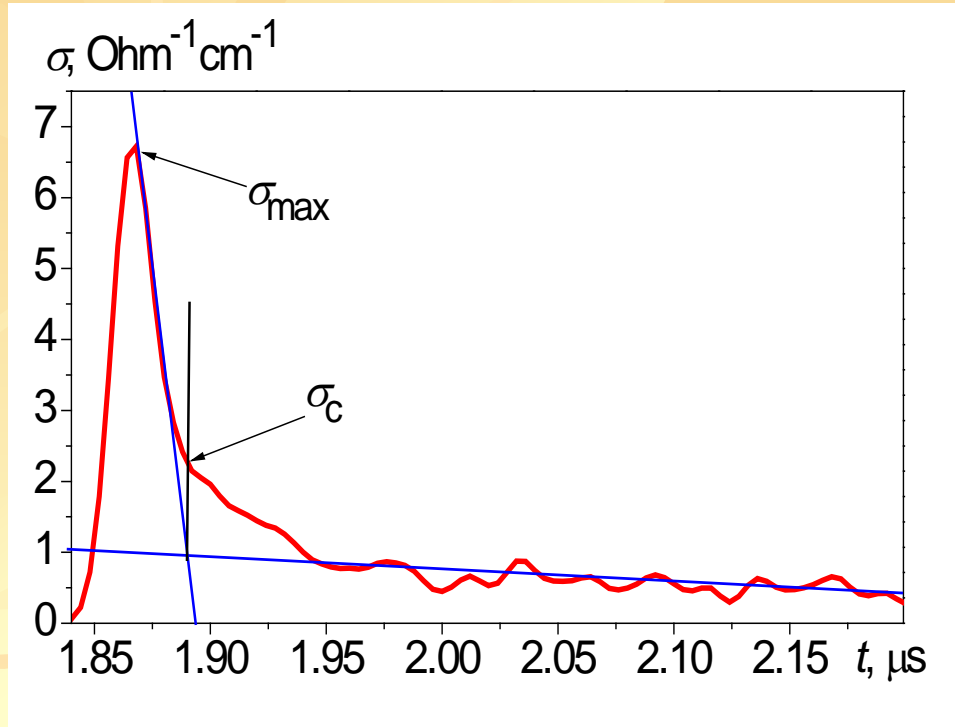
**Example:** Mechanism of detonation destruction of fine-grained Comp. B (Basic stages).

<b>ВВ</b>  <b>Фронт УВ</b>	<b>HE</b>  <b>SW front</b>
<b>Разложение до метана и свободного углерода в алмазной фазе, и др. ПД</b>	<b>Decomposition up to methane, free carbon in a diamond phase, etc. PD</b>
<b>Окисление водорода метана – выделение не алмазного углерода</b>	<b>Oxidation of methane's hydrogen - separation of non-diamond carbon</b>
<b>Полное перемешивание алмазных и не алмазных углеродных частиц.</b>	<b>Complete mixing of carbon particles (diamond and non-diamond).</b>
<b>Частичное окисление свободного углерода.  <math>2CO \leftrightarrow CO_2 + C</math></b>	<b>Partial oxidation of free carbon  <math>2CO \leftrightarrow CO_2 + C</math></b>

## Проводимость фронта детонационной волны

### Conductivity of the detonation front

(Ершов А.П., Сатонкина Н.П. и др.)

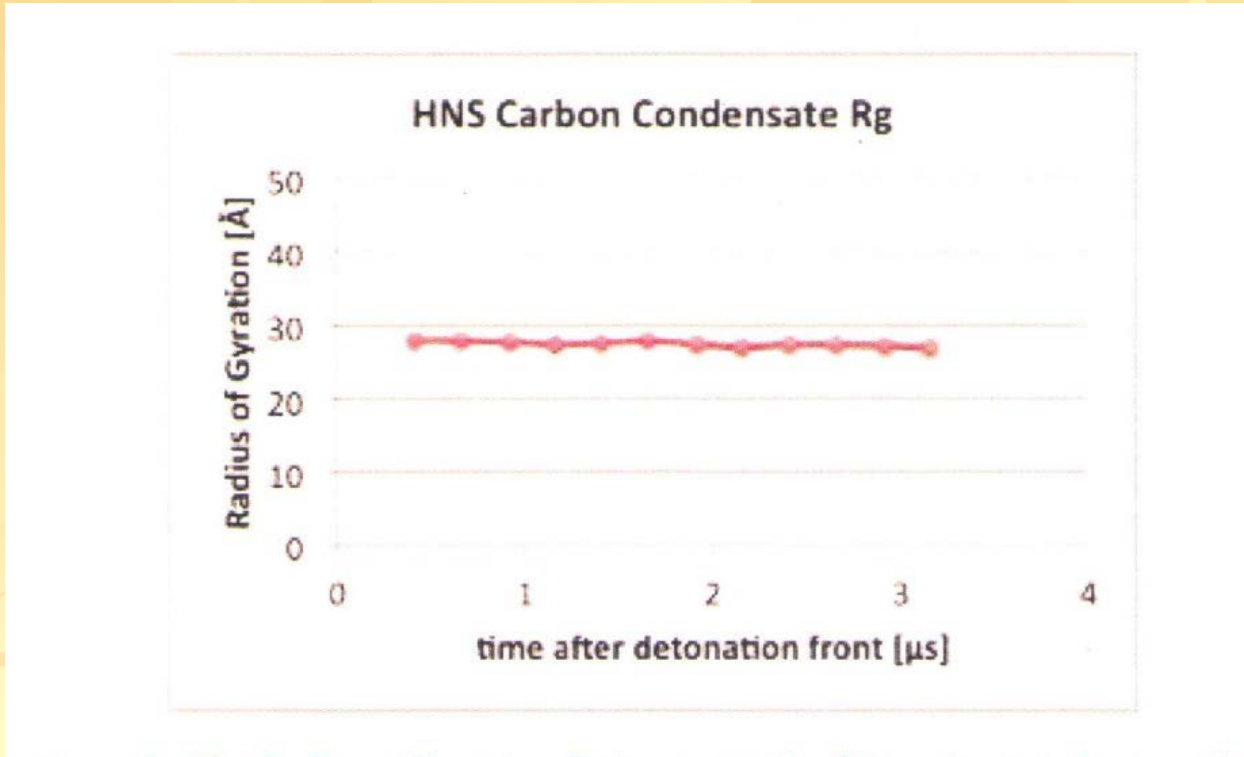


Было получено, что максимальные значения проводимости во фронте детонационной волны коррелируют с рассчитываемым выделением всего углерода в свободном виде на начальной стадии детонационного разложения для самых разных ВВ.

**То есть, как и показано выше, в процессе детонации есть момент, когда практически весь углерод может быть в свободном состоянии.**

## Time-resolved small-angle x-ray scattering (SAXS) from detonating explosives

(M. Bagge-Hansen, L. Lauderbach, R. Hodgins, S. Bastea, L. Fried, A. Jones, T. van Buuren, D. Hansen, J. Benterou, C. May, T. Graber, B. J. Jensen, J. Ilavsky, and T. M. Willey)



The data show that HNS produces carbon particles with a radius of gyration of 2.7 nm in less than 400 ns after the detonation front has passed, and this size is constant over the next several microseconds.

Следовательно, зародыши алмазной фазы (свободный углерод) возникают еще раньше, до заключительных реакций детонационного разложения.

**ВЫВОД:** Результаты экспериментов с мечеными атомами углерода, данные по измерению проводимости детонационного фронта, кинетика роста алмазных частиц не согласуются с моделью детонации Tarver C.M.

**SUMMARY:** Model by Tarver C.M. is wrong.

---

Основные стадии, включающие превращения углерода :

The basic stages of process of carbon transformation:

1. Начальной стадией превращений органических веществ в достаточно сильных УВ и ДВ является разложение на метан, углерод в алмазной фазе (и др. ПД).  
( Зародыши плотной фаза возникают непосредственно при скачке давления во фронте УВ.)
  2. Окисление водорода метана и выделение свободного углерода в не алмазной фазе.
  3. Частичное окисление свободного углерода.
1. An initial stage of transformations of organic substances in SW and DW is decomposition on methane, carbon and etc.  
( Diamond arises directly in SW front.)
  2. Hydrogen oxidation.
  3. Partial carbon oxidation.

**Спасибо за внимание!**