

01;05

Определение ширины детонационной зоны на основе принципа неопределенности

© Э.Э. Лин

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров
E-mail: root@gdd.vniief.ru

Поступило в Редакцию 21 декабря 2010 г.

Предлагается феноменологический подход к рассмотрению детонационных явлений во взрывчатых веществах, при котором зона протекания релаксационных процессов (детонационная зона) рассматривается как возбужденная квантовая система в когерентном состоянии. Полученное определение ширины детонационной зоны не связано с кинематическими параметрами детонационной волны.

Общепринятое определение ширины детонационной зоны между фронтом ударной волны (УВ) во взрывчатом веществе (ВВ) и поверхностью Чепмена–Жуге (ЧЖ), на которой завершается энерговыделение, связано с одномерными гидродинамическими соотношениями для описания движения гладких (в частности, плоских) поверхностей, между которыми протекают релаксационные процессы [1]. Эти процессы включают в себя экзотермические реакции, энерговыделение которых поддерживает стабильное распространение детонации ВВ. Вместе с тем известно, что самоподдерживающиеся (автоволновые) процессы с энерговыделением характеризуются негладкой, ячеистой пространственной структурой [2]. В случае детонации твердых ВВ это связано с иницированием процессов разложения исходного вещества не по всей поверхности фронта УВ, а в разнесенных друг от друга горячих точках. „Точечное“ иницирование ВВ, носящее к тому же случайный характер, обуславливает образование пульсирующей трехмерной структуры детонационной зоны. В свете этого одномерное гидродинамическое описание детонации представляется не вполне однозначным.

В данной работе, по аналогии с альтернативной концепцией [3] физики детонации, детонационная зона рассматривается как квантово-механическая система, находящаяся в возбужденном состоянии. Например, это может быть возбуждение в твердом ВВ квазичастиц — фононов, вызванное действием УВ. В результате фононных возбуждений системы возникают колебания атомов с достаточно большой амплитудой, при которой происходит разрыв связей между атомами и образование новых связей, характерных для продуктов разложения исходного вещества: различных химических соединений (молекул, радикалов), углеродных кластеров и т.п.

Релаксационные процессы в детонационной зоне рассматриваются с помощью понятия волны $\varphi(x, t)$ плотности распределения объектов с новыми межатомными связями, образовавшимися при разрыве прежних связей в результате „раскачки“ колебаний. Волна $\varphi(x, t)$ распространяется со временем t в пределах квантово-механической системы вдоль оси заряда ВВ (ось x) от фронта УВ в сторону поверхности ЧЖ. Движение волны φ в пределах детонационной зоны происходит до момента времени τ , где τ — время протекания химических реакций при детонации.

Для описания распространения волнового пакета $\varphi(x, t)$ в макроскопической системе, состоящей из гармонических осцилляторов, можно записать соотношение неопределенностей для координаты и импульса когерентного квантового процесса [4]

$$|\Delta X| |\Delta p| = \frac{\hbar}{2}. \quad (1)$$

Неопределенность импульса по порядку величины равна самому импульсу, т.е. релаксационные процессы либо протекают, либо нет: $|\Delta p| = |p| = m|\Delta X|/\Delta t$. Здесь $m = \langle A \rangle m_u N$ — масса атомов, охваченных волной φ с координатой фронта X ($\langle A \rangle$ — средний атомный вес в системе, m_u — атомная единица массы, N — число атомов, охваченных фононными возбуждениями), \hbar — приведенная постоянная Планка, Δt — наименьший промежуток („квант“) времени, характерный для единичного акта взаимодействия объектов в системе. Физический смысл соотношения (1) заключается в том, что в течение промежутка времени Δt невозможно точно определить координату X до тех пор, пока в охваченной волной части системы не завершатся релаксационные процессы.

Формально из соотношения (1) следует, что $|\Delta X| \propto \sqrt{\Delta t}$, т.е. из-за стохастического характера протекания релаксационных процессов в рассматриваемой системе аналитическая производная dX/dt не может быть определена ($dX/dt = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} |\Delta X|/\Delta t \propto \lim_{\Delta t \rightarrow 0} 1/\sqrt{\Delta t} = \infty$), а показатель дробной производной равен $1/2$. Это означает, что поверхность фронта волны φ не является идеально гладкой и может представлять собой пульсирующую трехмерную структуру.

Для квантовой системы в когерентном состоянии параметр Δt целесообразно определить из соотношения неопределенности „энергия–время“:

$$\Delta t = \frac{\hbar}{\Delta E} = \frac{\hbar}{3Nk_B T}. \quad (2)$$

Здесь ΔE — ширина уровня энергии возбужденного состояния, которая при $k_B T \gg \hbar\omega$ (ω — характеристическая частота) равна $\Delta E = 3Nk_B T$, где k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Переписав выражение (1) для средней по сечению заряда координаты $\langle X \rangle$ фронта волны φ , получаем из (1), (2) в приближении $\Delta \langle X \rangle / \Delta t \approx d \langle X \rangle / dt$ следующий закон распространения этого фронта:

$$\frac{d \langle X \rangle}{dt} \approx \left(\frac{3k_B T}{2 \langle A \rangle m_u} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Выражение (3) соответствует общеизвестной концепции классической траектории когерентного квантового процесса [4] (отсутствует постоянная Планка) и означает, что постоянная скорость распространения фронта волны φ устанавливается в достаточно тонком слое ВВ, представляющем собой квантовую подсистему, в которой выполняются соотношения (1), (2). Например, это может быть нелинейная цепочка атомов, укладываемаяся в пределы ширины фронта УВ. При переходе фоновых возбуждений в следующий, столь же тонкий, слой скорость фронта волны φ остается такой же, как и в предыдущем слое, так как величина $d \langle X \rangle / dt$ не зависит от координаты X .

Интегрируя выражение (3) в пределах $0 \leq t \leq \tau$ при определенном значении эффективной температуры T_{eff} , осредненной по рассматриваемой квантово-механической системе, можно приблизительно определить среднюю по сечению заряда ширину $\langle a \rangle$ детонационной зоны:

$$\langle a \rangle \approx \left(\frac{3k_B T_{eff}}{2 \langle A \rangle m_u} \right)^{1/2} \tau. \quad (4)$$

В соответствии с аррениусовской кинетикой колебательно инициируемых реакций, время их протекания можно определить как $\tau = \tau_0 \exp(3n - 6)$, где $\tau_0 = 2\pi\hbar/k_B T_{eff}$, n — число атомов в нелинейной многоатомной молекуле. Например, при $T_{eff} = 4000$ К [3], $n = 8$ получаем $\tau = 0.78 \mu\text{s}$ и $\langle a \rangle \approx 1.6$ nm. Полученные величины вписываются в диапазон общеизвестных данных [1,5] для типичных твердых ВВ: $\tau = 0.024\text{--}0.85 \mu\text{s}$, $\langle a \rangle \approx 0.13\text{--}2.5$ nm. В соответствии с аррениусовской кинетикой, при небольшом уменьшении числа атомов в молекуле время протекания реакций и ширина детонационной зоны должны значительно уменьшиться. Например, при $n = 6$ получаем следующие величины: $\tau \approx 2$ ns, $\langle a \rangle \approx 4 \mu\text{m}$; при $n = 5$ $\tau \approx 0.1$ ns, $\langle a \rangle = 0.2 \mu\text{m}$. Эти оценки указывают на возможность создания взрывчатых веществ, ограниченных по составу компонентов, для которых характерно чрезвычайно быстрое выделение энергии в субмикронном слое. Например, это могут быть инициирующие ВВ. Формально можно также представить себе ВВ, в которых выделение энергии происходит за пикосекундные времена в слоях нанометрической толщины. Например, при $n = 4$ $\tau \approx 5$ ps, $\langle a \rangle \approx 10$ nm.

Предлагаемый феноменологический подход, основанный на принципе неопределенности, может оказаться полезным при проведении оценок параметров детонации новых взрывчатых составов и при анализе результатов опытов.

Автор благодарит В.М. Бельского, Н.Я. Василика, А.Л. Михайлова и А.В. Чернова за полезные обсуждения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке государственного контракта РФ № 02.740.11.0189.

Список литературы

- [1] *Физика взрыва* / Под ред. Л.П. Орленко. М.: Физматлит, 2004. Т. 1. 832 с.
- [2] *Кринский В.И., Жаботинский А.М.* // Автоволновые процессы в системах с диффузией. Горький: Изд-во ИПФ АН СССР, 1981. С. 6–32.
- [3] *Уолкер Ф.Е.* // Химическая физика. 1993. Т. 12. № 5. С. 693–698.
- [4] *Манько В.И.* // Физическая энциклопедия. М.: Сов. энциклопедия, 1990. Т. 2. С. 392–394.
- [5] *Физика взрыва* / Под ред. К.П. Станюковича. М.: Наука, 1974. 704 с.