

05;12

## **Физическая модель ударно-волнового инициирования детонации в прессованных мелкокристаллических взрывчатых веществах**

© К.Ф. Гребенкин

ВНИИ технической физики, Снежинск

*Поступило в Редакцию 3 февраля 1998 г.*

В работе предложена физическая модель кинетики реагирования гетерогенных ВВ при ударно-волновом инициировании детонации, основанная на предположении, что молекулярные кристаллы ВВ обладают полупроводниковыми свойствами. Модель позволяет объяснить наблюдаемую в экспериментах сильную зависимость ударно-волновой чувствительности прессованных ВВ от их начальной плотности и температуры.

Для проверки предложенной модели предлагается провести измерения ширины запрещенной зоны кристаллов триаминотринитробензола (ТАТБ) и сравнить с величиной 40 kcal/mol, полученной в данной работе на основе анализа взрывных экспериментов.

Хорошо известно, что критическое давление инициирования детонации в гетерогенных взрывчатых веществах (ВВ), получаемых прессованием мелкокристаллических исходных материалов, в несколько раз меньше, чем в монокристаллических образцах из того же вещества. Это связано с тем, что прессованные ВВ обладают пористостью и под действием ударной волны в них происходит схлопывание пор, локальное повышение температуры и быстрое выгорание ВВ в перегретых зонах —

очагах горения. После этого волна горения распространяется из очагов в оставшуюся часть ВВ [1].

Хотя сама концепция разгорания из очагов при ударно-волновом инициировании гетерогенных ВВ не вызывает сомнений, остаются открытыми фундаментальные вопросы о том, какой физический механизм определяет скорость распространения волны горения, как объяснить на микроскопическом уровне наблюдаемую в экспериментах сильную зависимость задержки инициирования гетерогенных ВВ от их начальной плотности и температуры и, наконец, как ударно-волновая чувствительность связана с молекулярной структурой ВВ.

В данной работе предлагается физическая модель процесса ударно-волнового инициирования гетерогенных ВВ, основанная на предположении о том, что кинетика инициирования определяется шириной запрещенной зоны молекулярных кристаллов ВВ. Действительно, если предположить, что распространение волны горения из очагов происходит за счет теплопроводности, то ее скорость можно оценить как [2]:

$$D \approx \sqrt{\chi/\tau},$$

где  $\chi$  — коэффициент температуропроводности ВВ вне очагов горения,  $\tau$  — время протекания реакции в прогревом от очага слое ВВ. Зависимость теплопроводности неметаллов от температуры имеет вид [3]:

$$\chi = \chi_0 \cdot \exp(-\varepsilon_g/2RT),$$

где  $\varepsilon_g$  — ширина запрещенной зоны,  $\chi_0$  — константа. Отсюда следует, что скорость распространения волны горения можно представить в виде:

$$D = D_0 \exp(-\varepsilon_g/4RT),$$

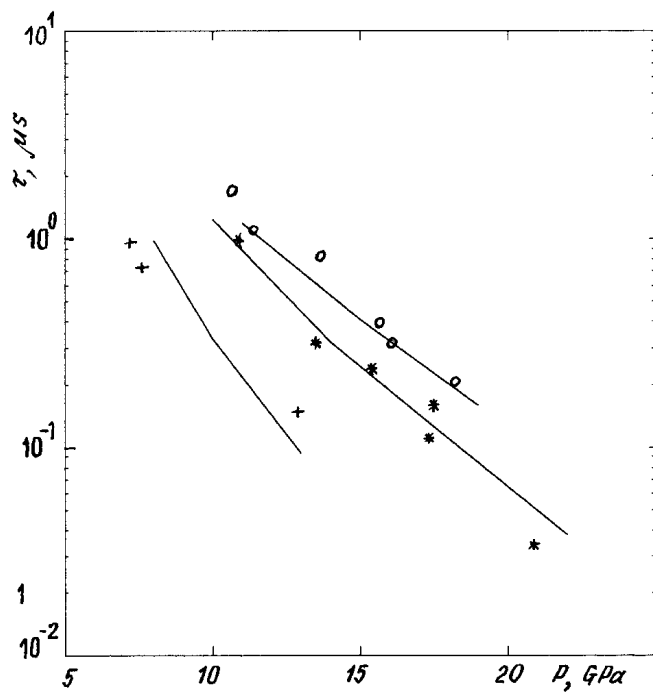
где  $D_0$  — константа.

Характерное время сгорания ВВ можно оценить как  $t_x \approx R/D$ , где  $R$  — удвоенное среднее расстояние между очагами горения. Если характерный размер пор равен  $r$ , то  $R \approx r/\alpha^{1/3}$ , где  $\alpha$  — пористость ВВ, т.е. объемная доля пор.

Исходя из этих соображений, можно предложить следующее уравнение макрокинетики реагирования гетерогенных ВВ при ударно-волновом инициировании:

$$-\frac{1}{W} \cdot \frac{dW}{dt} = \frac{1}{t_x} = Z \cdot \alpha^{1/3} \cdot \exp(-E_a/RT) \quad (1)$$

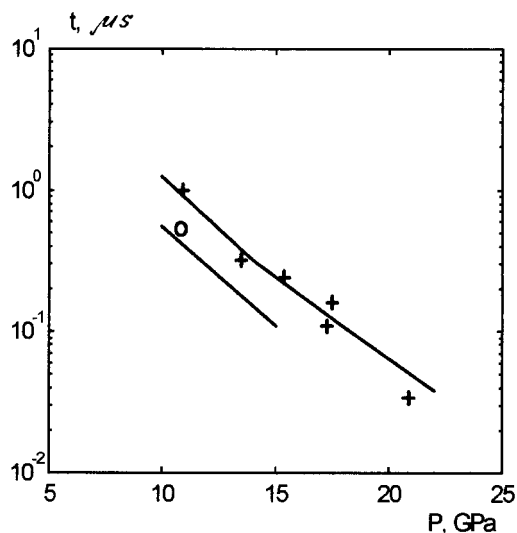
Здесь  $W$  — концентрация ВВ,  $T$  — температура среды,  $R$  — постоянная Больцмана, а  $Z$  и  $E_a$  — параметры модели.



**Рис. 1.** Зависимость времени задержки инициирования детонации ТАТБ от давления на фронте ударной волны при различных значениях начальной плотности:  $1.92 \text{ g/cm}^3$  ( $\circ$  — эксперимент [6], верхняя линия — расчет),  $1.90 \text{ g/cm}^3$  ( $*$  — эксперимент [6], средняя линия — расчет) и  $1.81 \text{ g/cm}^3$  ( $+$  — эксперимент [6], нижняя линия — расчет)

Хотя выражение (1) внешне совпадает с законом Аррениуса, это сходство лишь формальное, поскольку главный параметр модели  $E_a$  не связан скакой-либо химической реакцией, а определяется зонной структурой молекулярного кристалла ВВ:  $E_a = \varepsilon_g/4$ .

Заметим, что вычисление температуры ВВ, входящей в уравнение (1) является нетривиальной задачей и требует корректного учета таких факторов как начальная пористость и зависимость теплоемкости ВВ от температуры.



**Рис. 2.** Зависимость времени задержки инициирования детонации ТАТБ от давления на фронте ударной волны при различных значениях начальной температуры и плотности:  $T = +68^\circ\text{C}$ ,  $\rho = 1.88\text{ g/cm}^3$  (○ — эксперимент [6], нижняя линия — расчет),  $T = +20^\circ\text{C}$ ,  $\rho = 1.90\text{ g/cm}^3$  (+ — эксперимент [6], верхняя линия — расчет).

Наибольший практический интерес представляют ВВ на основе нитросоединений, такие как тротил, триаминотринитробензол (ТАТБ), октоген, гексоген и др. Известно, что молекулярные кристаллы нитросоединений могут обладать полупроводниковыми свойствами и ширина запрещенной зоны в них порядка 1 eV [4]. Следовательно,  $E_a \approx 6\text{ kcal/mol}$ , что на порядок меньше энергии активации при тепловом инициировании ВВ [5].

Для верификации модели (1) было выполнено численное моделирование процесса инициирования ТАТБ в условиях экспериментов [6] с помощью одномерной лагранжевой газодинамической программы с кинетикой химических реакций в виде (1).

На рис. 1 представлено сравнение расчетных и экспериментальных зависимостей времени задержки инициирования детонации от давления при разной начальной плотности ВВ. На рис. 2 представлены ана-

логичные результаты, полученные при разной начальной температуре ВВ. Можно констатировать, что предложенная модель вполне удовлетворительно воспроизводит экспериментальные данные. Оцененное по результатам анализа взрывных экспериментов значение видимой энергии активации для ТАТБ оказалось равным  $E_a \approx 10 \text{ kcal/mol}$ , на этом основании можно ожидать, что ширина запрещенной зоны в кристаллах ТАТБ составляет около  $40 \text{ kcal/mol}$ . По оценкам, у кристаллов гексогена и октогена ширина запрещенной зоны вдвое меньше, чем у ТАТБ. Этим, вероятно, объясняется их более высокая ударно-волновая чувствительность по сравнению с ТАТБ.

Таким образом, предложенная модель открывает возможность установления связи между ударно-волновой чувствительностью и зонной структурой молекулярных кристаллов ВВ. Для проверки предложенной модели целесообразно провести измерения ширины запрещенной зоны кристаллов ТАТБ и других нитросоединений, используемых в качестве ВВ.

## Список литературы

- [1] Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортков В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
- [2] Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
- [3] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
- [4] Симон Ж., Андре Ж.-Ж. Молекулярные полупроводники. М.: Мир, 1988.
- [5] Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
- [6] Джексон Р., Грин Л., Барлетт Р. и др. Закономерности инициирования и распространения детонации во взрывчатом веществе ТАТБ. В сб.: Детонация и взрывчатые вещества. М.: Мир, 1981. С. 323–342.