



РОСАТОМ



ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

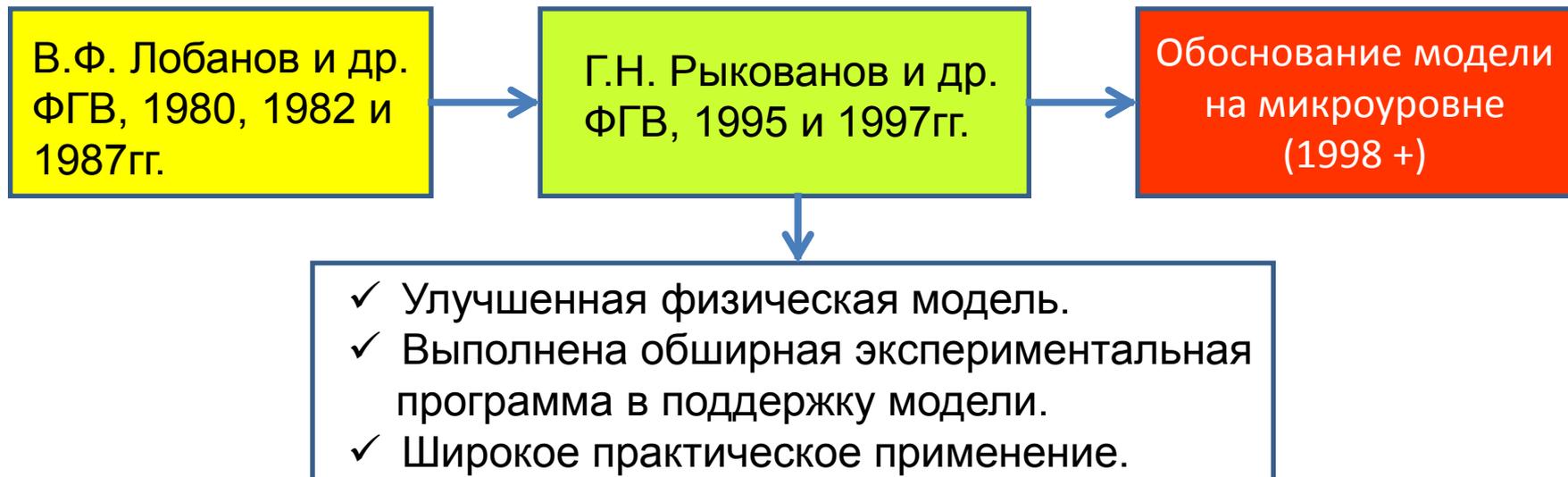
Физические модели детонации гетерогенных кристаллических ВВ

Гребёнкин К.Ф.
РФЯЦ-ВНИИТФ

Введение



- Существует множество моделей детонации, которые, по замечанию Р.Шере, «находятся в состоянии холодной войны друг с другом», т.е. развиваются независимо.
- Практически все современные модели детонации пластифицированных кристаллических ВВ основаны на концепции «горячих точек», различаясь лишь ее трактовкой.
- В докладе представлен обзор работ, которые выполнялись с 1998г. в рамках одной из моделей («Урало-сибирская модель» - УСМ).



Чаша Грааля теории детонации - фундаментальный вопрос о связи молекулярной структуры и детонационных свойств ВВ



- Несмотря на многолетнюю историю изучения и практического применения детонации конденсированных ВВ, до сих пор о микрофизике детонационных процессов мало что известно («Mystery of Detonation» - Simpson e.a., LLNL).
- 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.
- По мнению Б.Г. Лобойко (высказанному в начале 90-х годов прошлого века): «Если удастся хоть что-то понять о связи микроструктуры ВВ и его детонационных характеристик, то это будет большим достижением».

Б.Г. Лобойко



1937 - 2018

Борис Григорьевич Лобойко

Видный учёный, физик-экспериментатор. Основные направления работ:

- создание взрывчатых материалов,
- исследования в области физики, техники, технологии и безопасности взрывчатых веществ.

Доктор технических наук, профессор, Заслуженный деятель науки РФ, лауреат Государственных премий СССР и РФ.

Постоянный участник ЗНЧ, основатель и первый руководитель секции 2 «Взрывные и детонационные явления».

Из личных впечатлений – удивительная способность ставить фундаментальные задачи в форме «простых» вопросов:

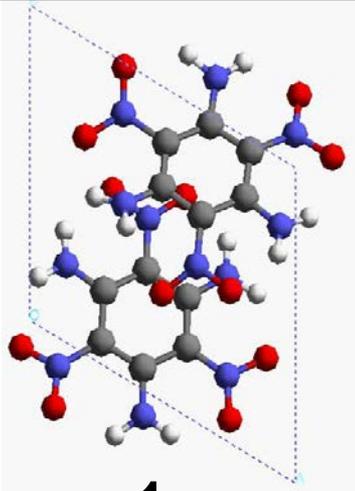
1. Почему некоторые вещества являются взрывчатыми веществами (почему ВВ взрываются) ?
2. Почему ТАТЬ обладает аномально низкой чувствительностью ?
3. Почему скорость химических реакций определяется температурой (закон Аррениуса), а эффективная (макрокинетическая) скорость реакции в кинетических моделях детонации обычно задается в виде функции давления ?
4. Как рассчитать макрокинетическую скорость реакций из первых принципов ?
5.

Ключевая идея - иерархия масштабов детонационных процессов



МИКРО

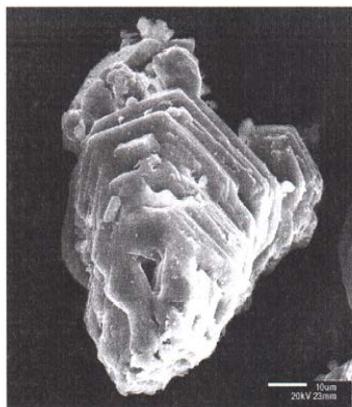
Размеры молекул
Время хим. реакции.



1

МЕЗО

Размеры
микрористаллов.
Время их горения
после действия УВ.



10^5

МАКРО

Размеры заряда ВВ.
Время взрыва



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 ₅ высокого уровня.

Макроуровень – макрокинетика химических реакций и уравнение состояния



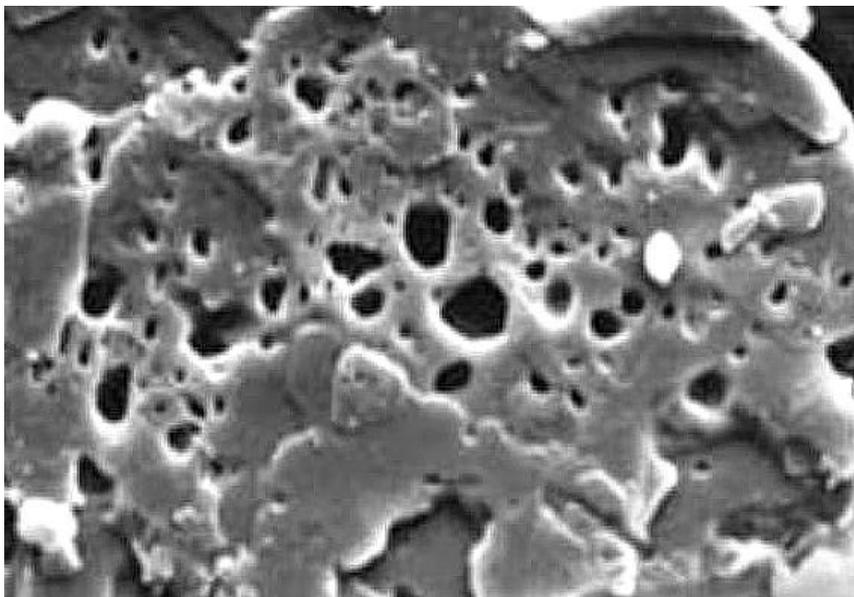
$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \cdot \nabla \vec{u} = 0$$

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

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

- 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 $P(\rho, \varepsilon)$.

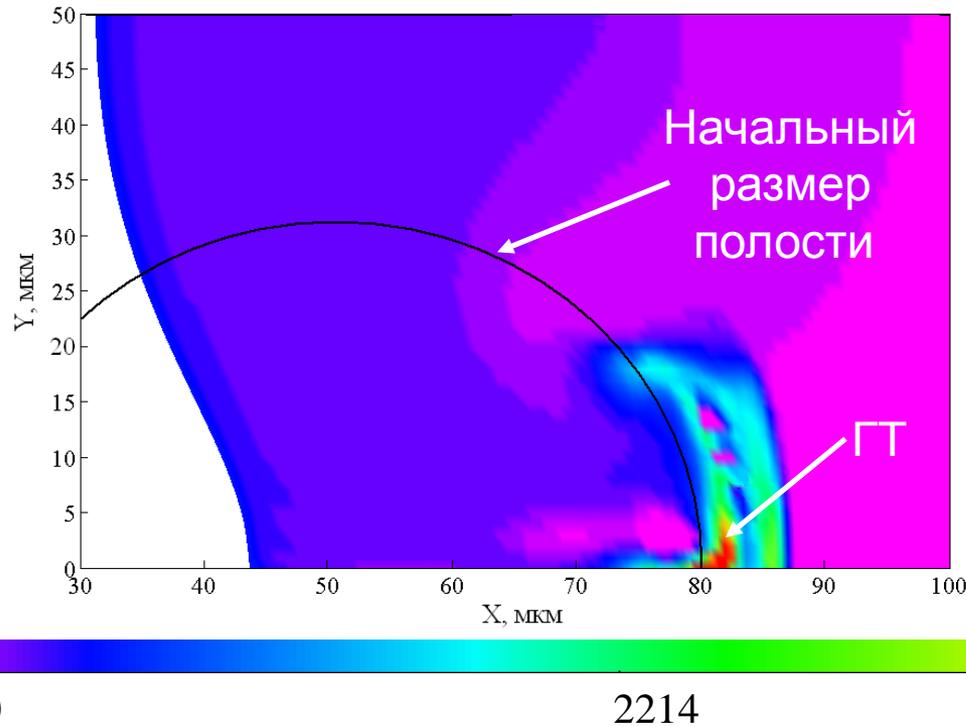
Мезоуровень – концепция «горячих точек»



Кстати – монокристаллический ТАТБ, по-видимому, не является взрывчатым веществом – стационарная детонация в нем невозможна

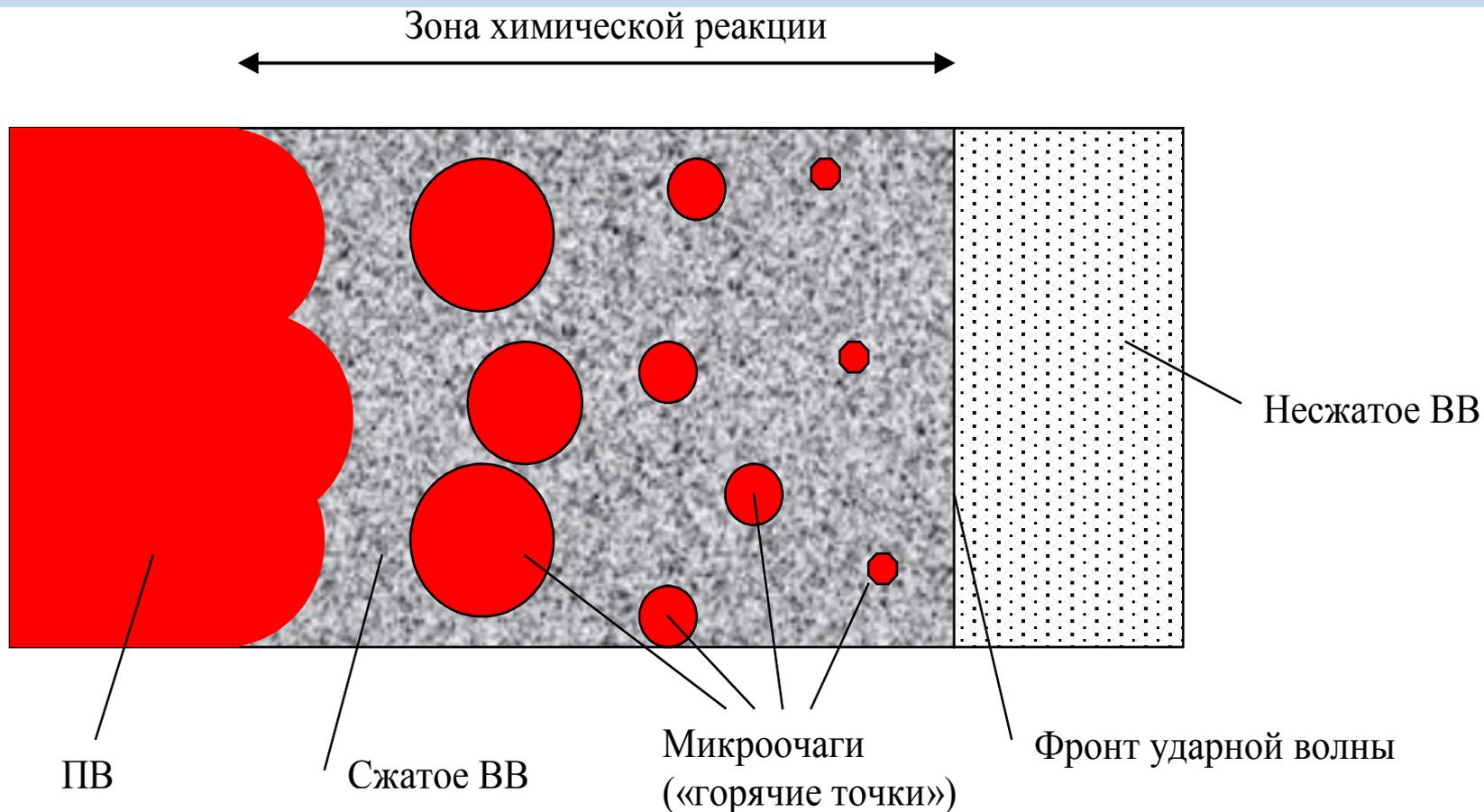
- Критическое давление инициирования детонации гексогена:
 - ✓ > 30 ГПа для монокристалла,
 - ✓ 3 ГПа – для прессованных мелкокристаллических образцов.
- Структура образцов ВВ, сохранных после действия УВ.
- Вывод – в гетерогенных ВВ реакция начинается в микроочагах – «горячих точках» (ГТ), и волны горения распространяются в основной объем ВВ.
- Это подтверждают и расчеты схлопывания пор в ВВ после прохождения УВ.

Температура ВВ после прохождения УВ через полость



- ✓ Опубликовано множество расчетов схлопывания пор под действием УВ, начиная с классической работы Ч. Мейдера.
- ✓ Общий вывод – гидродинамический механизм инициирования ГТ доминирует при высоких давлениях $P \geq 10$ ГПа. При этом:
 - ✓ Объем «горячих точек» \ll объема непрореагировавшего ВВ, сжатого УВ.
 - ✓ Время реакции в горячих точках \ll времени распространения волны горения.

Распространение горения из микроочагов при ударноволновом инициировании детонации



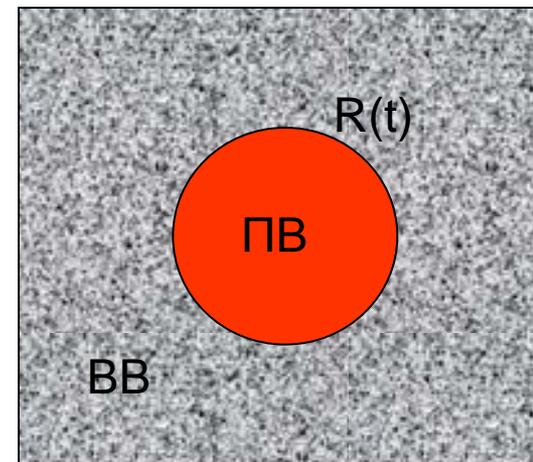
- ✓ Время реакции $\Delta\tau \approx \delta/D$, где δ – половина среднего расстояния между соседними горячими точками, D – скорость распространения волны горения.
- ✓ Геометрия горения изменяется – от независимого разгорания из микроочагов до их взаимодействия - смыкания волн горения

Три фактора УСМ, определяющие макрокинетику

$$-\frac{d\xi}{dt} = F \cdot N^{1/3} \cdot D$$

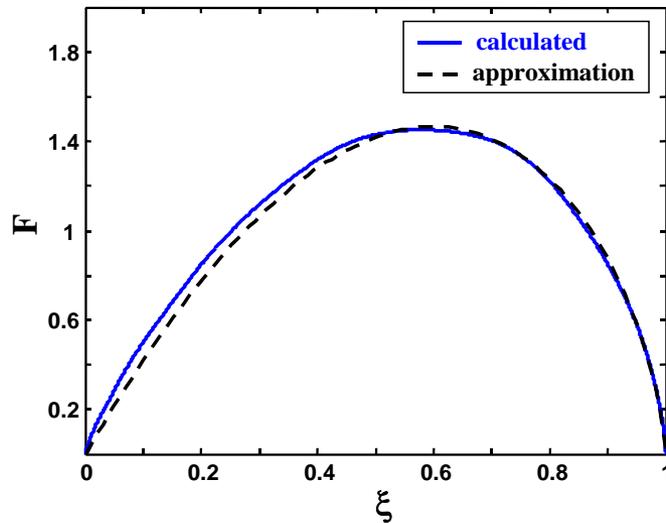
- ξ - концентрация ВВ,
- F – геометрический фактор (переход от «горения наружу» к «смыканию волн горения»),
- N – концентрация очагов реакции ($N^{-1/3}$ - среднее расстояние между ними),
- D – скорость распространения волны горения из горячих точек.

- ❑ 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.

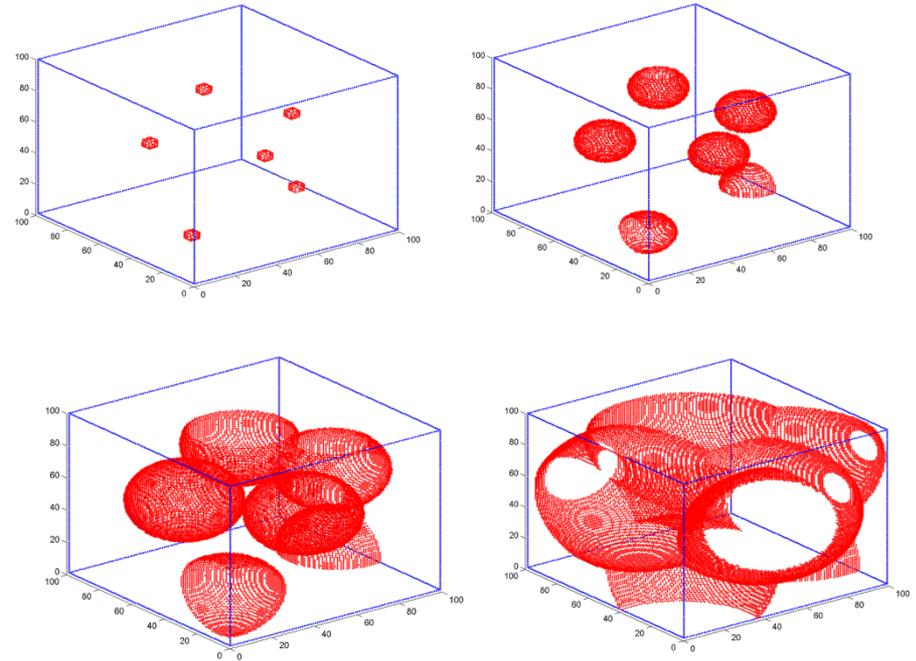
Оценка геометрического фактора



$$F(\xi) = \frac{-d\xi/dt}{N^{1/3} \cdot D}$$

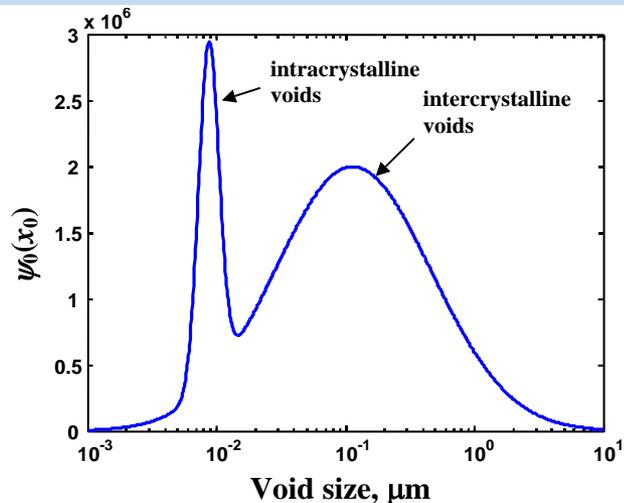
$$F(\xi) \approx K \cdot \xi^n \cdot (1 - \xi)^m$$

$$K = 4.5, n = 1, m = 2/3$$



Распространение горения из микроочагов, случайно распределенных по пространству. Модельная (чисто геометрическая) задача: $D = \text{const}$, $\rho = \text{const}$.

Плотность горячих точек можно вычислить на основе исходного распределения пор по размерам (ФГВ, 2009, № 1)



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

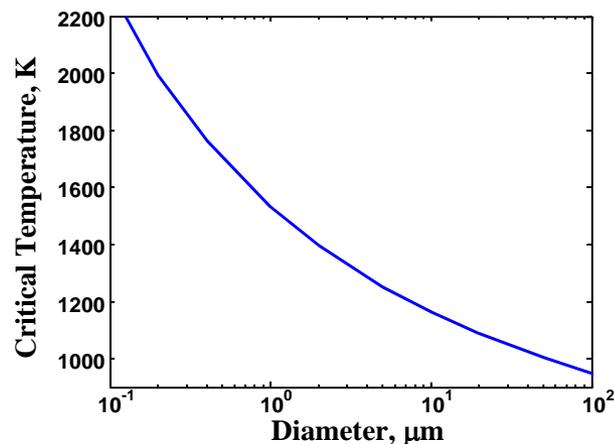
Из расчета прохождения УВ через пору можно получить размер, температуру ГТ и их плотность (зависят от P на Фронте, начального размера и начальной плотности пор).

Оценка – $T_{ГТ} \approx T_0 + b \cdot P_f$, $b = 150 - 250$.

$x \approx k \cdot x_0$, $k = 0.1$

$$N(P_f) \sim \int_{d_{cr}(T_{ГТ})}^{\infty} \psi(x) \cdot dx \quad (\text{Ю.А. Аминов, Ю.Р. Никитенко, 2002})$$

1. При $P_f \geq 10$ ГПа - насыщение и быстрое зажигание ГТ, кинетику разложения определяет только рост ГТ.
2. При $P_f \leq 5$ ГПа негидродинамический механизм.

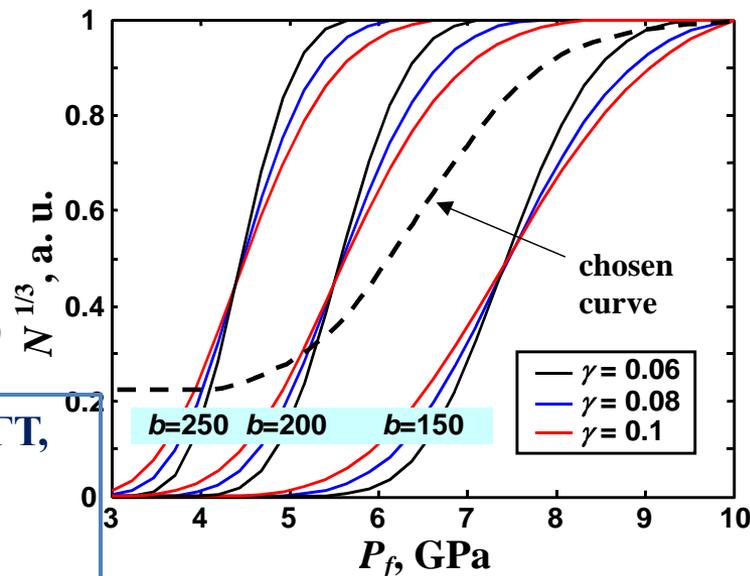


$$T_{cr} [K] = \frac{A}{d^\gamma}$$

$$A = 1400$$

$$\gamma = 0.08$$

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



Скорость распространения волны горения - определяющий фактор макрокинетики детонации ПСТ



- **Парадокс В.Г. Морозова**

- ✓ Макрокинетическое время реакции - это время смыкания волн горения, распространяющихся из соседних ГТ: $\Delta\tau \approx \delta/D$, где δ – половина среднего расстояния между соседними горячими точками. При $\delta \approx 10 - 100$ мкм (порядка размера микрокристаллов ВВ) и времени инициирования детонации $\Delta\tau \approx 0.1 \div 1$ мкс получим оценку **$D \sim 100$ м/с.**
- ✓ По расчетам К. Тарвера (11th Det. Symp., 1998г) в ТАТБ **$D \approx 0.5 - 1$ м/с.**
- **Расчетная скорость волны горения на 2 порядка меньше, чем дают оценки по результатам детонационных экспериментов !**
- Предложение В.Г. Морозова – турбулентный механизм передачи энергии в волне горения (более интенсивный, чем теплопроводность).

Альтернативное предложение (ЗНЧ, 1998г.)



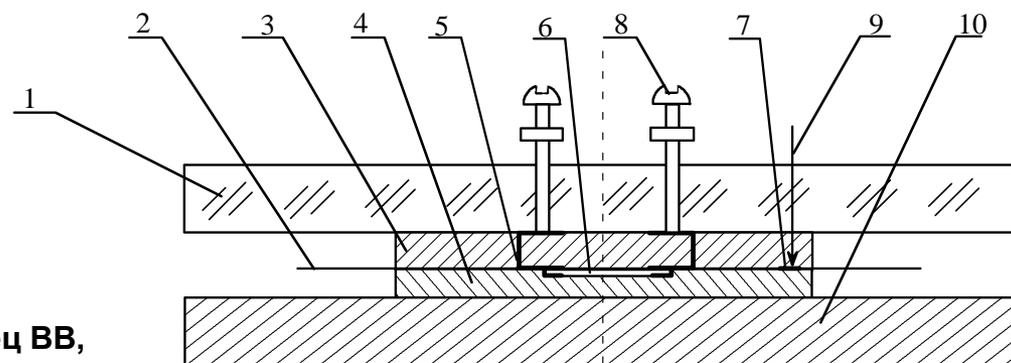
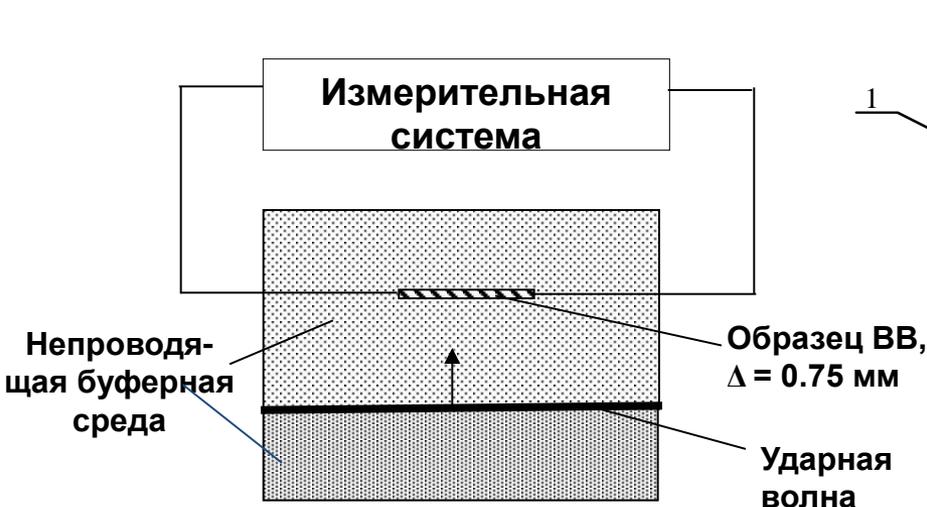
- **Гипотеза** («полупроводниковая модель детонации»):
 - ✓ передача энергии в волне горения происходит путем электронной теплопроводности.
 - ✓ сжатый и нагретый ударной волной ТАГБ становится полупроводником, т.е. в зоне проводимости создается достаточно высокая концентрация электронов.
- **Как это проверить ?**
 - ✓ Компьютерное моделирование электронной (зонной) структуры молекулярных кристаллов ВВ.
 - ✓ Индикатор электронной теплопроводности – электропроводность, обе «-проводности» пропорциональны концентрации электронов в зоне проводимости (закон Видемана-Франца).
 - ✓ Измерение электропроводности ВВ после прохождения УВ (например, было обнаружено, что «ударная волна превращает монокристаллический гексоген в полупроводник» при $P=12.5$ ГПа, G.P.Chambers e.a., SCCM, 2001).

УВ переводит гексоген в полупроводниковое состояние, возможно, такой же эффект имеет место и в ТАГБ.

Постановка измерений электропроводности ударно сжатого ТАТБ



М.М. Горшков, К.Ф. Гребенкин, В. Т. Заикин и др. . Proc. 13th Int. Det. Symp. 2006

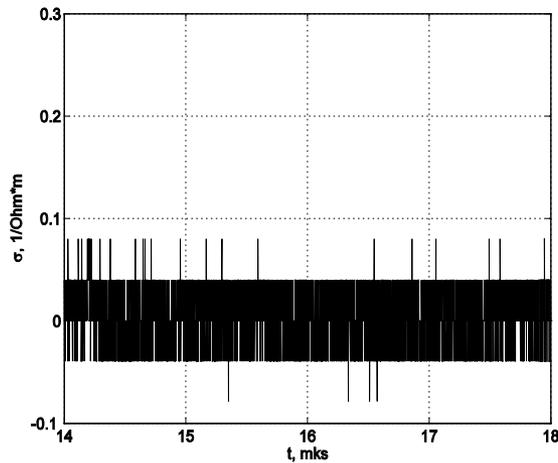


1 - ОС, 2 - Al, $D=0,01$ мм, 3, 4 – буферная среда, 5 - Al, $D=0,05$ мм, 6 – образец ВВ $25 \times 4 \times 0,75$ мм³, 7 - Al 0,05мм, 8 – винт, 9 – датчик прихода УВЧ, 10 – Экран.

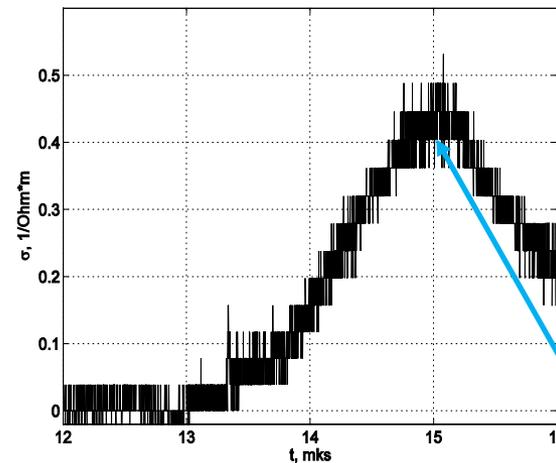
Особенности постановки эксперимента:

1. Малая толщина образца – 0.75 мм.
2. Ударные адиабаты 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).

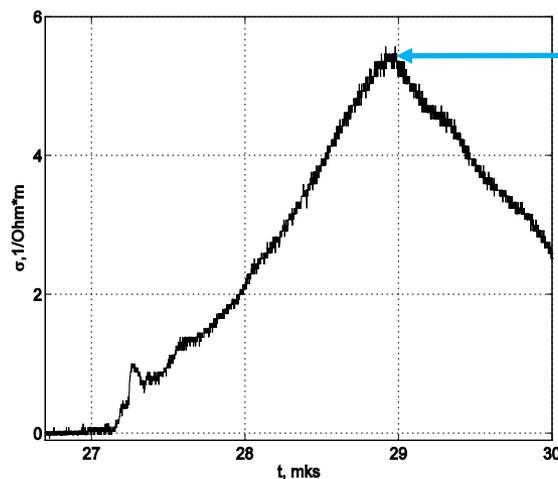
Результаты измерений электропроводности ударно сжатого ТАТБ ($\rho_0 = 1.865 \text{ г/см}^3$)



6.7 ГПа

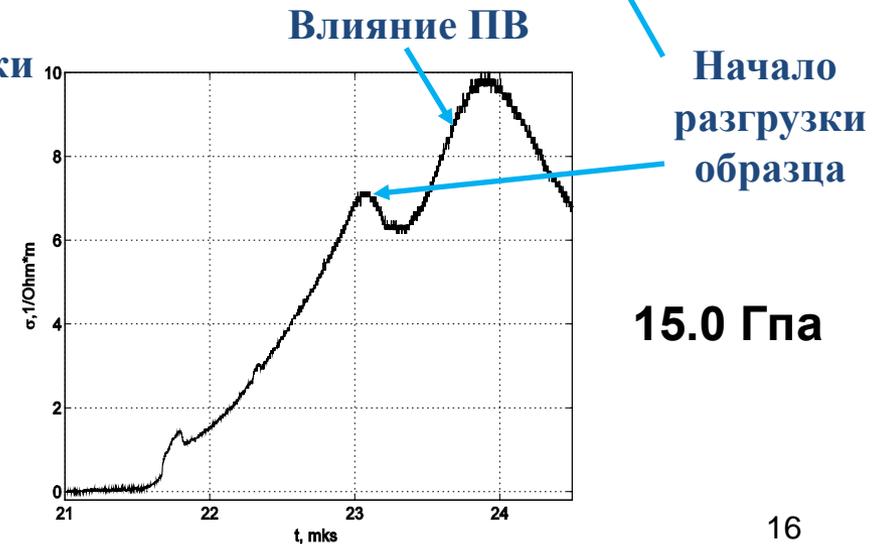


8.9 ГПа



Начало разгрузки
образца

11.5 ГПа



Начало
разгрузки
образца

15.0 ГПа

Интерпретация результатов измерений электропроводности ударно сжатого ТАТБ

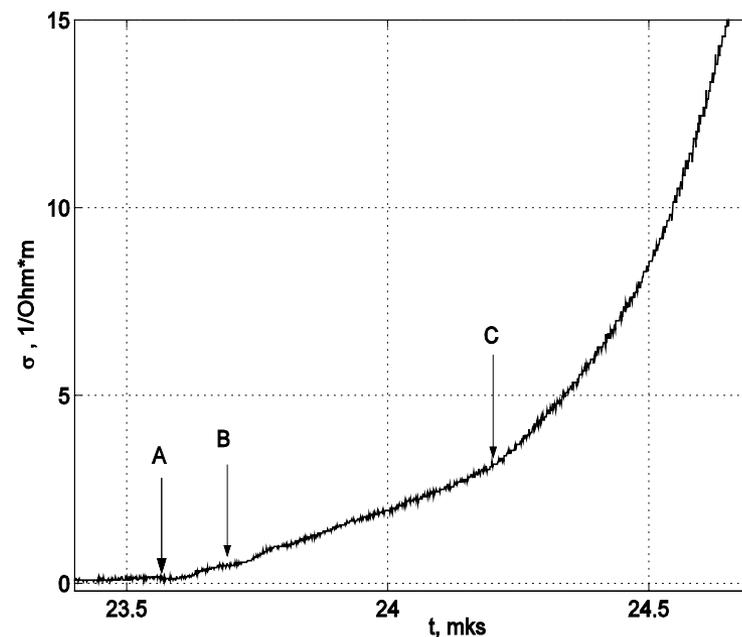


- УВ с давлением на фронте $P \approx 10$ ГПа превращает ТАТБ в полупроводник с удельной электропроводностью порядка $1/(\text{Ом} \cdot \text{м})$, что близко к электропроводности такого полупроводника, как германий (при НУ).
- Что наблюдалось в опытах - проводимость непрореагировавшего кристаллического ВВ или же проводимость продуктов взрыва, образовавшихся при частичном разложении ВВ ?
- Аргументы в поддержку того, что наблюдалась проводимость ударно сжатого непрореагировавшего кристаллического ТАТБ:
 - ✓ Начальный объем ГТ мал, и волны горения смыкаются лишь на конечной стадии процесса (начальная пористость $\sim 4\%$, размер ГТ на порядок меньше начального размера пор, поэтому начальная объемная доля ГТ $\sim 4 \cdot 10^{-3} \%$),
 - ✓ Измеренная электропроводность на 2 порядка меньше, чем у ПВ.
 - ✓ Наличие второго пика при 15 ГПа может быть результатом смены режимов, когда волны горения смыкаются и проводимость растет даже в условиях разгрузки. Аналогичный эффект наблюдался при 17.3 ГПа

Изменение скорости роста удельной электропроводности при 17.3 ГПа



А – момент входа УВ в образец,
В – момент выхода УВ из образца,
С – момент изменения скорости
роста электропроводности, когда,
предположительно, определяющий
вклад дают ПВ



- Желательно провести эксперименты с монокристаллическими образцами. Проблема - нет технологии изготовления образцов с нужной геометрией.
- Чему равна ширина запрещенной зоны молекулярного кристалла ТАТБ. По нашим оценкам (ЗНЧ и ПЖТФ, 1998г.) ожидалось ≈ 2.0 эв.

Оценки ширины запрещенной зоны кристалла ТАТБ

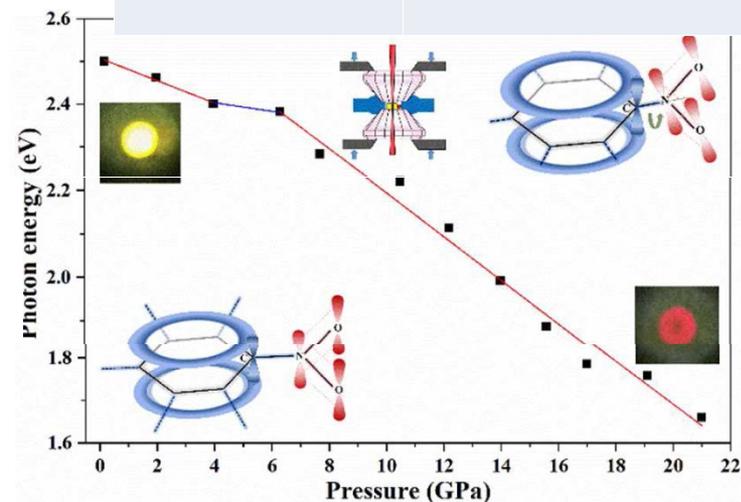


Авторы	Дата	E_g , эВ	Комментарий
Kunz	PhR, 1996	≈ 11 (ну)	Расчет по методу HF
Гребенкин	ПЖТФ, 1998	≈ 2 (10 - 20ГПа)	Оценка по результатам детонационных экспериментов
Kakar e.a.	PhR, 2000	6.6 (ну)	Эксперимент. Косвенный метод с использованием расчетных данных
Гребенкин, Кутепов	ФТП, 2000	2 - 4 (ну) 1.5-2.0 (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

Оценки ширины запрещенной зоны кристалла ТАТБ (продолжение)



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



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

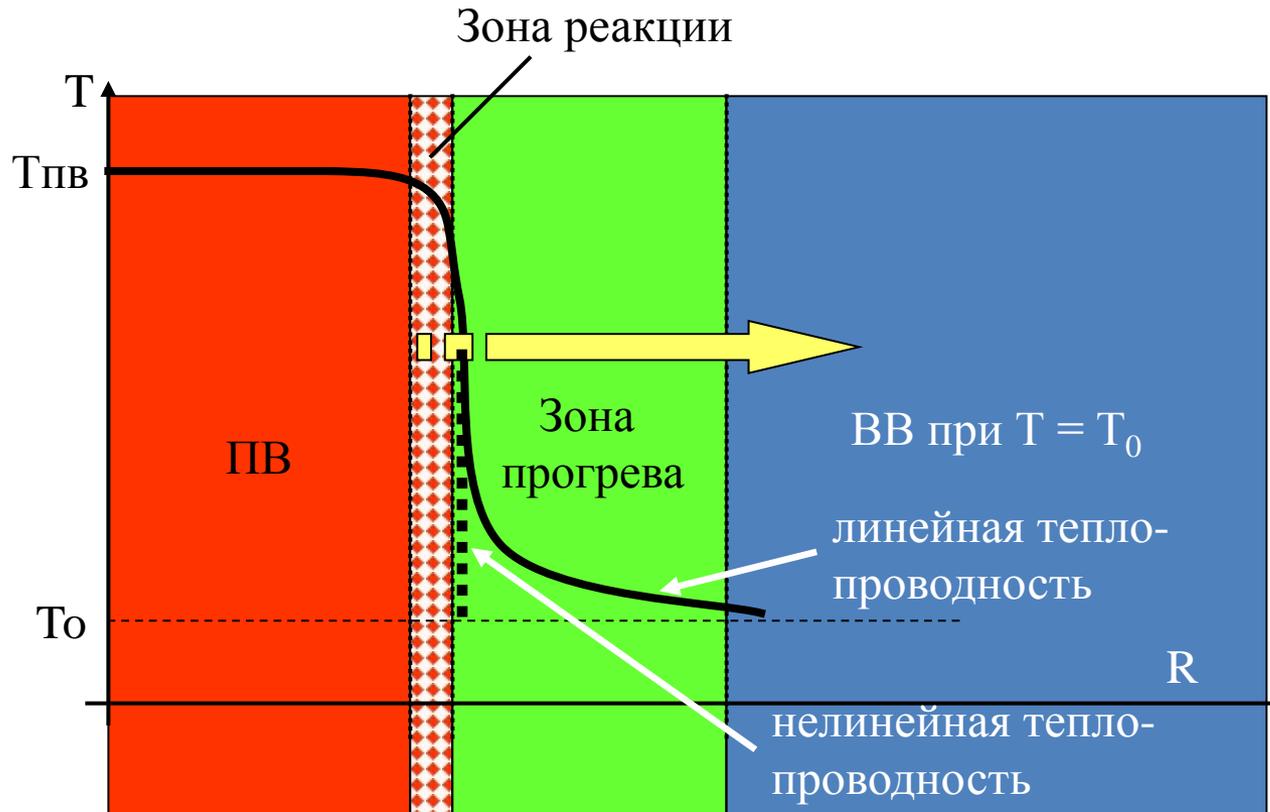
- ✓ Согласно измерениям спектра поглощения (2018г.) при $P \approx 10 - 15$ ГПа у ТАТБ $E_g \approx 2.0$ эВ.
- ✓ Почему расчеты DFT хорошо согласуются с экспериментом, а не занижают E_g , как для других веществ? Почему более точная модель G_0V_0 не согласуется с результатами экспериментов?
- ✓ При этом результаты расчетов разных авторов по моделям одного класса, хорошо согласуются (2.5эВ и 4.5 эВ), что говорит об их корректности (в рамках принятого приближения).

Превращает ли УВ ТАТБ в полупроводник, и по какому механизму происходит передача энергии в волне горения ?



- Гипотеза подтвердилась – да превращает !
 - ✓ Измерения электропроводности ударно сжатого ТАТБ показали, что она примерно такая же, как у германия (при ну).
 - ✓ Расчеты и измерения ширины запрещенной зоны дают $E_g = 2 - 3$ эв, и она уменьшается при повышении давления.
 - ✓ Увеличение концентрации электронов в зоне проводимости после прохождения УВ происходит в результате нагрева ВВ (основной эффект) и сжатия (уменьшение ширины запрещенной зоны).
- Вопрос о ведущем механизме теплопроводности при горении микроочагов (фононная или электронная теплопроводность, или обе) остается открытым, необходимы дальнейшие исследования.

Скорость волны горения в среде с нелинейной (электронной) теплопроводностью



Электронная теплопроводность полупроводников

$$\chi \sim \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

Скорость волны горения

$$D \sim \sqrt{\frac{\chi(T_{ПВ})}{\tau(T_{ПВ})}}$$

- ✓ χ и τ - коэффициент температуропроводности и время реакции при температуре, близкой к температуре ПВ. (Кришеник, Шкадинский, ДАН, 2003).
- ✓ Макрокинетическая скорость реакций в ТАТБ (и, следовательно пор-plot и другие детонационные эффекты) определяется температурой ПВ !?

- Чтобы оценить скорость волны горения нужно оценить значения двух параметров, χ и τ , при температуре порядка $T_{ПВ}$ в ГТ.
- Оценки времени реакции 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.) .
- Если предположить, что передача энергии в волне горения идет по фононному механизму ($\chi \sim 10^{-7}$ м²/с), то получим оценку скорости волны горения ~ 300 м/с для октогена и ~ 60 м/с для ТАТБ. То, что надо !
- **Возможное объяснение парадокса** – уточнение времени реакции, а не механизма передачи энергии. В расчетах скорости волн горения использовалась модель кинетики горения, полученная из опытов по зажиганию ВВ при низких температурах и больших временах зажигания (≥ 1 сек), неприменимая при малых временах реакции. На пикосекундных временах хорошо работает МД.

Почему ТАТБ такой низкочувствительный ?



- Подробное обсуждение см. в нашей статье в ФГВ, 2009, № 1.
- Внешнее воздействие на ВВ характеризуется двумя основными параметрами:
 1. P_f – давление на фронте первой УВ, определяющее плотность очагов,
 2. $T_{ПВ}$ – температура ПВ в очагах реакции, определяющая скорость волны горения.
- Давление УВ-инициирования детонации пластифицированного ТАТБ ≥ 10 ГПа, плотность ГТ выходит на насыщение, и ГТ зажимаются практически мгновенно.
- Главный (фактически - единственный) фактор кинетики детонации ПСТ – это скорость волны горения, которая определяется температурой ПВ в «горячих точках».

$$D \sim \sqrt{\frac{\chi(T_{ПВ})}{\tau(T_{ПВ})}} \sim \exp\left(-\frac{T_{ef}}{T_{ПВ}}\right) \quad T_{ef} = \frac{E_g}{4} + \frac{E_a}{2}$$

E_a - энергия активации хим. реакций (энергия связи нитрогруппы)
~ 60 ккал/моль – ТАТБ
~ 40 ккал/моль – НМХ, RDX

- Для ТАТБ $E_g \approx 40$ ккал/моль и основной вклад в T_{ef} дает второе слагаемое.
- **ТАТБ такой низкочувствительный потому, что у него аномально низкая температура ПВ, ~2000К, в ~ 2 раза меньше, чем у обычных ВВ, и его молекула более прочная.**

Как работает макрокинетика, основанная на температуре ПВ (ФГВ, 2009, № 1) ?



- Итак, макрокинетическая скорость разложения ТАТБ зависит от $T_{ПВ}$:
 $\sim \exp(F(T_{ПВ}))$, где $F = - T_{ef}/T_{ПВ}$
- **Вопрос:** «Как отсюда получить связь скорости реакций с интенсивностью инициирующего воздействия, т.е. с давлением» ?
- **Ответ (неожиданный):** «После прохождения УВ «эффективная калорийность ВВ» возрастает, т.к. УВ «приносит» в среду дополнительную энергию. В результате температура ПВ в очагах реакции зависит от интенсивности инициирующей УВ – чем сильнее УВ, тем выше температура ПВ в очагах».
- С помощью уравнений состояния ВВ и ПВ можно рассчитать $T_{ПВ}(P)$ и представить $F(T_{ПВ})$ как $F(T_{ПВ}) \approx T_1 + \alpha \cdot P$. (T_1 и α – вычисляемые константы).
- Линейное приближение применимо, поскольку повышение $T_{ПВ}$ за счет добавочной энергии от УВ невелико. Тем не менее, из-за того, что $T_{ef} \gg T_{ПВ}$, скорость реакции зависит от давления достаточно сильно.
- В итоге приходим к привычной зависимости скорости реакций от давления $\sim \exp(\alpha \cdot P)$, в свою очередь, ее можно аппроксимировать еще более привычной зависимостью $\sim P^m$.

Выводы по кинетике разложения ТАТБ



$$-\frac{d\xi}{dt} = F(\xi) \cdot N^{1/3}(P_f) \cdot D(P) = Z \cdot \xi \cdot (1-\xi)^{2/3} \cdot \exp(\alpha \cdot P)$$

-Место для формулы.

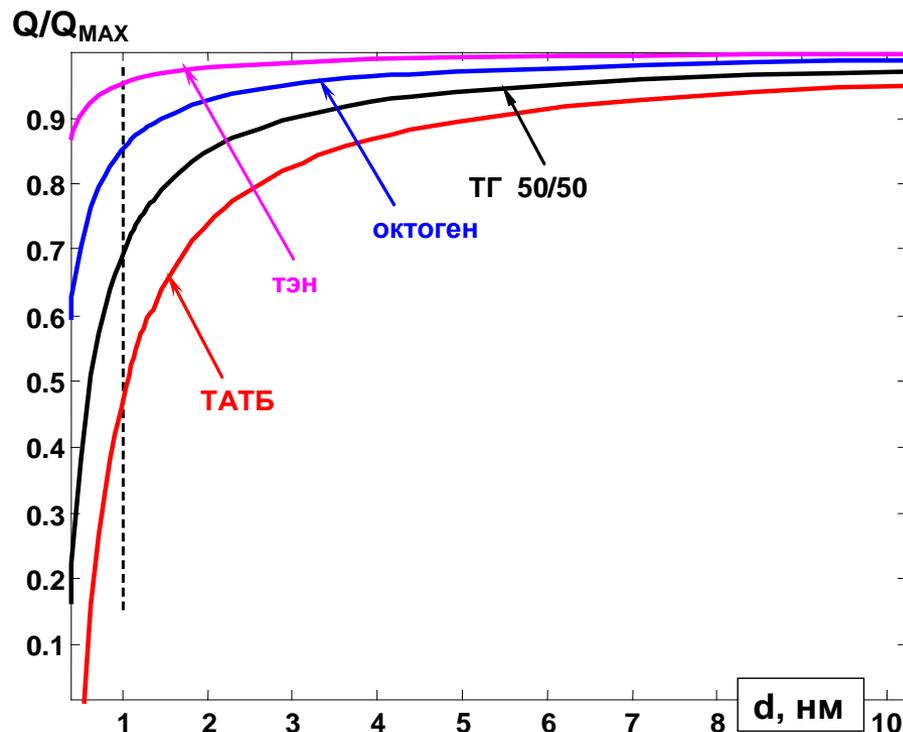
- $F(\xi)$ – получается из решения модельной задачи $F(\xi) \approx 4.5 \cdot \xi \cdot (1-\xi)^{2/3}$
- $N^{1/3}(P_f) = const$ при $P_f \geq 10$ ГПа.
- $D(P) \sim \exp(\alpha \cdot P)$, где $\alpha \approx \frac{T_{ef}}{T_*^2} \cdot \frac{1}{C_{EP/3}(P_f)} \cdot \frac{dE_f(P_f)}{dP_f}$ – получается из приближенного решения задачи о скорости распространения волны горения.
- Оценки дают значение $\alpha = 0.2 - 0.3$ 1/ГПа (ФГВ, №1, 2009),
- Подбор по результатам моделирования детонационных экспериментов дает значение $\alpha = 0.32$ 1/ГПа (ХНЧ, 2007).

Полуэмпирическая модель - моделируемые процессы анализируются на микроуровне, и на этой основе строятся физически обоснованные, хотя и приближенные, зависимости трех сомножителей от параметров среды. Затем, по результатам детонационных экспериментов, производится корректировка констант Z и α (их всего лишь 2!).

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.



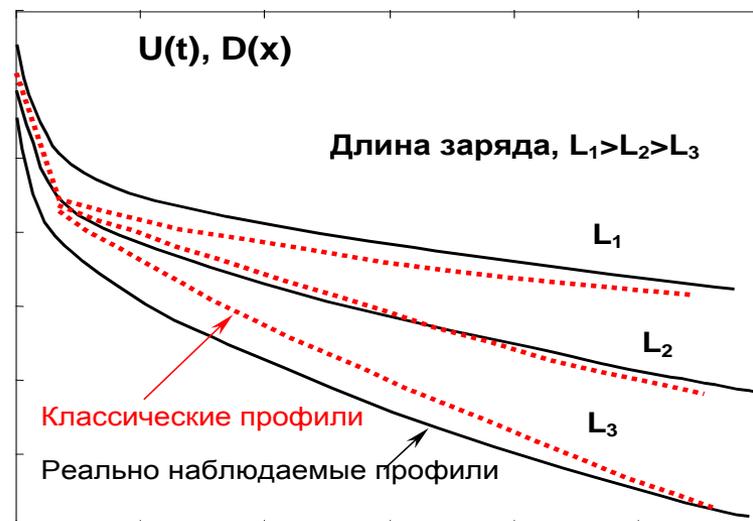
Расчетная калорийность некоторых ВВ в зависимости от среднего размера УДА в ПВ (Жеребцов и др, 2005)

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

Экспериментальное подтверждение роста УДА и медленного энерговыделения за пределами ЗХР



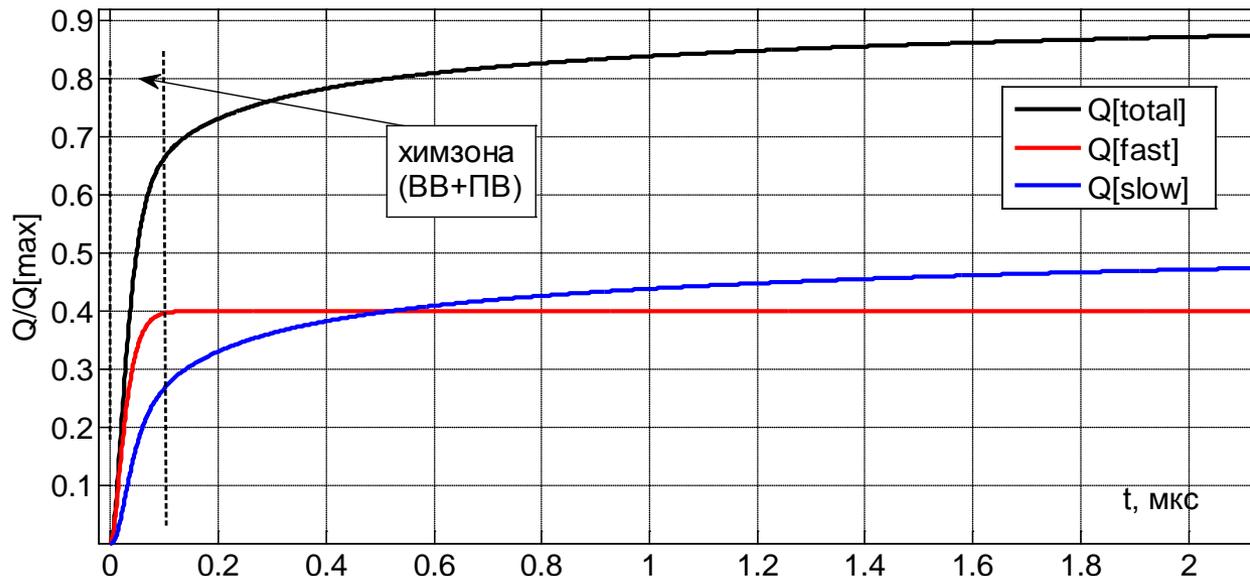
- Малоугловое рассеяние синхротронного излучения в ПВ (Титов и др., 2001 +).
- Стадия медленного роста электропроводности ПВ ПСТ (ФГВ, 2007, № 1). $P=34$ и 27 ГПа.
- Расщепление кривых затухания УВ в преграде, контактирующей с детонирующими ВС «Comp. В» (Bdzil, 1975) и ПСТ (Лобойко и др., 2005). «Давление детонации зависит от размера заряда».



Объединенная модель детонации ПСТ



- Энерговыведение в детонирующем ВВ с отрицательным кислородным балансом разделяется на две компоненты (13-th Int. Det. Symp., 2006):
 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.



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

$$E_f(t) = q_0 \cdot \alpha \cdot [1 - \xi(t)]$$

Выбор значений констант медленной кинетики

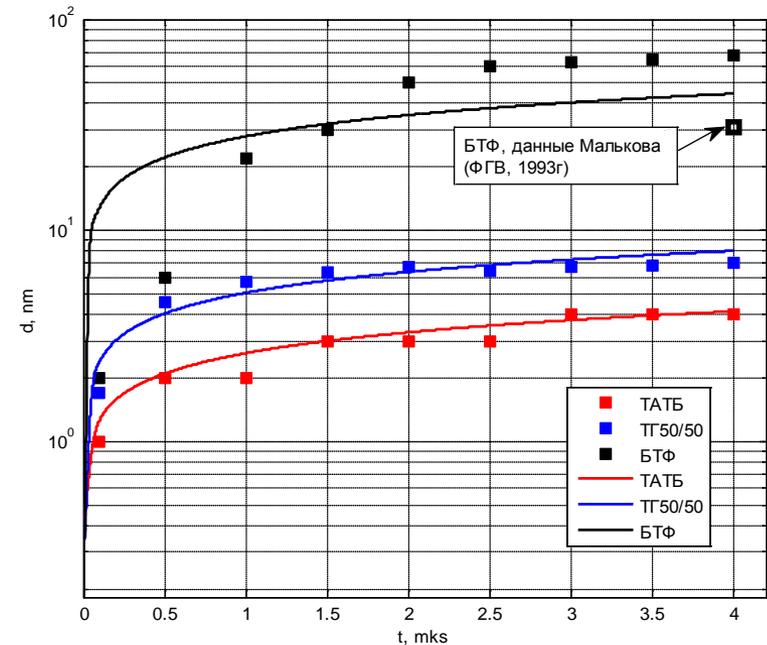


$$E_s(t) = q_0 \cdot [1 - \xi(t)] \cdot (1 - \alpha) \cdot [1 - f(t)]$$

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

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

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.



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

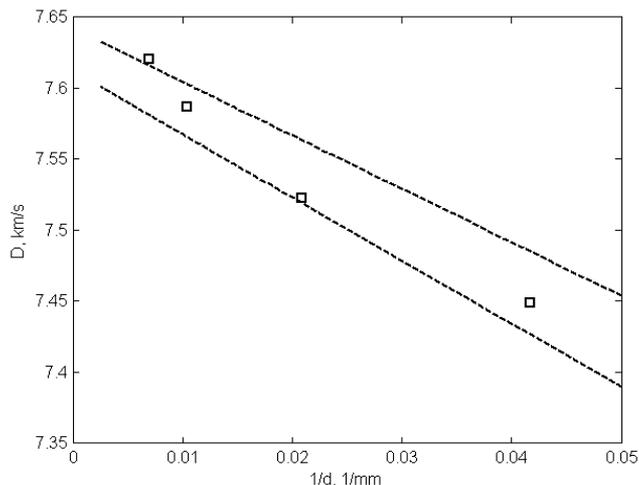
$$\left. \begin{matrix} Q^{РАСЧ}(d_{\text{УДА}}) \\ Q^{РАСЧ}(t) \end{matrix} \right\} \Rightarrow d_{\text{УДА}}^{РАСЧ}(t) \longleftrightarrow d_{\text{УДА}}^{ЭКСП}(t)$$

Модель слабонеидеальной детонации

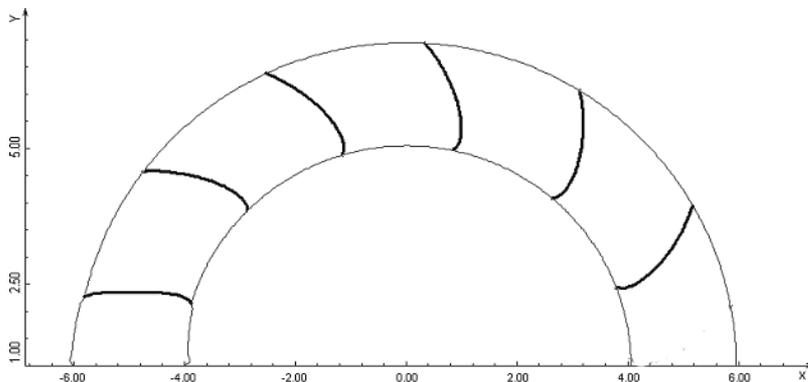


- В условиях, когда реализуется сильное инициирование и размеры системы много больше критических, применима модель слабонеидеальной детонации (ФГВ, 2008, № 2):
 - ✓ Мгновенное превращение ВВ в ПВ и выделение части калорийности, соответствующей первой стадии.
 - ✓ Медленное энерговыделение оставшейся части калорийности в полностью прореагировавших ПВ.
- Модель слабонеидеальной детонации описывает результаты экспериментов, в том числе диаметр-эффekt и распространение детонации в криволинейных каналах, что является дополнительным подтверждением существования медленной стадии кинетики и корректности выбора ее параметров.

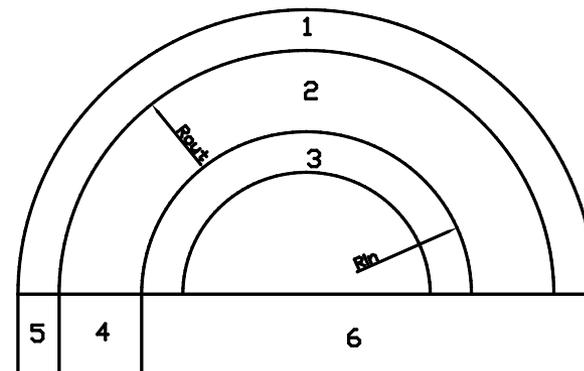
Применение модели слабонеидеальной детонации для описания результаты некоторых экспериментов



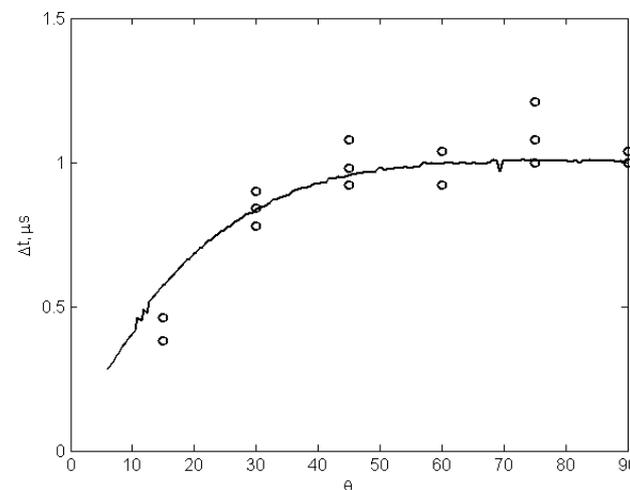
1. Диаметр-эффект. Квадрат – расчет по модели СНД, линии – пределы изменения экспериментальных данных (Campbell, 1976)



Расчетная форма фронта детонационной волны

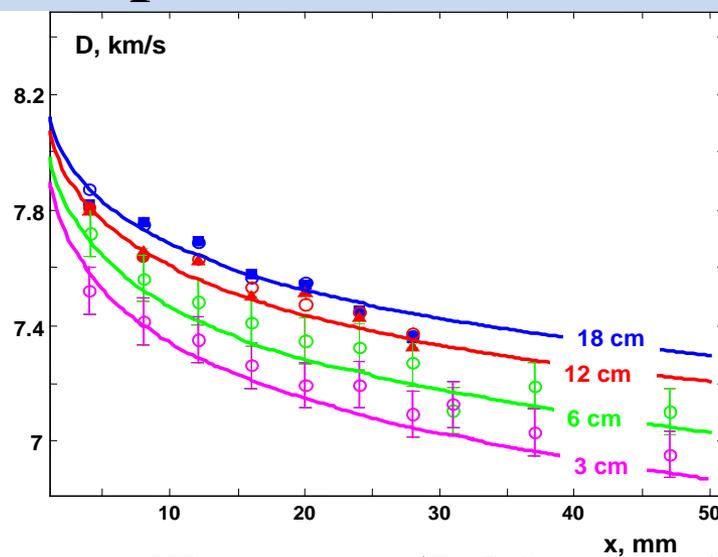
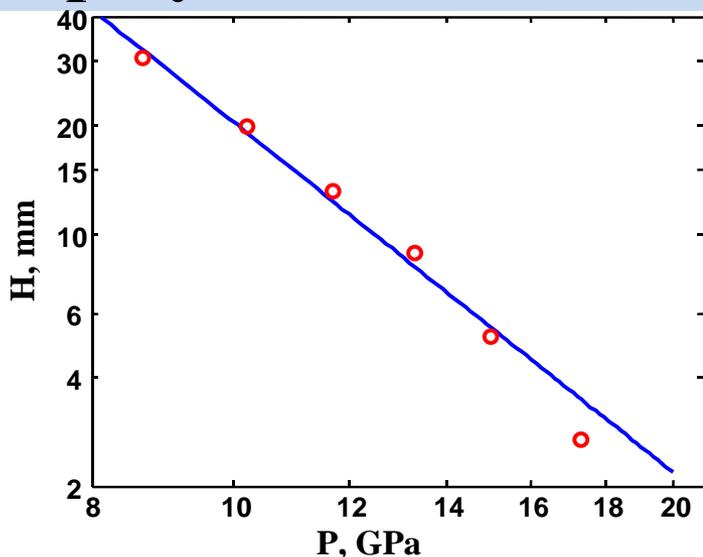


2. Эксперимент по изучению распространения детонации ПСТ в полукольцевом зазоре 40/60 мм (Лобойко и др., 2004)



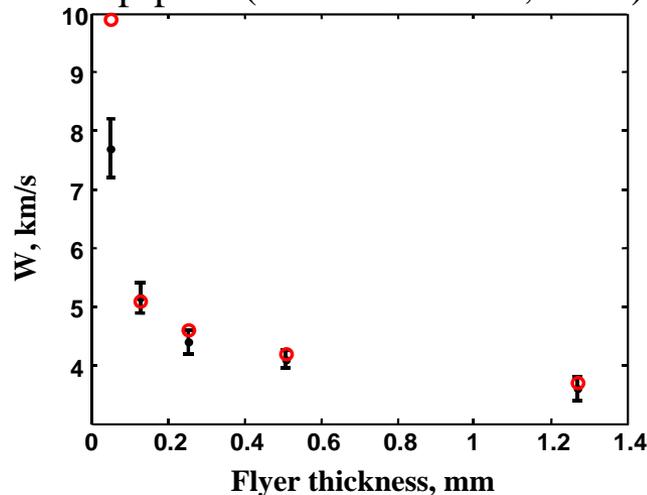
Разновременность выхода ДВ на наружную и внутреннюю поверхности ВВ в зависимости от угла поворота ДВ

Сравнение с полной объединенной модели с результатами некоторых экспериментов

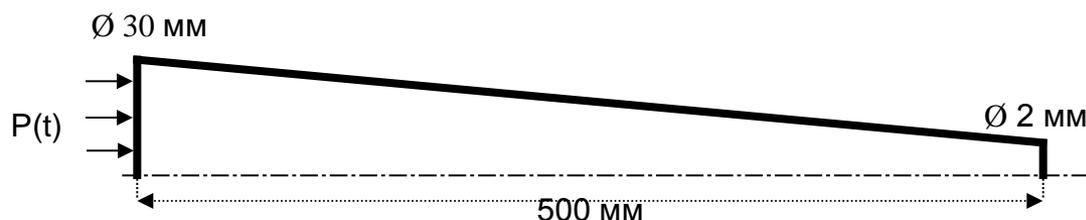


Затухание УВ в преграде (Лобойко и др., 2005)

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



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



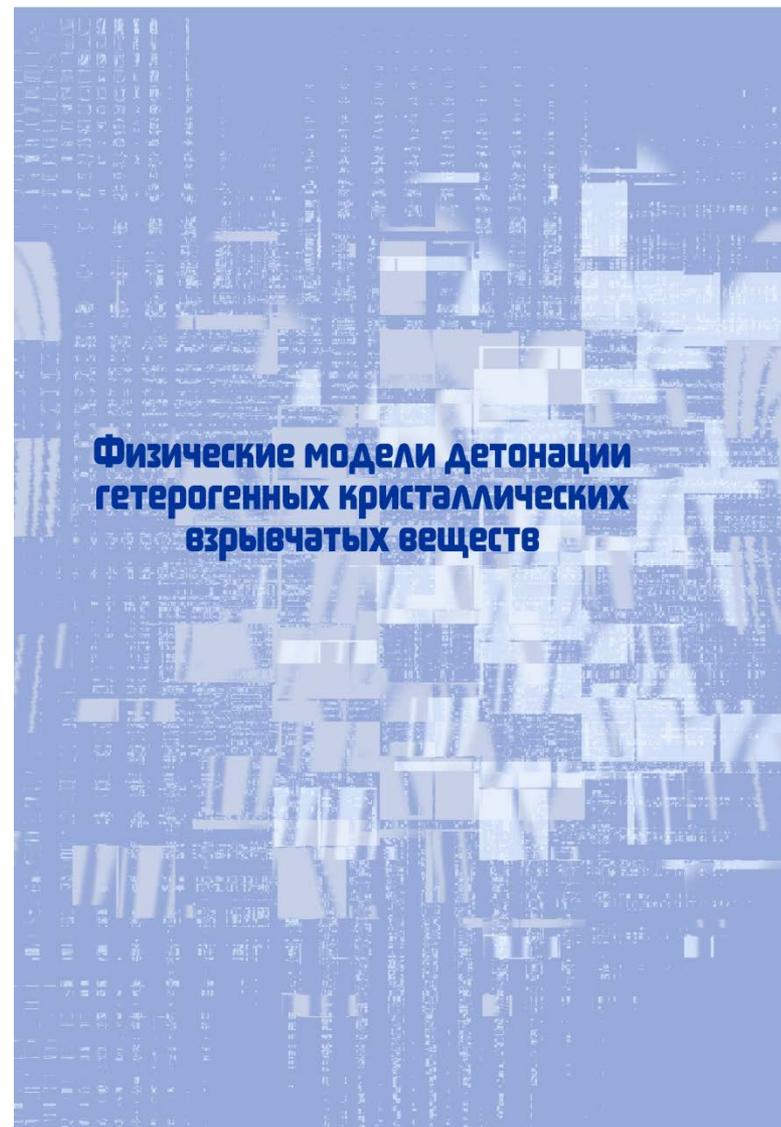
Критический диаметр
 Расчет $L = 31.5$ см и $\text{Ø} \sim 12$ мм,
 Эксперимент (Dobratz, 1995) $\text{Ø} \sim 12$ мм.

Сборник статей



Содержит подробное изложение результатов, представленных в докладе, а также ряд других вопросов:

- Кооперативные эффекты в ПВ.
- Модель низкоскоростной детонации,
- Модель недосжатой детонации флегматизированных ВС
- и другие.



- **Развитие физических моделей**

А.Л. Жеребцов, М.В. Тараник, Д.В. Кочутин, А.Л. Кутепов.

- **Математическое моделирование**

А.С. Шнитко, С.К. Царенкова, Г.В. Коваленко,
Д.А. Варфоломеев, В.В. Попова, М.А. Воробьева

- **Измерения электропроводности ТАТБ**

М.М. Горшков, В.Т. Заикин, В.М. Слободенюков,
О.В. Ткачев.

Заключение



- Макрокинетика разложения гетерогенных кристаллических ВВ рассчитать из первых принципов пока что невозможно, но стало «более-менее» ясно, как это сделать, в принципе.
- Продуктивным является полуэмпирический подход, промежуточный между эмпирическим и первопринципным, когда моделируемые процессы анализируются на микро и мезо уровнях, и на этой основе строится физически обоснованная, хотя и приближенная, зависимость скорости энерговыделения в химических реакциях от параметров среды. Затем, по результатам детонационных экспериментов, производится тонкая корректировка этой зависимости.
- Надеюсь, что получили ответы на некоторые вопросы Б.Г.Лобойко и «что-то поняли» о связи микроструктуры ВВ и его детонационных характеристик.