



РОСАТОМ



ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

Три проекта РФЯЦ-ВНИИТФ

Зимняя школа по физике высоких плотностей энергии
Снежинск, 25 – 27 февраля 2026г.

Гребёнкин К.Ф., академик РАН,
первый заместитель научного
руководителя

Проект № 1: Реактор-лазер



- В реакторе-лазере («лазере с ядерной накачкой» - ЛЯН) производится прямое преобразование энергии деления ядер в лазерное излучение (ЛИ).
- Принципиальная возможность создания ЛЯН была показана экспериментально в начале 70-х годов прошлого века.
- Цель проекта – оценка достижимого КПД и других характеристик ЛЯН.

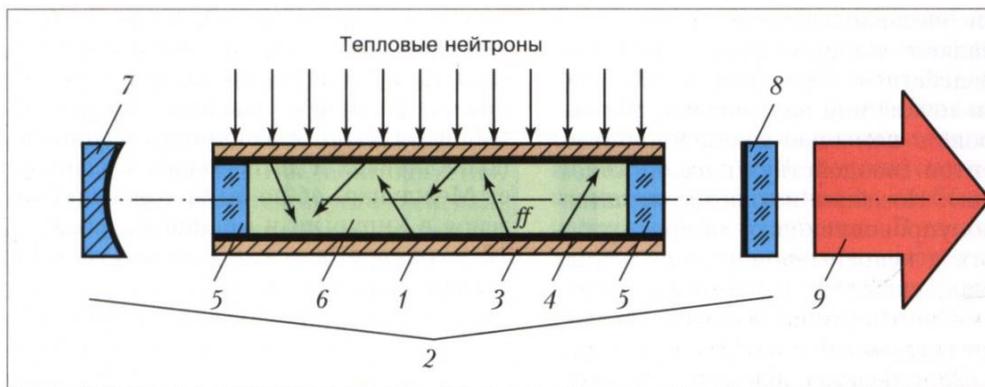
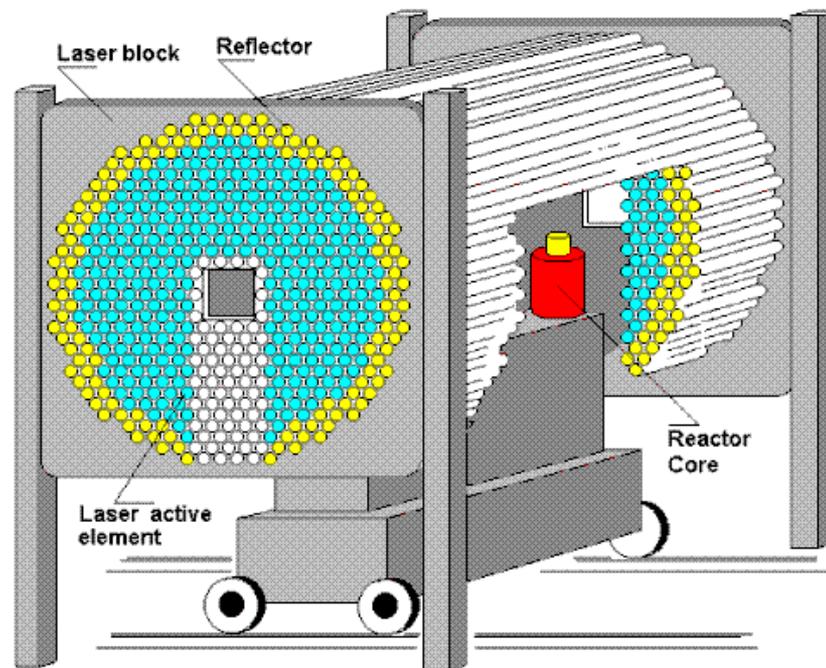


Схема ячейки газового ЛЯН с накачкой осколками деления урана: 1 – лазерный катод; 2 – оптический резонатор; 3 – тонкостенная металлическая труба; 4 – урановое покрытие; 5 – оптические окна с просветлением на длину волны лазерного излучения; 6 – активная среда; 7 – глухое зеркало; 8 – полупрозрачное зеркало; 9 – лазерный пучок, *ff* – осколки деления.

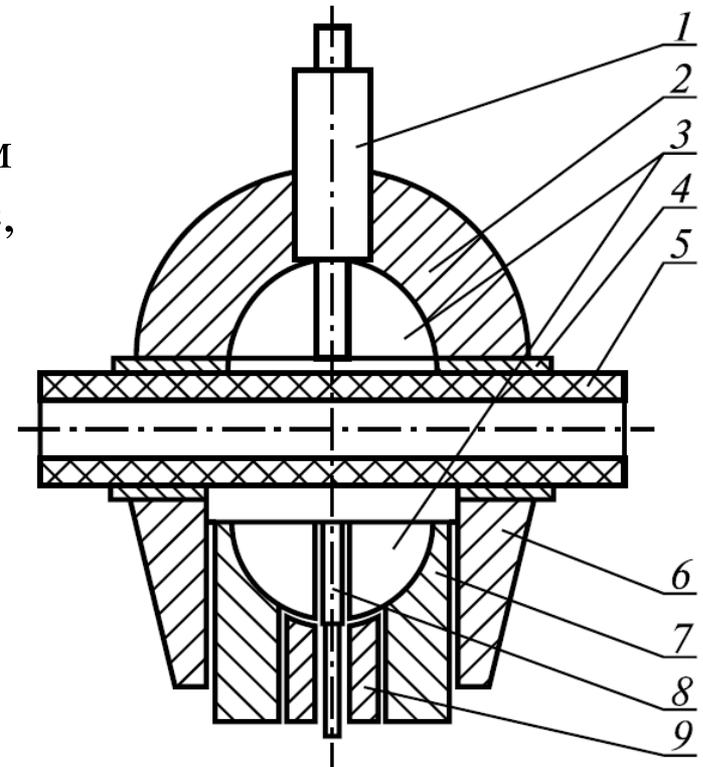


Направления работ по проекту



- Пилотное проектирование мощной лазерной установки с ядерной накачкой.
- Экспериментальные исследования лазерной генерации и люминесценции на импульсном реакторе ЭБР-Л (импульс накачки ~ 200 мкс, ≤ 5 кВт/см³).
- Расчетно-теоретические исследования:
 - Разработка и верификация кинетических плазмохимических моделей;
 - Оценка констант основных процессов по результатам измерений люминесценции;
 - Поиск перспективных активных сред (АС), оценка их характеристик, предложения по экспериментам.
- Совместная работа с экспериментаторами.

Реактор ЭБР-Л

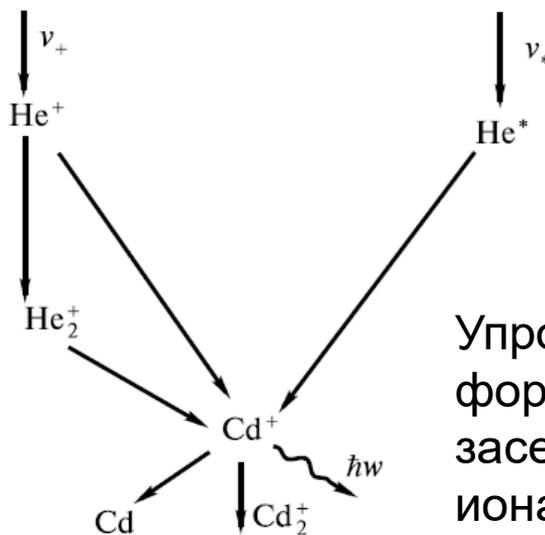


1 – механизм тонкой регулировки реактивности; 2 – верхний отражатель; 3 – полусферическая сборка из U235; 4 – средний отражатель; 5 – замедлитель; 6 – нижний отражатель; 7 – блок безопасности; 8 – импульсный стержень; 9 – стоп-блок.

Плазмохимические реакции в He-Cd ЛЯН

Номер реакции	Реакция
1	$\text{He}^+ + 2\text{He} \rightarrow \text{He}_2^+ + \text{He}$
2	$\text{He}^+ + \text{Cd} \rightarrow \text{Cd}^+ + \text{He}$
3	$\text{He}_2^+ + \text{Cd} \rightarrow \text{Cd}^+ + 2\text{He}$
4	$\text{He}^* + \text{Cd} \rightarrow \text{Cd}^+ + \text{He} + e$
5	$\text{He}^* + 2\text{He} \rightarrow \text{He}_2^* + \text{He}$
6	$\text{Cd}^+ + \text{Cd} + \text{He} \rightarrow \text{Cd}_2 + \text{He}$
7	$\text{He}^* + \text{Cd}^* \rightarrow \text{Cd}^+ + \text{He} + e$
8	$\text{Cd}_2^+ + e \rightarrow \text{Cd}^* + \text{Cd}$
9	$\text{Cd}^* + \text{Cd} + \text{He} \rightarrow \text{Cd}_2^+ + \text{He}$
10	$\text{Cd}^* + 2\text{Cd} \rightarrow \text{Cd}_2^+ + \text{Cd}$
11	$\text{Cd}^* + e \rightarrow \text{Cd} + e$
12	$\text{Cd}^+ + 2e \rightarrow \text{Cd}^* + e$
13	$\text{Cd}_2^+ + \text{Cd} + \text{He} \rightarrow \text{Cd}_3^+ + \text{He}$
14	$\text{Cd}_3^+ \rightarrow 3\text{Cd} + h\nu$
15	$\text{Cd}_2^+ \rightarrow 2\text{Cd} + h\nu$
16	$\text{Cd}^+ + e + \text{He} \rightarrow \text{Cd}^* + \text{He}$
17	$\text{He}^+ + 2e \rightarrow \text{He}^* + e$
18	$\text{He}_2^+ + 2e \rightarrow \text{He}_2^* + e$
19	$\text{He}_2^+ + e + \text{He} \rightarrow \text{He}_2^* + \text{He}$
20	$\text{He}_2^+ + e \rightarrow \text{He} + \text{He}^*$
21	$\text{He}^+ + e \rightarrow \text{He}^* + h\nu$
22	$\text{He}_2^+ + \text{He}_2^+ \rightarrow \text{He}^+ + 3\text{He} + e$
23	$\text{He}^* + 2\text{He} \rightarrow \text{He}_2^* + \text{He}$
24	$\text{He}_2^+ + e \rightarrow \text{He}_2 + 2e$
25	$\text{He}^* + e \rightarrow \text{He} + e$
26	$\text{He}_2^* + e \rightarrow 2\text{He} + e$
27	$\text{He}_2^* \rightarrow 2\text{He} + h\nu$
28	$\text{He}_2^* + \text{Cd} \rightarrow \text{Cd}^+ + 2\text{He} + e$

Номер реакции	Реакция
29	$\text{He}_2^* + \text{Cd}^* \rightarrow \text{Cd}^+ + 2\text{He} + e$
30	$\text{He}_2^+ + \text{Cd}^* \rightarrow \text{Cd}^{++} + \text{He}$
31	$\text{Cd}^+ + 2e \rightarrow \text{Cd}^* + e$
32	$\text{Cd}^+ + e + \text{He} \rightarrow \text{Cd}^* + \text{He}$
33	$\text{Cd}_2^+ + e \rightarrow \text{Cd}^* + \text{Cd}$
34	$\text{Cd}_2^+ + \text{Cd} \rightarrow \text{Cd}^* + 2\text{Cd}$
35	$\text{Cd}_3^+ + \text{He} \rightarrow \text{Cd}_2^+ + \text{Cd} + \text{He}$
36	$\text{Cd}_2^+ + e \rightarrow 2\text{Cd} + e$
37	$\text{Cd}_3^+ + e \rightarrow 3\text{Cd} + e$
38	$\text{Cd}^* \rightarrow \text{Cd} + h\nu$
39	$\text{Cd}^{++} + 2e \rightarrow \text{Cd}^+ + e$



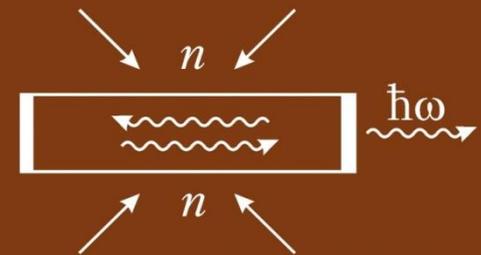
Упрощенная схема формирования инверсной заселенности уровней иона Cd⁺

ИТОГИ ПРОЕКТА



- В условиях ядерной накачки получена лазерная генерация на 23-х длинах волн в 12-ти активных средах, в том числе, впервые получена генерация ЛЯН в УФ-диапазоне в условиях, которые были предсказаны теоретически. Научные результаты представлены в сборнике статей.
- Достигнуто максимальное значение КПД (по отношению к энергии, вложенной в АС $\sim 2\%$). Энерговклад в АС ЛЯН составляет $\leq 20\%$ от энергии делений. КПД преобразования энергии деления ядер в лазерное излучение не превышает 0.4% .
- Работы по ЛЯН были прекращены, и в институте стали развивать новое направление – лазеры с диодной накачкой (ЛДН).
- КПД преобразования ядерной энергии в ЛИ в системе «обычный ядерный реактор + ЛДН» составляет $\sim 0.3 \cdot 0.7 \cdot 100\% \approx 20\%$.

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
ЛАЗЕРОВ С НАКАЧКОЙ
ОТ ИМПУЛЬСНЫХ
ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ
В РФЯЦ - ВНИИТФ



Снежинск, 2019г.

Проект № 2: Ускорительная трансмутация РАО и свойства жидкосолевого ядерного топлива*



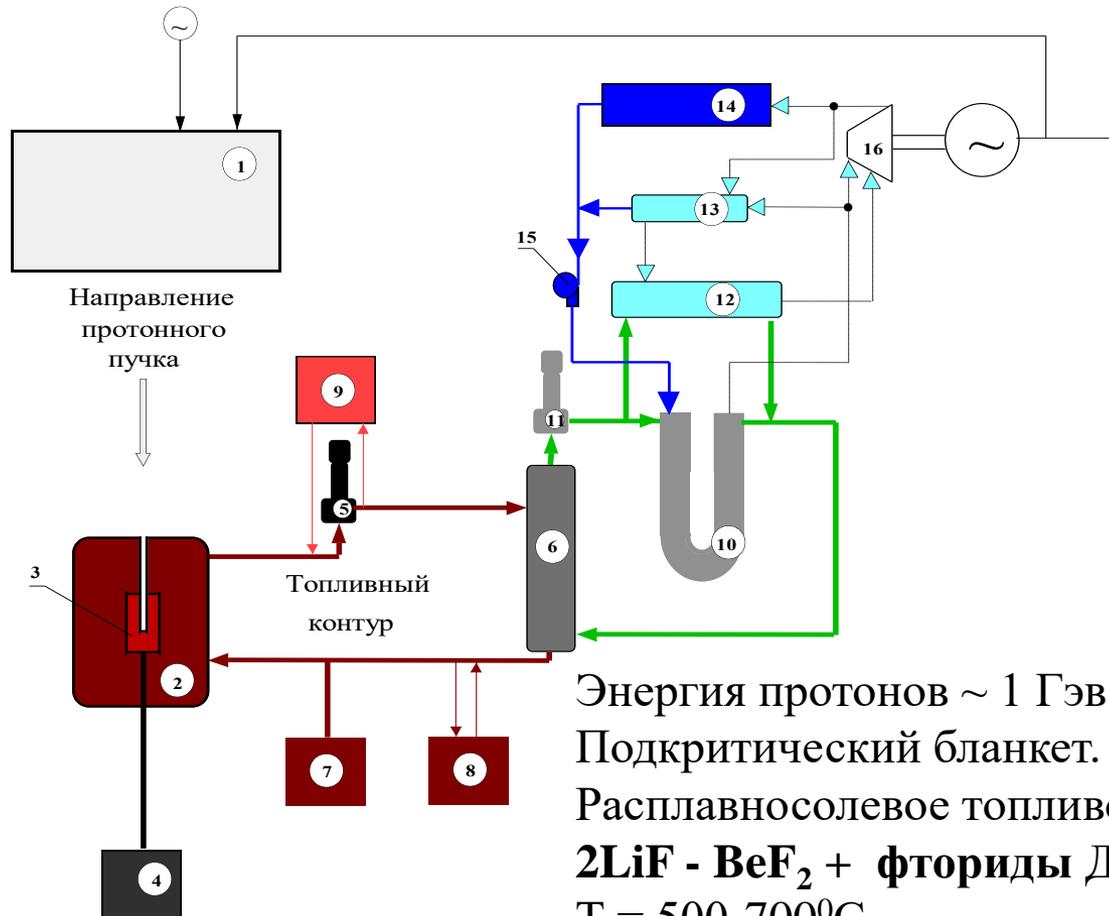
Направления работ:

- Концептуальное проектирование установки.
- Критмассовые эксперименты с моделью активной мишени.
- Экспериментальные исследования свойств жидкосолевого топлива, содержащего плутоний.

Организации-участники:

1. РФЯЦ-ВНИИТФ
2. РНЦ-КИ
3. ВНИИХТ
4. ИВТЭ УрО РАН

Инициатор проекта: ЛАНЛ (США)



- Энергия протонов ~ 1 ГэВ.
Подкритический бланкет.
Расплавосолевого топлива:
2LiF - BeF₂ + фториды ДМ
T = 500-700°C
- 1 - протонный ускоритель; 2 - бланкет; 3 - мишень; 4 - система охлаждения мишени;
 - 5 - топливный насос; 6 - первичный теплообменник; 7 - бак для слива и первоначального накопления топлива; 8 - система переработки топлива; 9 - система отвода и очистки ГПД;
 - 10 - парогенератор; 11 - циркуляционный насос; 12 - пароперегреватель;
 - 13 - паронагреватель; 14 - конденсатор; 15 - питательный насос;
 - 16 - паротурбогенератор.

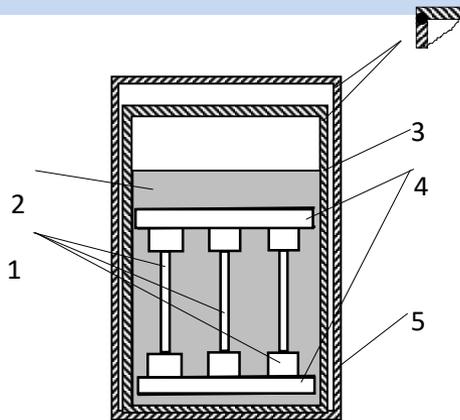
* Работы выполнялись при поддержке МНТЦ

Экспериментальные исследования жидкосолевого топлива, содержащего трифторид плутония

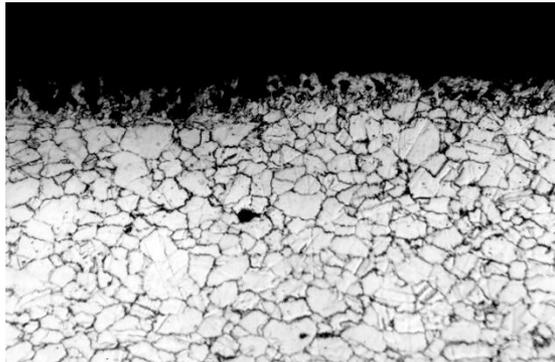


- На первом этапе исследовалась солевая композиция **LiF(65%)-BeF₂(30%)-ZrF₄(5%)**, проверенная при работе экспериментального реактора MSRE в ORNL в 60-х годах прошлого века. В отличие от топлива MSRE, UF₄ был заменен на PuF₃ ($\leq 1\%$).
- Создана установка для синтеза трифторида плутония.
- Измерена растворимость трифторида плутония в перспективных расплавносолевых средах.
- Исследованы теплофизические свойства расплавносолевых композиций
- Проведены ампульные коррозионные эксперименты, в которых исследовалось влияние PuF₃ на процесс коррозии.
- Создан коррозионный стенд с естественной циркуляцией соли и проведены эксперименты с расплавносолевым топливом, содержащим Pu.

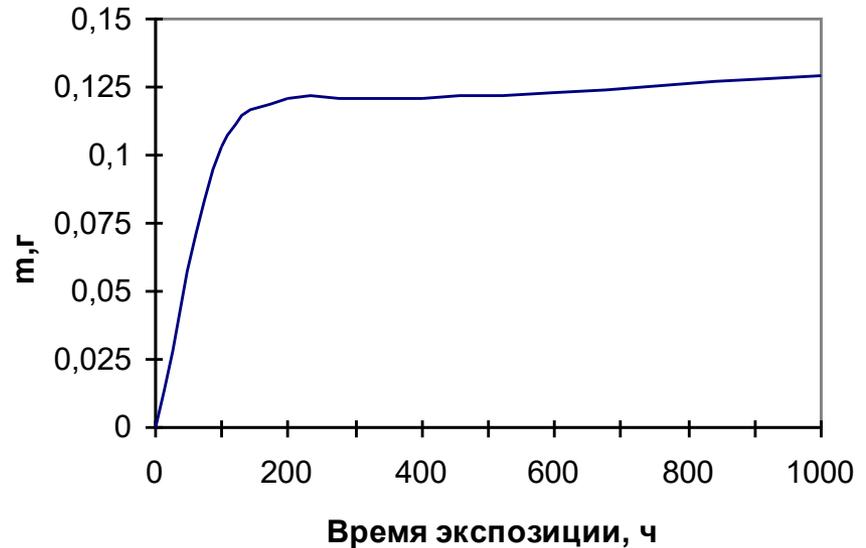
Ампульные коррозионные эксперименты



1 - образец; 2 - расплав соли; 3 - коррозионная ампула; 4 - сепаратор; 5 - защитный контейнер.



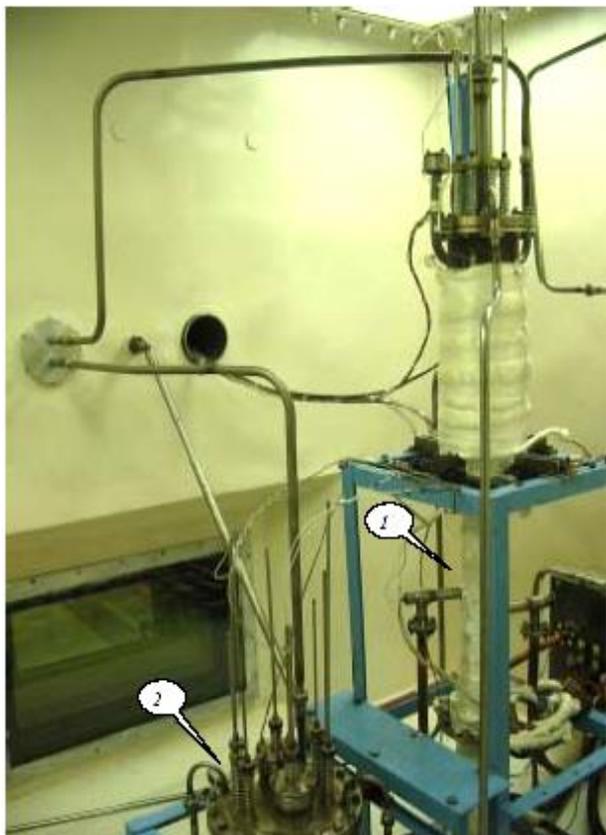
Структура сплава XH80MTЮ, после испытаний в среде (LiF-BeF2-ZrF4) + PuF3 в течение 1000 час. x 440.



Изменение массы образцов из сплава XH80MTЮ в расплаве (LiF-BeF2-ZrF4)+PuF3. Скорость коррозии ~ 5 мкм/год

Вывод: Присутствие трифторида плутония в солевых композициях не приводит к заметным изменениям процессов коррозии материалов

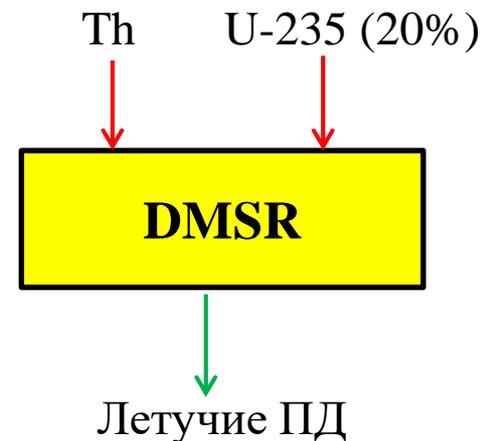
Созданный в РФЯЦ-ВНИИТФ коррозионный стенд с естественной циркуляцией соли, содержащей Pu



- Высота контура циркуляции: 1.2 м
- Диаметр основной трубы: 45 мм
- Скорость циркуляции: 1 – 5 см/сек
- Максимальная температура: 670С
- Перепад температуры: 80 – 100 С
- Масса расплава: 10 - 15 кг
- Ресурс работы: 1500 ча

Полученные результаты инициировали обсуждение возможности разработки жидкосолевого «реактора-мусорщика» с быстрым или промежуточным спектром.

Предложение по созданию демонстрационной установки в РФЯЦ-ВНИИТФ



Топливный цикл «1-проходного» реактора DMSR

- **Демонстрационный DMSR малой мощности:**
 - нет репроцессинга (только выделение летучих ПД),
 - использование Th, которого в несколько раз больше, чем U,
 - требует в 6 раз меньше U-235 (на единицу энергии), чем LWR* (50 -> 300).
 - в топливном цикле нет оружейных материалов (20% U-235),
 - кардинальное снижение количества долгоживущих РАО (4 порядка по TRU*).
- **Оценка затрат на доработку технологии и создание демонстрационного реактора:**
~ 1 млрд. \$ на 10 лет. (R. Moir, *Energy Conv. & Manag.*, 2008, 49, 1849).

Итоги проекта



- Измерена растворимость Pu в перспективных солевых композициях и измерены их теплофизические характеристики.
- Показана совместимость жидкосолевого топлива, содержащего Pu , с конструкционными материалами первого контура.
- Подготовлено предложение по созданию демонстрационного ЖСР с упрощенным топливным циклом.
- Стало ясно, что ЖСР может обеспечить альтернативный способ замыкания топливного цикла. Вопрос о сравнении жидкого и твердого ядерного топлива остается открытым.
- Работы продолжаются. Планируется после 2030г. построить 10-мегаватный исследовательский ЖСР в г. Северске.

Проект № 3: Физическая модель детонации мелкокристаллических пластифицированных ВС



- Несмотря на многолетнюю предысторию изучения и практического применения детонации конденсированных ВВ, до сих пор о микрофизике детонационных процессов мало что известно («Mystery of Detonation» - Simpson e.a., LLNL).
- Существует множество моделей детонации, которые, по замечанию Р.Шере, «находятся в состоянии холодной войны друг с другом».
- Зато хорошо известно, что детонационные свойства определяются не только структурой молекул, но и мезоструктурой ВВ, и одно и то же химическое соединение имеет разные свойства в разных физических состояниях:
 - ✓ монокристаллическом,
 - ✓ литом,
 - ✓ мелкокристаллическом насыпном,
 - ✓ мелкокристаллическом прессованном,
 - ✓ мелкокристаллическом пластифицированном (далее рассматриваются только они).

Построение «единой теории» всех ВС в обозримом будущем нереально !

Ключевая идея - иерархия масштабов детонационных процессов



МИКРО

Размеры молекул
Время хим. реакции.

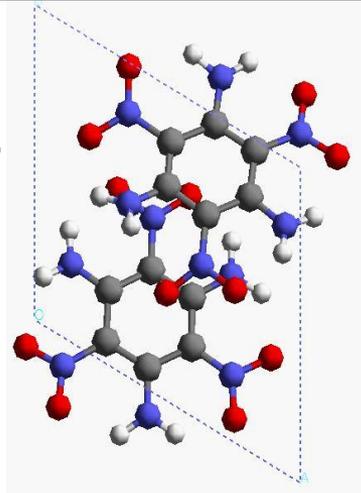
МЕЗО

Размеры
микрористаллов.
Время их горения
после действия УВ.

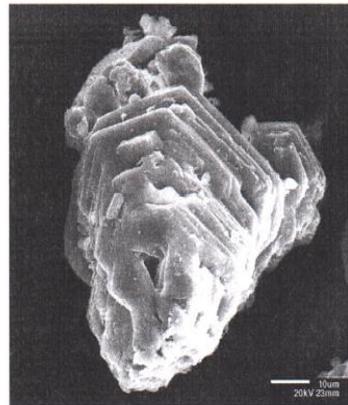
МАКРО

Размеры заряда ВВ.
Время взрыва

ТАТБ – три-
амино-
тринитро-
бензол



1



10^5



10^{10}

Огромная разница пространственно-временных масштабов этих трех уровней влечет за собой необходимость декомпозиции проблемы, когда каждый уровень исследуется по отдельности, и полученные результаты используются при построении моделей более высокого уровня.

Макроуровень – макрокинетика химических реакций и уравнение состояния



$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \cdot \nabla \mathbf{u} = 0$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P$$

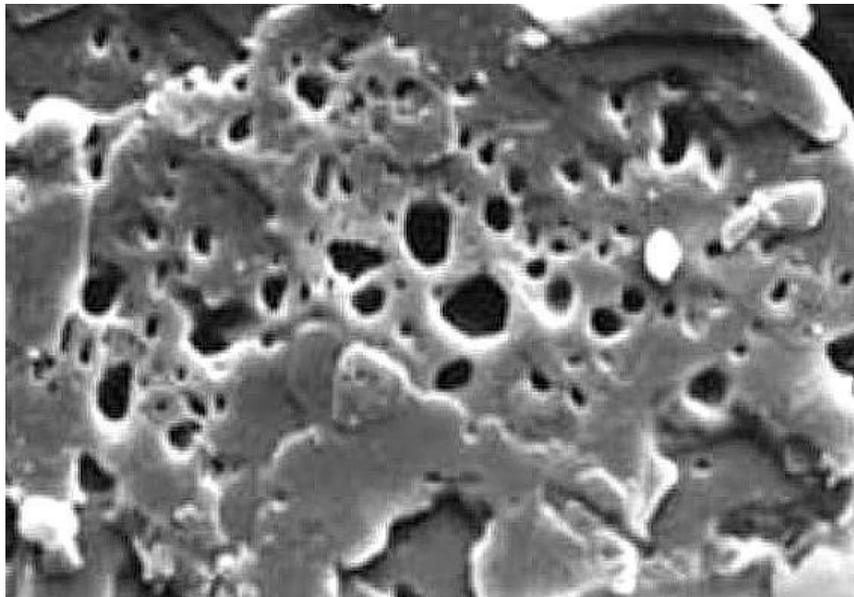
$$\frac{d\varepsilon}{dt} + P \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = Q$$

- Q – энергосодержание в химических реакциях. Обычно принимают, что $Q = -q_0 \cdot d\xi/dt$, где q_0 – калорийность ВВ, ξ – концентрация ВВ.
- $P(\rho, \varepsilon)$ – уравнение состояния реагирующей среды.
- Информация с микро и мезо уровней поступает на макроуровень только через $\xi(t)$ и $P(\rho, \varepsilon)$.

Мезоуровень – концепция «горячих точек»



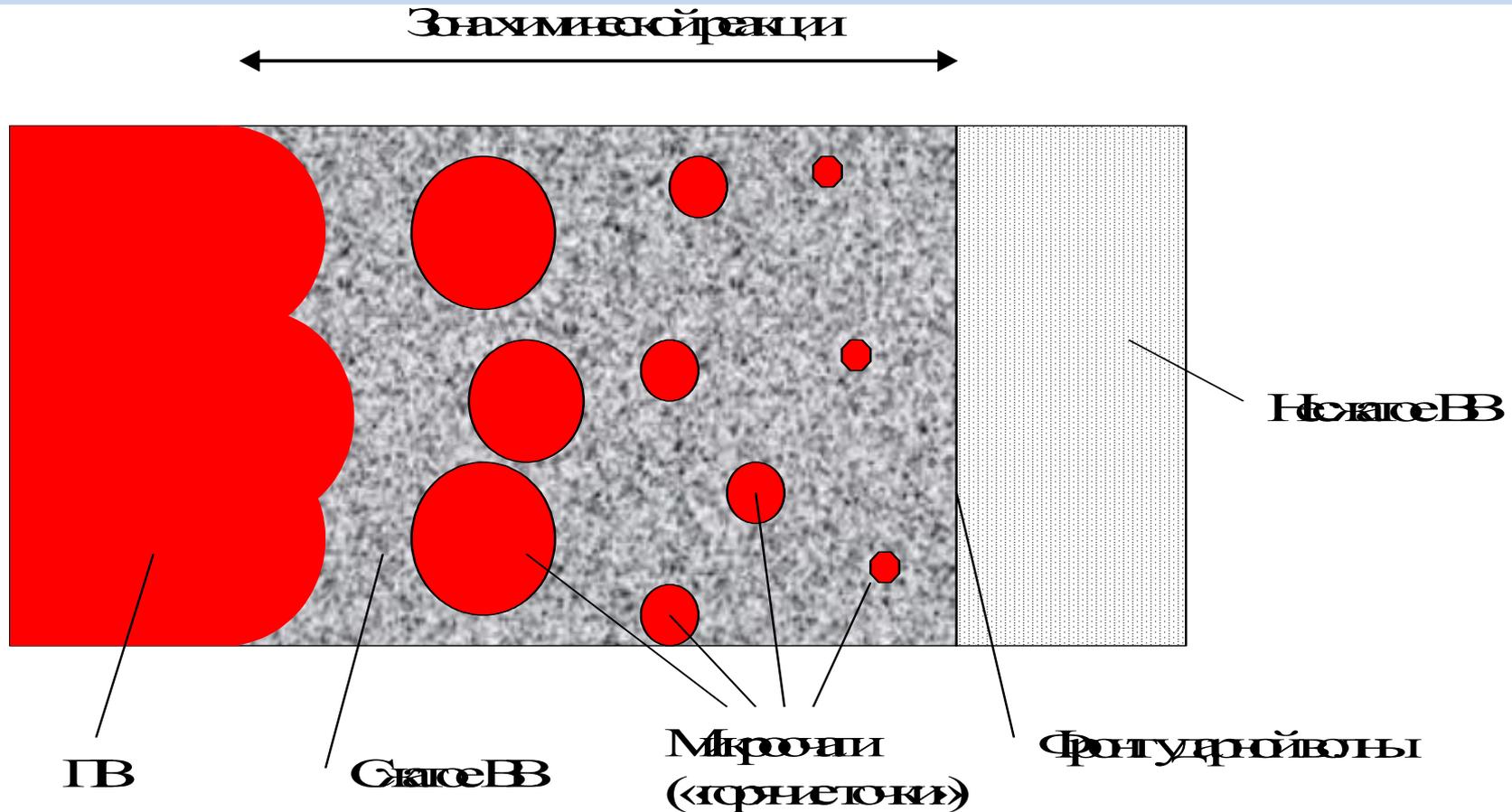
Концепция – в гетерогенных ВВ реакция начинается в микроочагах – «горячих точках» (ГТ), и волны горения распространяются в основной объем ВВ.



Обоснование

- Структура образцов ВВ, сохраненных после действия УВ.
- Расчеты схлопывания пор в ВВ после прохождения УВ.
- Критическое давление инициирования детонации гексогена:
 - ✓ > 30 ГПа для монокристалла,
 - ✓ 3 ГПа – для прессованных мелкокристаллических образцов.

Распространение горения из микроочагов при ударноволновом инициировании детонации



Время реакции $\Delta\tau \approx \delta/D$,

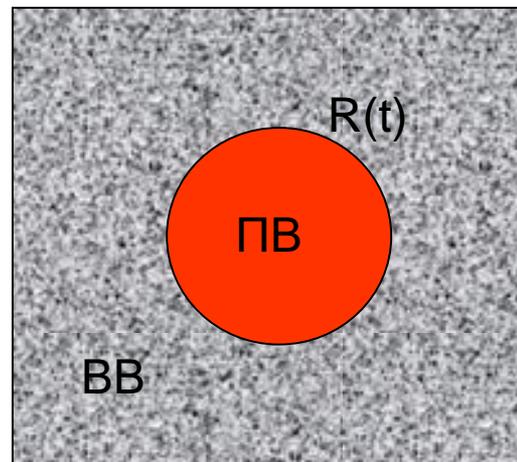
где δ – половина среднего расстояния между соседними горячими точками, D – скорость распространения волны горения.

Интерфейс между тремя масштабами - три фактора, определяющие макрокинетику

$$\frac{d\xi}{dt} = F \cdot N^{\nu} \cdot L \sim \frac{1}{\Delta\tau}$$

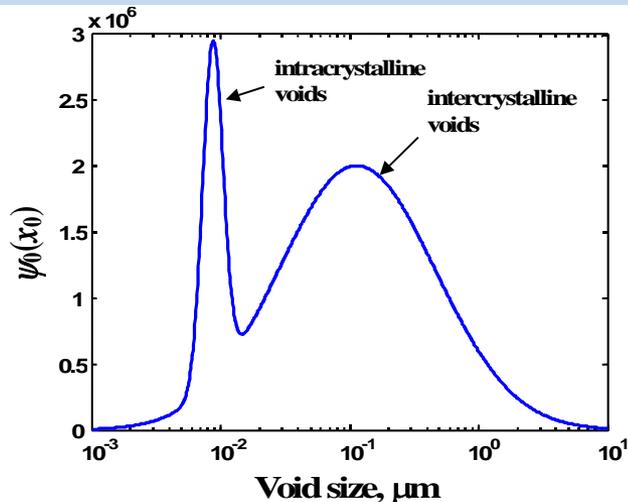
- ξ - концентрация ВВ,
- F – геометрический фактор (переход от «горения наружу» к «смыканию волн горения»),
- N – концентрация очагов реакции ($N^{-1/3}$ - среднее расстояние между ними),
- D – скорость распространения волны горения из горячих точек (основной фактор для ТАТБ).

- ❑ горячие точки, случайно распределенные по объему ВВ.
- ❑ выгорание = отношение массы ПВ к полной массе (ВВ + ПВ).

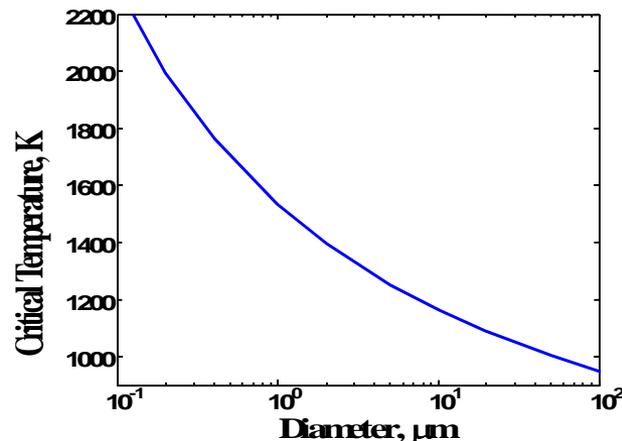


Подход - рассчитать эти три фактора, имеющие ясный физический смысл, исходя из микро и мезоструктуры ВВ, т.е. из первых принципов.

Плотность горячих точек можно вычислить на основе исходного распределения пор по размерам)



Спектр начальных размеров пор в ВС LX-17 (T.M. Wiley, T. Van Buuren e.a. 2006).

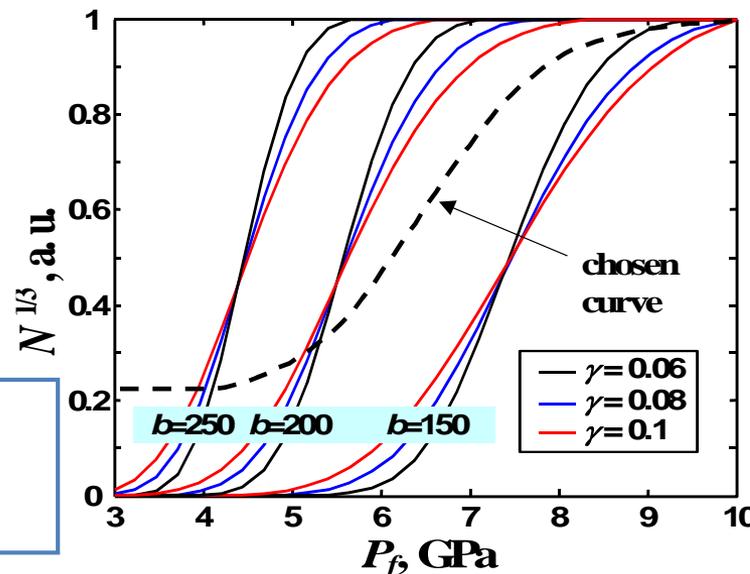


Зависимость температуры зажигания от размера микроочага (С.М. Tarver, 1996).

Размеры и температура ГТ

Число загоревшихся ГТ

Вывод: в ТАТБ при $P_f \geq 10$ ГПа происходит насыщение (быстрое зажигание всех ГТ), и кинетику разложения определяет только скорость роста ГТ.

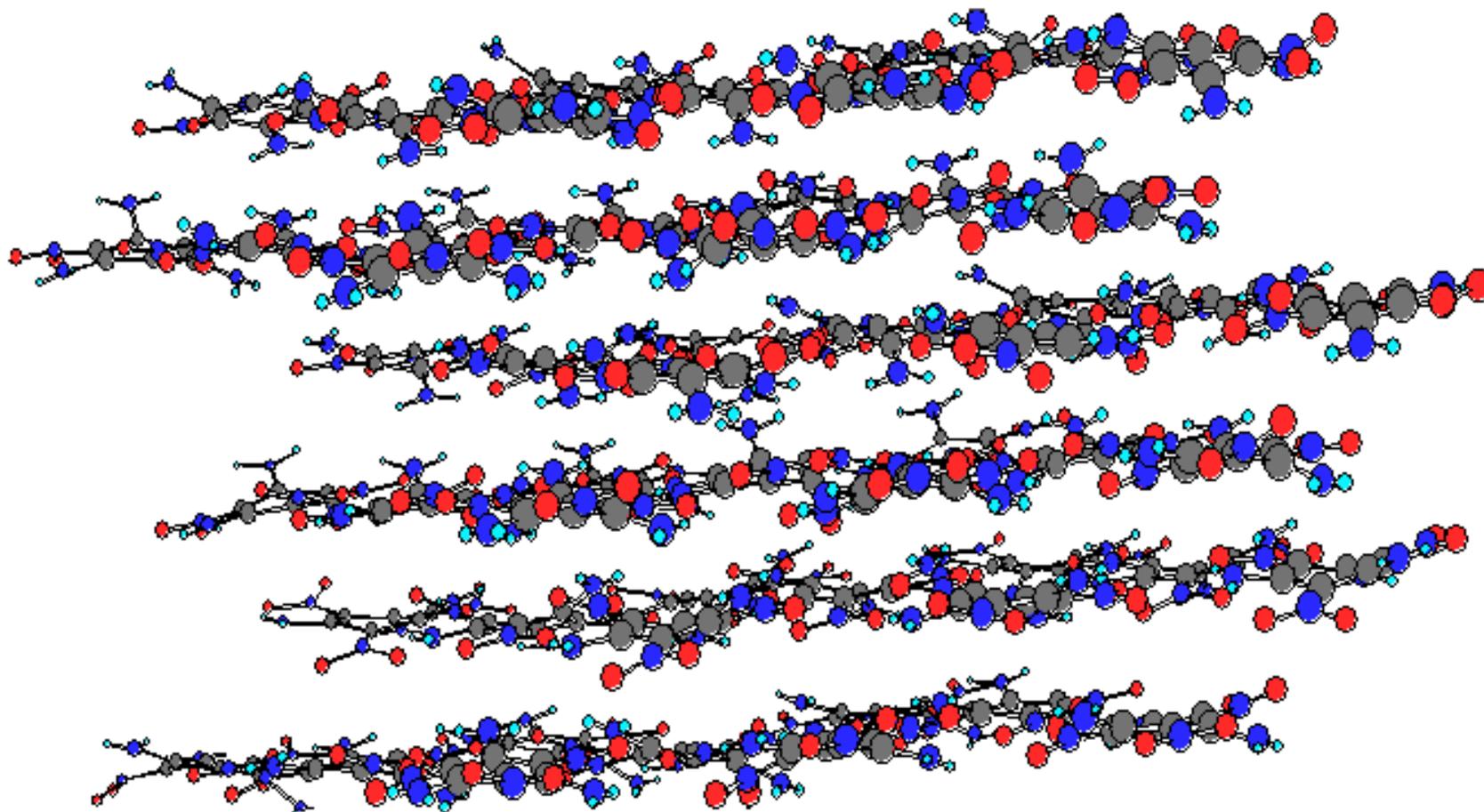


Микроуровень – кинетика химических реакция в микроочагах



- Обычно в расчетах скорости волн горения используется модель кинетики горения, полученная из опытов по зажиганию ВВ при сравнительно низких температурах и больших временах зажигания (≥ 1 сек), неприменимая при высоких температурах и малых временах реакции.
- Впервые оценки времени реакции в микроочагах (не путать с макрокинетическим временем) были получены нами в МД-расчетах в 2001г. (ЖТФ, 2001г.):
 - ✓ для ТАТБ ~ 30 пс,
 - ✓ для октогена ~ 1 пс,
- Эти оценки впоследствии были подтверждены в независимых расчетах других авторов и для октогена (Мапаа е.а., 2002г.) и для ТАТБ (Мапаа е.а., 2010г.).
- Расчеты скорости волн горения проводились с моделью кинетики реакций, представляющую собой экстраполяцию между традиционной «низкотемпературной» кинетикой и результатами МД-расчетов.

Фрагмент кристалла ТАТБ в расчете МД. (3×3×3) элементарные ячейки



- Расчетная скорость волны горения на 2 порядка меньше, чем дают оценки по результатам детонационных экспериментов (*В.Г. Морозов и др., Хим. Физика, 1995*).
- Предложение В.Г. Морозова – турбулентный механизм передачи энергии в волне горения (более интенсивный, чем теплопроводность).
- Альтернативное предложение (*К.Ф. Гребенкин, Письма в ЖТФ, 1998*) - передача энергии в волне горения происходит путем электронной теплопроводности.

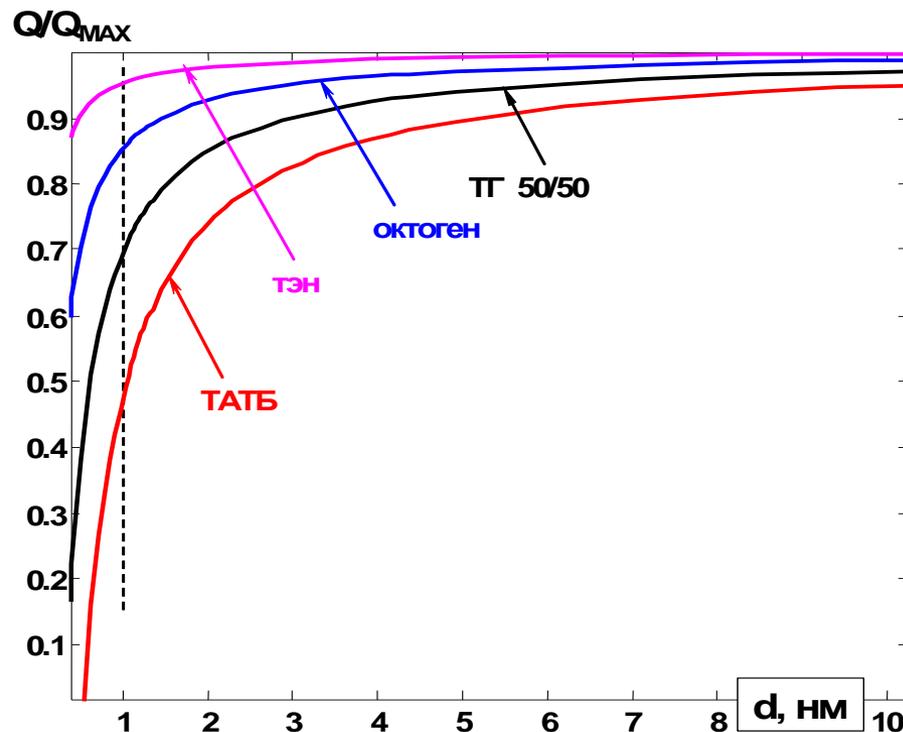
- **Гипотеза** - сжатый и нагретый ударной волной ТАТБ становится полупроводником, т.е. в зоне проводимости создается достаточно высокая концентрация электронов (достаточная для реализации требуемых значений скорости волны горения).
- **Как это проверить ?**
 1. Измерение электропроводности ВВ после прохождения УВ, т.к. электропроводность является индикатором электронной теплопроводности. Обе «-проводности» пропорциональны концентрации электронов в зоне проводимости (закон Видемана-Франца).
 2. Компьютерное моделирование электронной (зонной) структуры молекулярных кристаллов ВВ.

- Гипотеза подтвердилась – да превращает !
 - ✓ Измерения электропроводности ударно сжатого TATB показали, что она примерно такая же, как у германия (при ну).
 - ✓ Расчеты и измерения ширины запрещенной зоны дают при н.у.
 $E_g = 2 - 3$ эв, и она уменьшается при повышении давления.
- Вопрос о ведущем механизме теплопроводности при горении микроочагов (фононная или электронная теплопроводность, или обе) остается открытым, необходимы дальнейшие исследования.
- «Отягчающее обстоятельство» фононного механизма теплопроводности – это сравнительно медленный процесс и его эффективность при пикосекундных временах реакции в волне горения может существенно снижаться.

Особенность детонации ВВ с отрицательным кислородным балансом



- При детонации ВВ с отрицательным кислородным балансом идет экзотермический процесс - рост УДА.
- Калорийность ВВ зависит от степени завершенности этого процесса, т.е. от среднего размера УДА (см. рис.).
- ПВ ТАТБ содержат аномально высокое количество углерода, и его калорийность определяется вкладом от конденсации УДА (из 1 кг ТАТБ гипотетически может образоваться алмаз массой 200г.).



Расчетная калорийность некоторых ВВ в зависимости от среднего размера УДА в ПВ

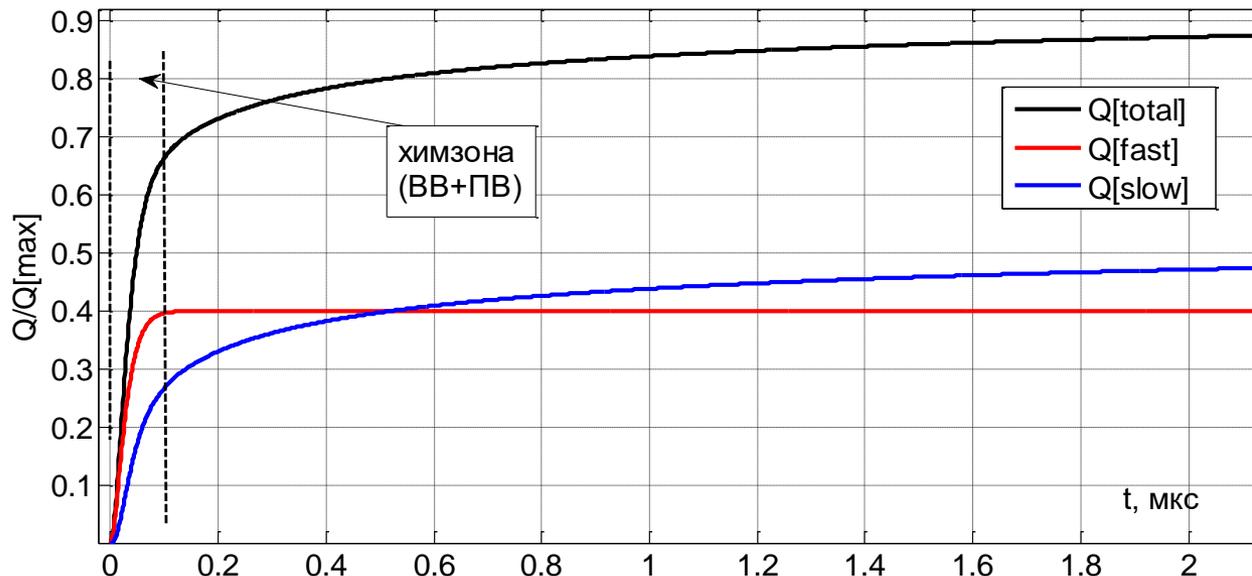
В ПВ за пределами зоны химической реакции происходит медленное длительное выделение энергии, и модель детонации должна это учитывать

Объединенная модель детонации



Энерговыведение в детонирующем ВВ с отрицательным кислородным балансом разделяется на две компоненты:

1. Быстрая - разрушение исходных молекул ВВ, формирование устойчивых двух-, трехатомных молекул ПВ и небольших углеродных кластеров (10-100 атомов с размером меньшим или порядка 1 нм). Характерное время этого процесса ~ 10 нс в стационарных режимах детонации.
2. Медленная - остаточное энерговыведение в ПВ, происходящее за счет процесса роста углеродных кластеров. Характерное время ~ 1 мкс.



$$E(t) = E_f(t) + E_s(t)$$



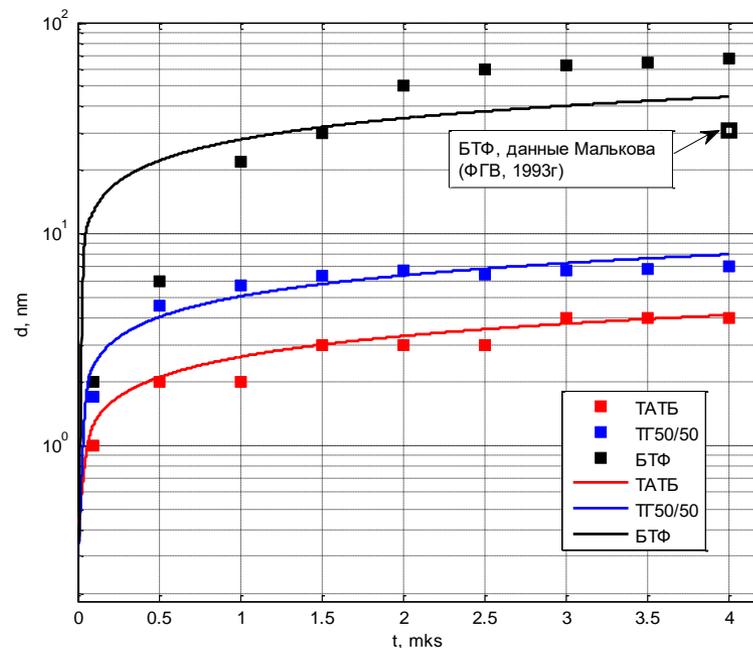
Выбор значений констант медленной кинетики



q_0 – полная калорийность ВВ, α – ее доля, соответствующая фазе превращения ВВ в ПВ.

1. Степенная зависимость от времени с $n \approx 3$ соответствует теоретической модели (Show, Johnson, 1987)
2. Будем полагать, что образование УДА размером ~ 1 нм (~ 100 атомов) является частью быстрой фазы кинетики ВВ \rightarrow ПВ (образуются за те же характерные времена, что и конечные газовые компоненты), тогда по расчетной зависимости $Q(d_{\text{УДА}})$ можно оценить долю энерговыделения в быстрой фазе α .
3. Параметр τ_s можно оценить с опорой на опыты по изучению динамики роста наночастиц конденсированного углерода с помощью синхротронного излучения.

$$f(t) = \begin{cases} 1, & \text{при } t < t_f, \\ \frac{1}{\left(1 + \frac{t-t_f}{\tau_s}\right)^n}, & \text{при } t \geq t_f \end{cases}$$



Сравнение расчетной зависимости $d(t)$ (Жеребцов и др, 2015) с экспериментальной (Титов и др., 2011)

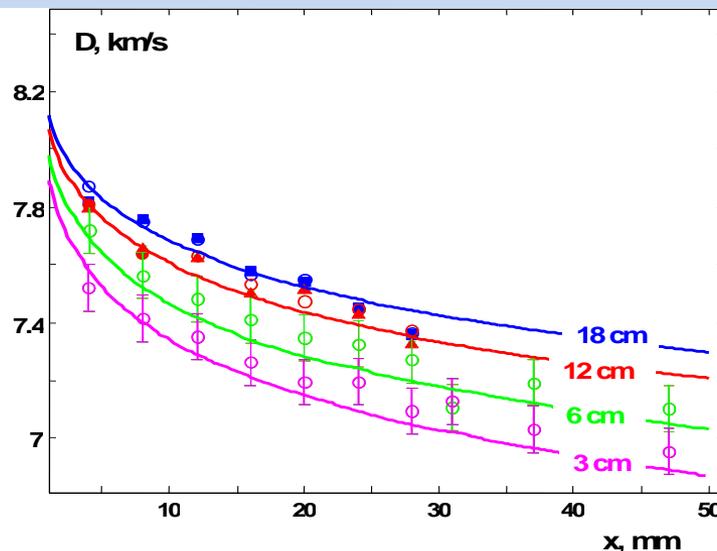
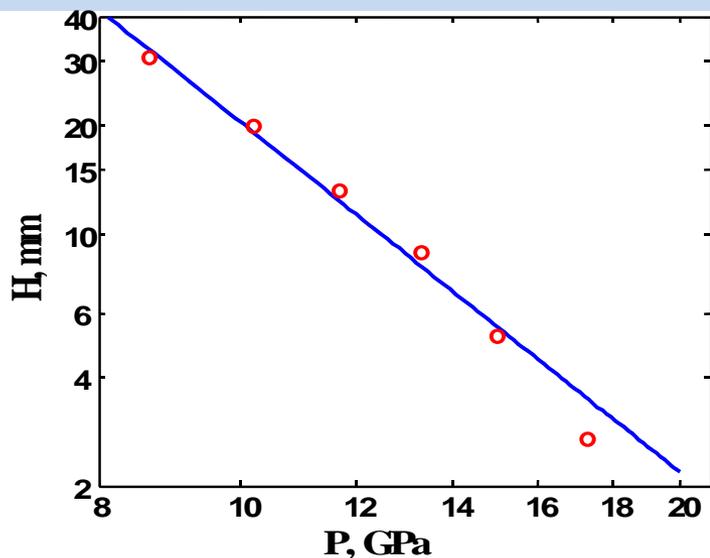


Программа тестирования модели по экспериментам



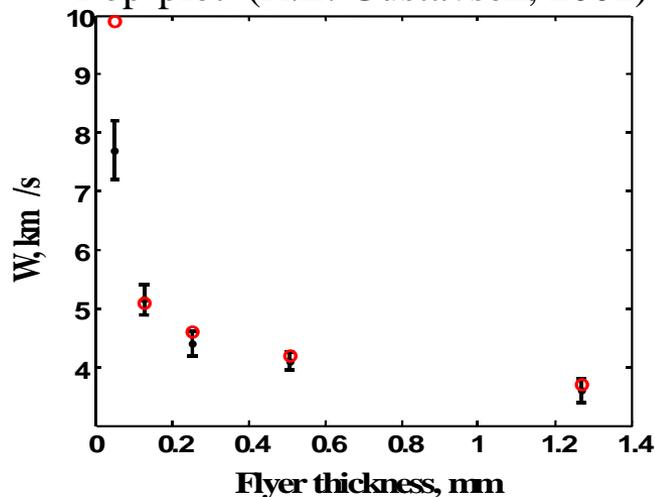
1. Поп-плот;
2. Инициирование коротким импульсом;
3. Инициирование ударом высокоскоростного осколка;
4. Инициирование от инициаторов разной геометрии и состава;
5. Диаметр-эффект и кривизна фронта ДВ;
6. Распространение ДВ по криволинейному каналу, например, кольцевому;
7. Измерения $P(x,t)$ в процессе нарастания детонации;
8. Затухание УВ в инертной преграде, зависимость эффективного давления детонации от длины заряда;
9. Структура фронта ДВ (движение границы ВВ с прозрачным кристаллом);
10. Двухволновое нагружение;
11. Опыты, в которых проявляются «темные зоны».
12. Интегральные эксперименты с макетами изделий.

Сравнение с экспериментами

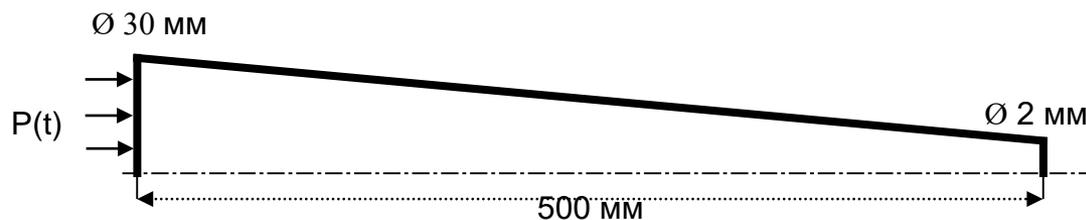


Затухание УВ в преграде (Лобойко и др., 2005)

Pop-plot (R.L. Gustavsen, 2001)



Инициирование тонкой пленкой (Honodel e.a., 1981)

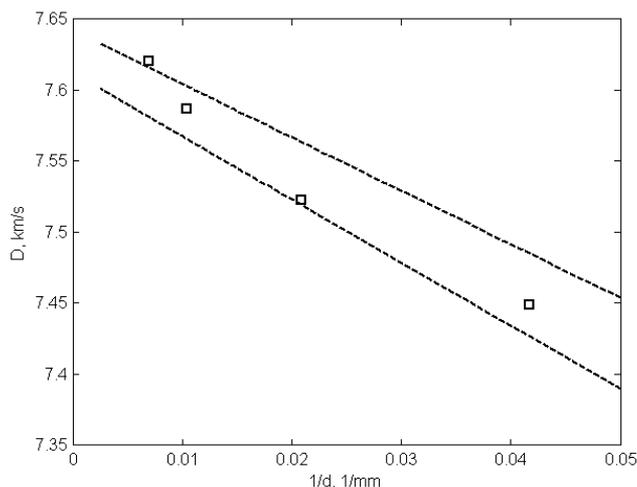


Критический диаметр

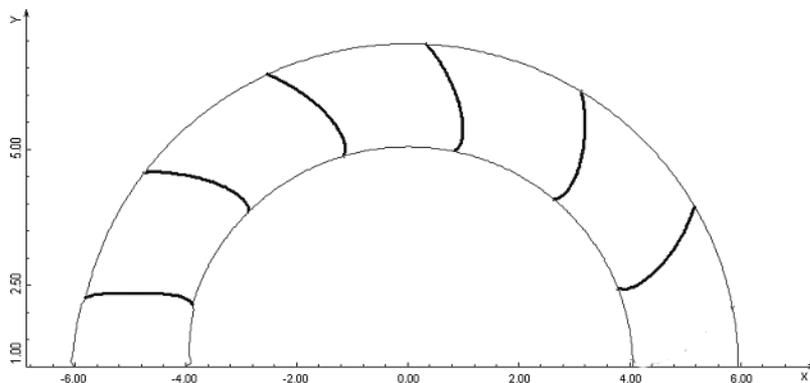
Расчет $L = 31.5$ см и $\text{Ø} \sim 12$ мм,

Эксперимент (Dobratz, 1995) $\text{Ø} \sim 12$ мм.

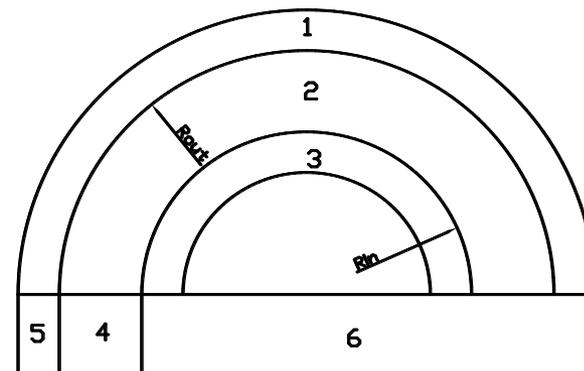
Сравнение с экспериментами - 2



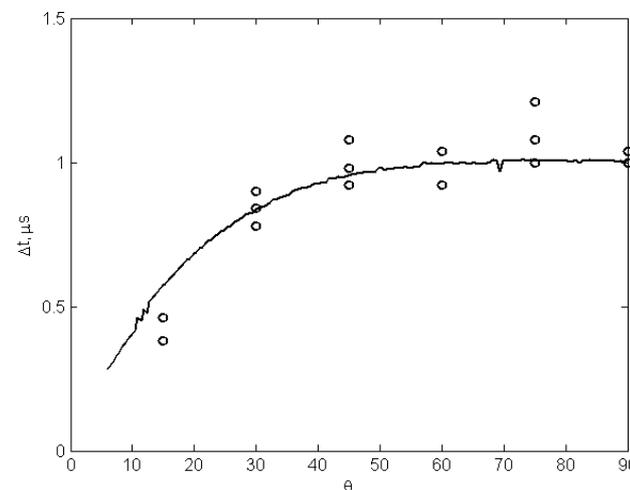
1. Диаметр-эффект. Квадрат – расчет по модели СНД, линии – пределы изменения экспериментальных данных (Campbell, 1976)



Расчетная форма фронта детонационной волны



2. Эксперимент по изучению распространения детонации ПСТ в полукольцевом зазоре 40/60 мм (Лобойко и др., 2004)



Разновременность выхода ДВ на наружную и внутреннюю поверхности ВВ в зависимости от угла поворота ДВ

Итоги проекта



- Макрокинетика мощных гетерогенных кристаллических пластифицированных ВС рассчитать из первых принципов пока что невозможно, однако уже стало «более-менее» ясно, как это сделать, в принципе.
- Продуктивным представляется полуэмпирический подход, промежуточный между эмпирическим и первопринципным, когда строится физически обоснованная, хотя и приближенная, модель. Затем, по результатам детонационных экспериментов, производится тонкая корректировка и верификация этой модели.
- Модель позволяет не только описать в расчетах большую совокупность детонационных экспериментов, но объясняет на качественном уровне причину аномально низкой чувствительности ТАТБ.
- По физике детонации был получен также ряд других результатов (низкоскоростная детонация, недосжатая детонация флегматизированных ВС, кооперативные эффекты в продуктах взрыва, смесевые ВС, образование «темных зон» и др.).
- Работы продолжаются ...

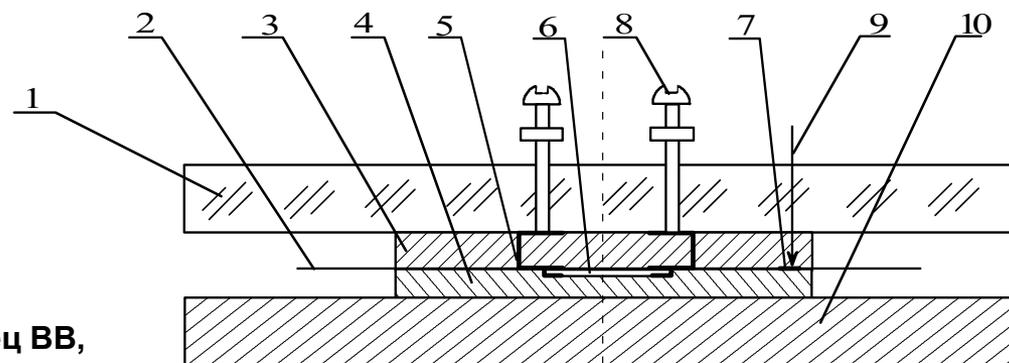
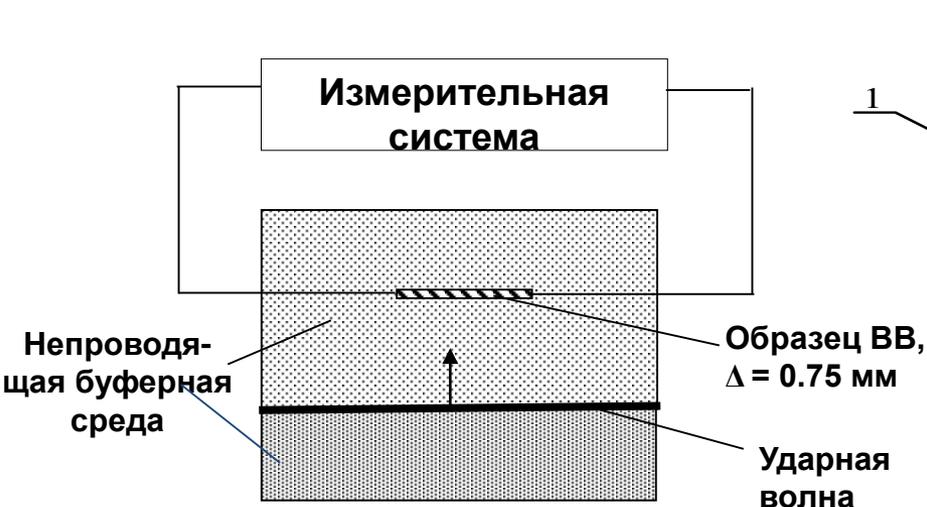
Заключение



- В докладе представлены результаты работ по трем открытым проектам РФЯЦ-ВНИИТФ. Это лишь «верхушка надводной части айсберга».
- «Подводная часть айсберга» - это создание технологии «виртуальных испытаний» изделий специальной техники:
 - ✓ Разработка детализированных моделей отдельных физпроцессов с опорой на результаты разрешенных экспериментов (детонация, динамическая прочность, ТЯ горение, физика плазмы, ядерная физика, перенос различных излучений и т.д.);
 - ✓ Интеграция всех процессов в рамках единой модели и ее реализация в программных комплексах для суперЭВМ;
 - ✓ Верификация модели по результатам представительной совокупности экспериментов. В перспективе – расчетное описание результатов всех полигонных экспериментов.

Спасибо за внимание !

Постановка измерений электропроводности ударно сжатого ТАТБ

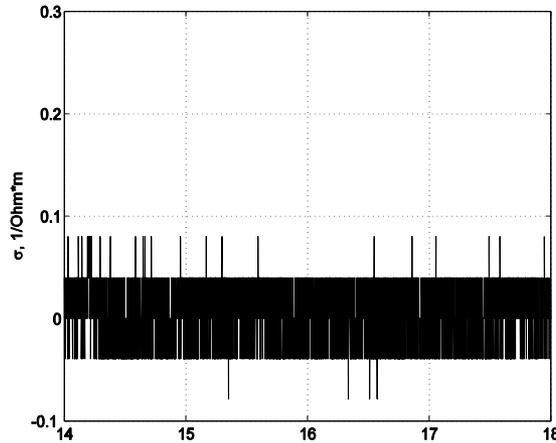


1 - ОС, 2 - Al, $D=0,01$ мм, 3, 4 – буферная среда, 5 - Al, $D=0,05$ мм, 6 – образец ВВ $25 \times 4 \times 0,75$ мм³, 7 - Al 0,05мм, 8 – винт, 9 – датчик прихода УВЧ, 10 – Экран.

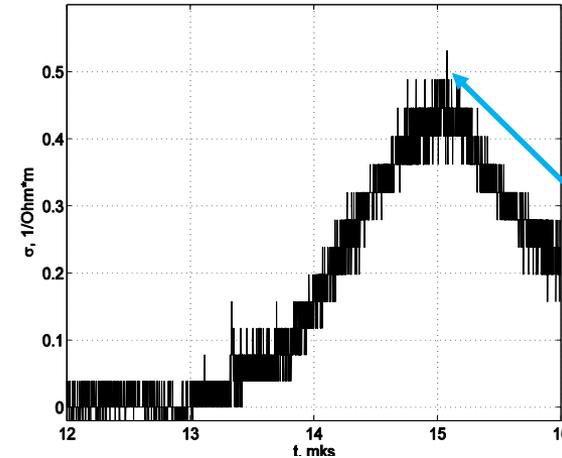
Особенности постановки эксперимента:

1. Малая толщина образца – 0.75 мм.
2. Ударные адибаты буферной среды и исследуемого ВВ близки. (гидродинамическая однородность). Объем буферной среды намного больше, чем объем образца.
3. Нагружение ступенчатым импульсом Поддерживается постоянное давление в течение 1 – 1.5 мкс (даже, если протекают реакции и выделяется энергия).

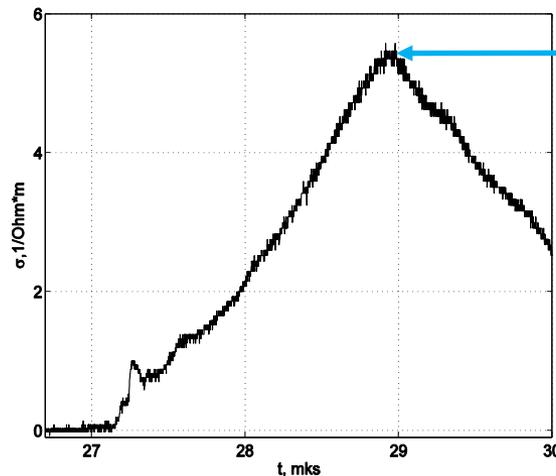
Результаты измерений электропроводности ударно сжатого ТАТБ ($\rho_0 = 1.865 \text{ г/см}^3$)



6.7 ГПа

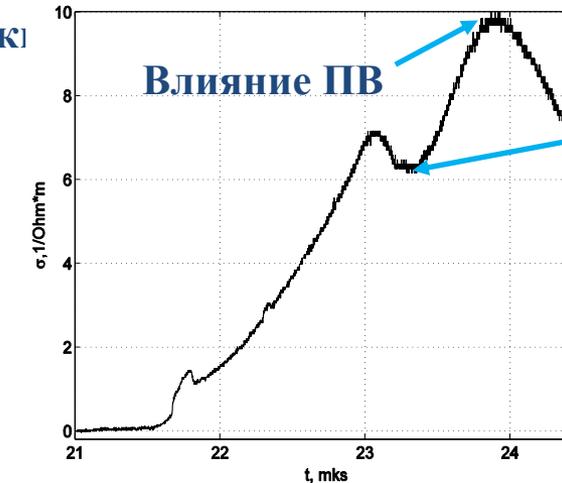


8.9 ГПа



Начало разгрузки
образца

11.5 ГПа



Начало
разгрузки
образца

15.0 ГПа

УВ с давлением на фронте $P \approx 10-15$ ГПа, действительно, превращает ТАТБ в полупроводник с удельной электропроводностью $\sim 5 \text{ (Ом}\cdot\text{м)}^{-1}$, что близко к электропроводности такого полупроводника, как германий (при НУ).

Расчеты ширины запрещенной зоны кристалла ТАТБ

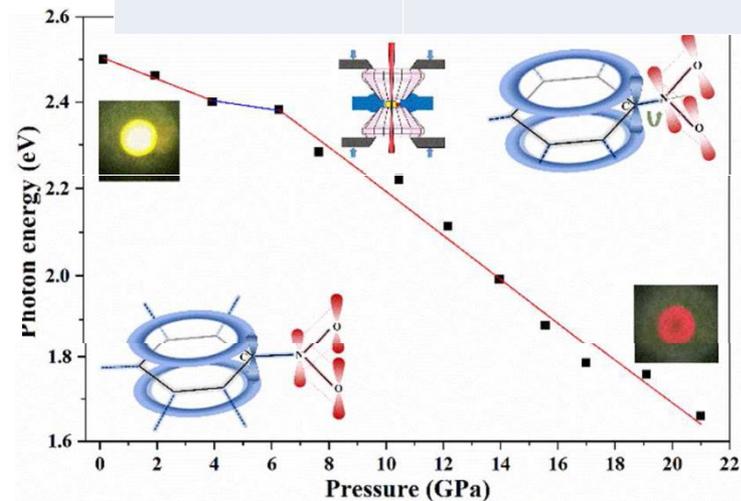


Авторы	Дата	E_g , эВ	Комментарий
Kunz	PhR, 1996	≈ 11 (ну)	Расчет по методу HF
Гребенкин	ПЖТФ, 1998	≈ 2 (10 - 20ГПа)	Оценка по результатам детонационных экспериментов
Kakar e.a.	PhR, 2000	6.6 (ну)	Эксперимент. Косвенный метод с использованием расчетных данных
Гребенкин, Кутепов	ФТП, 2000	2 - 4 (ну) 1.5-2.0 (10-20ГПа)	Оценка: Расчет DFT с поправкой на систематическую недооценку E_g . Вывод – не 11 и не 7, а \ll .
Wu	PhRB, 2003	2.4 (ну) 1.5 (15 ГПа)	Расчет DFT
Manaа	APL, 2003	2.5 (ну)	Расчет DFT
Гребенкин и др.	ЗНЧ, 2003	1.5 – 2.0 (10 - 15 ГПа)	Оценка по результатам измерения электропроводности за ФУВ
Liu e.a.	PLA, 2006	2.6 (ну)	Расчет DFT
Weihua Zhu	JMS, 2009	2.4 (ну)	Расчет DFT

Расчеты ширины запрещенной зоны кристалла ТАТБ - 2



Авторы	Дата	E_g , эВ	Комментарий
Федоров, Журавлев	ChPh, 2014	2.24 (ну) 4.45 (ну)	Расчет DFT Расчет G_0V_0
Appalakondaiah e.a.	JPhCh, 2015	2.51 (ну) 4.66 (ну)	Расчет DFT Расчет G_0V_0
Yan Su e.a.	Chin. Ph. B, 2018	2.36 – 2.60 (ну) 1.77-1.97 (20ГПа)	Расчет DFT (разные варианты)
Han Qin e.a.	Ph. B CM, 2019	2.37 (ну) 1.86 (15 ГПа)	Расчет DFT



Согласно измерениям спектра поглощения (2018г.) при $P \approx 10 - 15$ ГПа у ТАТБ $E_g \approx 2.0$ эВ.

Граница спектра поглощения ТАТБ
Xiaoyu Sun e.a. J. Ph. Chem., 2018