

## ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИИ ПЛАСТИФИЦИРОВАННОГО ТАТБ

К. Ф. Гребенкин, А. Л. Жеребцов, М. В. Тараник, С. К. Царенкова,  
А. С. Шнитко

РФЯЦ, ВНИИ технической физики им. Е. И. Забахина, 456770 Снежинск, k.f.grebyonkin@vniitf.ru

Предлагается физическая модель макрокинетики ударно-волнового инициирования детонации в пластифицированном ТАТБ, основанная на предположении об электронном переносе энергии из горячих точек. Представлены результаты численного моделирования экспериментов по ударно-волновому инициированию детонации LX-17.

Ключевые слова: детонация, ТАТБ, модель инициирования, горячие точки.

### ВВЕДЕНИЕ

Ключевой проблемой современной теории детонации является создание физической модели, которая бы позволила прогнозировать ударно-волновую чувствительность гетерогенных конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) на основе их молекулярной и мезоскопической структуры. Создание такой теории является делом будущего, а в настоящее время интенсивно разрабатываются полуэмпирические модели (см. обзор в [1]), описывающие скорость превращения ВВ в продукты взрыва (ПВ) простыми формулами с параметрами, значения которых подбираются так, чтобы воспроизвести в расчетах результаты взрывных экспериментов. В таких моделях обычно предполагается, что скорость химической реакции в основном определяется давлением в зоне реакции.

В действительности же скорость химических реакций сильно зависит от локального значения температуры, поэтому актуальной задачей является разработка более реалистичной, температурно-зависимой, модели макрокинетики реакций в детонирующих гетерогенных ВВ [2]. Такая модель должна использовать достаточно надежную методику расчета температуры и, что самое главное, предполагать вполне конкретный физический механизм протекания химической реакции в гетерогенной смеси ВВ и ПВ.

В данной работе предлагается температурная модель кинетики ударно-волнового инициирования детонации пластифицированного ТАТБ, основанная на использовании термического уравнения состояния ТАТБ [3], модели «горячих точек» [1] и гипотезы об элек-

тронном механизме переноса энергии из них [4]. Цель работы состояла в том, чтобы, во-первых, представить аргументы в поддержку гипотезы об определяющей роли температуры в макрокинетики гетерогенных ВВ и, во-вторых, выяснить, можно ли с такой кинетикой описывать результаты экспериментов, в первую очередь — зависимость глубины возникновения детонации от давления инициирующей ударной волны при различных значениях начальной температуры ВВ.

### МОДЕЛЬ МАКРОКИНЕТИКИ

Большинство современных моделей инициирования детонации основано на концепции «горячих точек», согласно которой макрокинетическую скорость изменения концентрации ВВ  $\xi$  можно представить в виде произведения трех сомножителей:

$$-\frac{d\xi}{dt} \sim N^{1/3}(p_f)D(p, T)F(\xi), \quad (1)$$

где  $N$  — плотность горячих точек (очагов реакции),  $D$  — скорость распространения волны горения из них,  $F(\xi)$  — геометрический фактор,  $p_f$  — давление на фронте инициирующей ударной волны. Формула (1) получается из качественных соображений [5] и предположения о том, что ВВ реагирует в волнах послынного дозвукового горения, распространяющихся из горячих точек, причем начальный объем горячих точек и время их инициирования пренебрежимо малы.

На основе формулы (1) было предложено несколько кинетических моделей, отличающихся видом входящих в (1) функций [5–10].

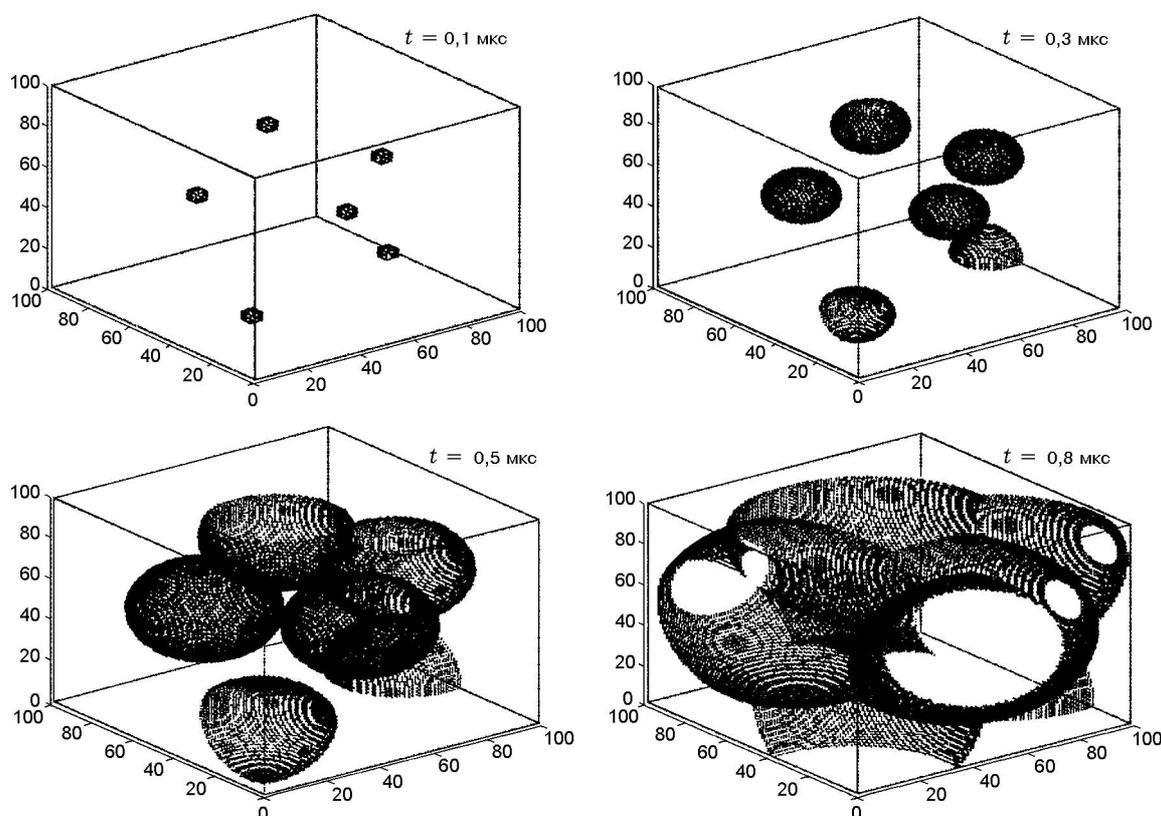


Рис. 1. Эволюция горячих точек в модельном расчете (шесть точек, случайным образом распределенных в кубе с ребром 100 мкм)

Во всех моделях предполагалось, что скорость распространения волны горения из горячих точек в основном определяется текущим давлением в зоне реакции.

Из теории горения [11, 12] следует, что скорость волны горения можно оценить как

$$D \sim \sqrt{\chi_m / \tau_m}, \quad (2)$$

где  $\chi_m$  и  $\tau_m$  — коэффициент теплопроводности непрореагировавшей среды в зоне прогрева и время разложения ВВ в зоне реакции, причем температуры обеих зон близки к температуре ПВ. Таким образом, скорость распространения волны горения из горячих точек и, следовательно, макрокинетика реакций в гетерогенных ВВ определяются двумя физическими процессами, протекающими в окрестности фронта волны горения, — теплопроводностью и кинетикой химических реакций.

Расчеты, выполненные в предположении о фоновом механизме теплопроводности [13], дали парадоксально низкие значения скорости

распространения волны горения из горячих точек в детонирующем ТАТБ, что стимулировало поиск других возможных механизмов передачи энергии из горячих точек [4]. Так, в [14] аналогичные расчеты были выполнены в предположении об электронном механизме переноса энергии из горячих точек и были получены достаточно высокие значения скорости волны горения. Расчетная зависимость скорости горения  $D$  от температуры ударно-сжатого непрореагировавшего ВВ вне горячих точек оказалась близкой к экспоненциальной, и оцененное по результатам этих расчетов значение производной  $A = \frac{d \ln D}{dT}$  составило порядка  $0.01 \text{ К}^{-1}$ .

Исходя из этого соответствующий множитель в формуле (1) был выбран в виде  $D \sim \exp(F(T))$ , где  $F(T)$  — функция температуры ударно-сжатого непрореагировавшего ВВ вне горячих точек, близкая к линейной. Таким образом, скорость волны горения приблизительно экспоненциально зависит от температуры

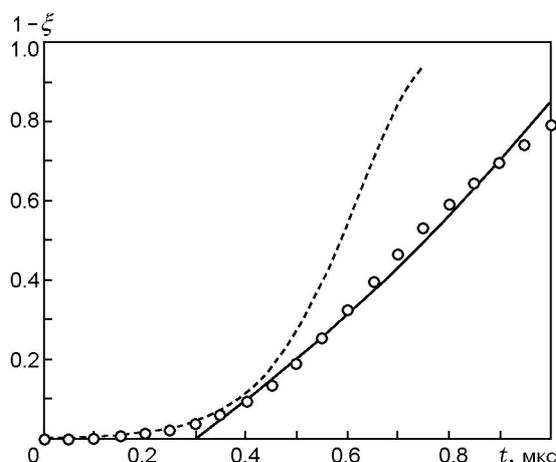


Рис. 2. Зависимость степени выгорания ВВ от времени в модельных расчетах:

штриховая линия — горячие точки расположены в узлах регулярной квадратной решетки, кружки — горячие точки случайно распределены по объему ВВ (см. рис. 1), сплошная линия — расчет со ступенчатой аппроксимацией геометрического фактора

( $D \sim \exp(AT)$ ), что в соответствии с преобразованием Франк-Каменецкого [11] практически эквивалентно аррениусовской зависимости макрокинетической скорости реакций от температуры.

Описанная выше функциональная зависимость макрокинетической скорости реакций от температуры аналогична зависимости скорости реакции от давления, представленной в [15] в виде  $\sim \exp(D_0 + D_1 p + D_2 p^2 + \dots)$  или в более общей форме —  $\exp(G(p))$ , где  $G(p)$  — табличная функция.

Обсудим теперь форму следующего множителя в уравнении (1) — зависимости геометрического фактора от концентрации ВВ  $F(\xi)$ . Эту зависимость можно оценить в ячеечной модели [16], в которой предполагается, что горячие точки возникают в узлах правильной прямоугольной решетки. В ячеечном приближении не учитывается статистический разброс расстояний между соседними горячими точками. Для того чтобы понять влияние статистического фактора, были выполнены модельные расчеты, в которых в кубе в начальный момент было задано несколько горячих точек, случайно распределенных по объему куба, и в предположении о постоянной скорости распространения волн горения рассчитывалась зависимость объема, охваченного волнами горения, от времени. Отношение этого объема к объему куба дает

оценку степени выгорания ВВ в гетерогенной зоне реакции при постоянных значениях двух других сомножителей формулы (1), что позволяет составить представление о виде функции  $F(\xi)$ .

Динамика распространения волн горения из микроочагов в ВВ в модельном расчете показана на рис. 1. Полученная в этом расчете зависимость степени выгорания от времени представлена на рис. 2, там же для сравнения приведена аналогичная зависимость, оцененная в ячеечном приближении для кубической ячейки. Как и следовало ожидать, учет статистического разброса положения горячих точек приводит к замедлению эффективной скорости реакции и увеличению времени выгорания. Это происходит за счет догорания ВВ в окрестности горячих точек, расстояние между которыми больше среднего значения.

При малых временах, когда нет перекрытия волн горения, распространяющихся из соседних очагов, результаты расчетов этих двух модельных задач совпадают, причем в обоих случаях наблюдается задержка начала интенсивного выгорания после начала горения. Это происходит из-за того, что при малых временах выгорание в сферической волне горения растет пропорционально  $t^3$ .

По результатам модельных расчетов можно выделить две стадии макрокинетики, качественно различающиеся видом геометрического фактора.

На первой стадии справедливо ячеечное приближение и пространственное распределение горячих точек не влияет на макрокинетику реакций. Выгорание ВВ на первой стадии зависит от времени по закону  $1 - \xi(t) = \xi_1 \left(\frac{t}{t_1}\right)^3$ , где время отсчитывается от момента прихода ударной волны в данную лагранжеву ячейку. Здесь  $\xi_1$  — параметр модели, представляющий собой концентрацию ПВ в момент окончания первой стадии. Приближенное значение  $\xi_1$  можно оценить по результатам модельных расчетов, представленным на рис. 2, согласно которым  $\xi_1$  порядка нескольких процентов, а длительность первой стадии составляет примерно треть разности времен  $\Delta\tau$  прихода ударной волны в данную точку и окончания разложения ВВ в ней:  $t_1 \approx \Delta\tau/3$ . В первом приближении энерговыделением на первой стадии можно пренебречь и считать, что оно начинается не сразу после прихода ударной волны, а

с задержкой по времени, равной  $t_1$ .

Длительность второй стадии, на которой собственно и происходит интенсивное горение ВВ, приблизительно в два раза больше, чем первой:  $t_2 \approx 2 \cdot \Delta\tau/3$ . Как показали модельные расчеты (см. рис. 2), можно считать, что на этой стадии геометрический фактор не зависит от времени:  $F(t) = \text{const}$  при  $t \geq t_1$ .

Наконец, рассмотрим оставшийся множитель в формуле (1) — зависимость плотности горячих точек от давления на фронте инициирующей ударной волны. Иницирование взрывчатого состава на основе ТАТБ происходит при высоких давлениях. В этом случае определяющую роль играет гидродинамический процесс образования горячих точек при схлопывании пор [17, 18]. Микроструктура прессованного взрывчатого состава на основе ТАТБ (97 %) с полимерной связкой (3 %) изучалась в работе [19], где отмечалось, что во взрывчатом составе имеются поры с характерным размером микронного уровня. Как показали двумерные гидродинамические расчеты [20], при характерном для ударно-волнового инициирования ТАТБ давлении 15 ГПа схлопывание поры приводит к повышению температуры до  $\approx 4000$  К в зоне с размером, на порядок меньшим начального размера поры. При снижении давления на фронте ударной волны до 10 ГПа температура горячей области снижается на  $\approx 1000$  К. Если экстраполировать результаты этих расчетов в область низких давлений, то получим, что критическая температура зажигания горячих точек диаметром  $\approx 0.1$  мкм, возникших в результате схлопывания пор микронных размеров, составляет согласно [21]  $\approx 2000$  К и реализуется при давлении на фронте ударной волны  $\approx 5$  ГПа.

В первом приближении эффект отказа зажигания горячих точек при низких давлениях можно моделировать путем введения критического давления  $p_{cr} \approx 5.0$  ГПа и считать, что при  $p < p_{cr}$  реакции не возбуждаются, а при  $p \geq p_{cr}$  происходит инициирование реакций практически во всех порах, и плотность горячих точек не зависит от интенсивности ударной волны. Такое приближение применимо при давлениях  $p \geq 10$  ГПа.

В данной работе рассматривается более реалистичная зависимость плотности горячих точек от давления на фронте инициирующей ударной волны, учитывающая статистический разброс размеров пор. Как уже отмечалось, для

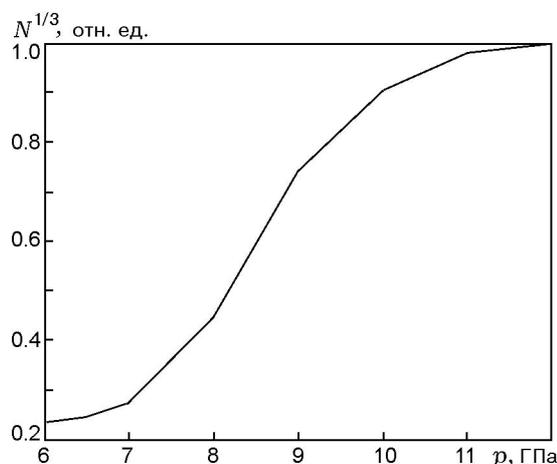


Рис. 3. Зависимость фактора плотности горячих точек от давления на фронте первой ударной волны

каждого размера поры существует свое значение критического давления (при уменьшении размера поры повышается давление, необходимое для создания микроочага горения после воздействия ударной волны на эту пору). Отсюда следует, что статистический разброс размеров пор приведет к размыванию функции  $N^{1/3}(p_f)$  [10], иными словами, эта функция будет плавно изменяться в некотором интервале давлений и выходить на насыщение при высоких давлениях, когда инициируются практически все поры. Этот интервал можно оценить, если предположить, например, что вариации размеров пор порядка их среднего значения, т. е.  $\approx 1$  мкм. Тогда вариацию размеров горячих точек можно оценить как  $\approx 0.1$  мкм, чему соответствует изменение критической температуры, при которой происходит зажигание горячей точки, на  $\approx 200$  К [21]. Такое изменение температуры происходит при изменении инициирующего давления на  $\approx 2$  ГПа. Следовательно, фактор плотности горячих точек будет представлять собой функцию, которая плавно изменяется при изменении давления в интервале  $\approx 5 \div 10$  ГПа и выходит на постоянное значение при  $p \gtrsim 10$  ГПа.

С учетом этих соображений в данной работе принята зависимость фактора плотности горячих точек от давления на фронте ударной волны в виде, показанном на рис. 3. Фактически эта зависимость выбрана так, чтобы воспроизвести результаты экспериментов по ударно-волновому инициированию LX-17 при

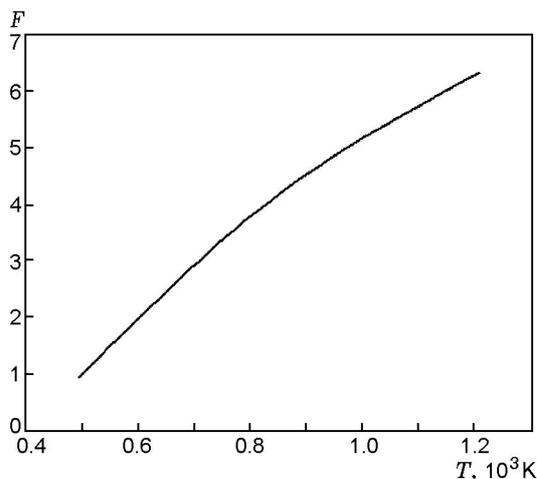


Рис. 4. Функция  $F(T)$ , определяющая зависимость скорости реакций от температуры ВВ в виде  $\exp\{F(T)\}$

низких давлениях. Интересно отметить, что при низких давлениях фактор плотности горячих точек не стремится к нулю, а в интервале давлений  $1 \div 6$  ГПа является постоянной величиной, которая примерно в пять раз меньше предельного значения при высоких давлениях (см. рис. 3). Это можно интерпретировать как следствие смены механизма иницирования горячих точек: при высоких давлениях ( $p \geq 6$  ГПа), вероятно, работает гидродинамический механизм, при низких — вязкопластический.

Суммируя изложенное выше, запишем уравнение макрокинетики в виде

$$-\frac{d\xi}{dt} = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq t \leq t_1, \\ ZN^{1/3}(p_f) \exp\{F(T)\} & \text{при } t > t_1, \end{cases} \quad (3)$$

где  $Z = 10^{-5} \text{ с}^{-1}$  — эмпирическая константа, геометрический фактор приближенно учтен путем введения задержки начала реакции  $t_1$ , зависимость  $N^{1/3}(p_f)$  приведена на рис. 3, а функция  $F(T)$  изображена на рис. 4. Последняя функция выбиралась по результатам расчетов зависимости скорости волны горения от температуры [14], а затем корректировалась так, чтобы обеспечить описание результатов экспериментов по иницированию детонации. Заметим, что эта функция близка к линейной и ее производная меняется в пределах  $A = \frac{dF}{dT} = \frac{d \ln D}{dT} \approx (8 \pm 2) \cdot 10^{-3} \text{ К}^{-1}$ , что согласуется с расчетным значением этого параметра.

Как видно из рассмотрения модельной задачи, время задержки начала реакций  $t_1$  составляет примерно одну треть от времени  $\Delta\tau$ , которое проходит с момента прихода ударной волны в данную счетную ячейку до полного завершения реакций в ней. Соответственно длительность стадии энерговыделения составляет  $t_2 \approx \frac{2}{3}\Delta\tau$ . Таким образом, если  $t_2$  известно, то величина  $t_1$  находится тривиальным образом — из соотношения  $t_1 \approx t_2/2$ . Проблема состоит в том, что точное значение  $t_2$  можно определить лишь после того, как реакция в данной счетной ячейке завершится, а длительность задержки реакций  $t_1$  надо знать до того, как начнутся реакции.

Идея предлагаемого в данной работе подхода к определению длительности первой стадии (задержки начала реакций) состоит в том, чтобы не вычислять ее точно, а ограничиться некоторой оценкой, что вполне оправдано, поскольку разделение процесса на две стадии имеет приближенный характер и само отношение длительностей стадий получено в весьма упрощенной модельной задаче.

Исходя из этих соображений, будем определять задержку начала энерговыделения  $t_1$  путем интегрирования скорости реакции начиная с момента прихода ударной волны в данную точку. Тогда  $t_1$  можно оценить как момент времени, когда интеграл от скорости реакций достигает некоторого заданного значения (значение интеграла, равное единице, достигается в течение времени, соответствующего длительности всей стадии интенсивного горения ВВ). Практически в расчетной модели был реализован алгоритм нахождения задержки начала реакций после прихода ударной волны, согласно которому в каждой расчетной ячейке время  $t_1$  определяется из уравнения

$$\int_{t_f}^{t_f+t_1} ZN^{1/3}(P_f) \exp\{F(T)\} dt = K, \quad (4)$$

где  $t_f$  — время прихода ударной волны в данную ячейку, значение параметра  $K$  выбрано равным 0.5. Для случая постоянной скорости волны горения этому соответствует выгорание  $1/3$  ячейки по радиусу или  $\approx 3\%$  по массе.

Численное моделирование экспериментов выполнялось по двумерной гидродинамической программе [22], шаг сетки выбран равным

0.4 мм, чему соответствует примерно пять счетных интервалов в зоне реакции в стационарной детонационной волне. Момент прихода фронта ударной волны определялся из условия достижения максимума давления в данной лагранжевой ячейке. В каждой счетной ячейке запоминались значения времени прихода фронта ударной волны и соответствующего ему давления. Эти величины необходимы для определения момента начала расчета кинетики по уравнению (4) и для моделирования температуры согласно алгоритму, описанному в следующем параграфе. Использовались уравнения состояния типа Ми — Грюнайзена для непрореагировавшего взрывчатого состава [8], уравнение типа НОМ [15] для ПВ [23] и модель [24] для расчета давления смеси ВВ — ПВ. При моделировании нагретого взрывчатого состава предполагалось, что его пористость при нагревании не меняется и наблюдаемое изменение плотности определяется процессом теплового расширения кристаллического ТАТБ [3].

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВВ ВНЕ ГОРЯЧИХ ТОЧЕК

Особенность рассматриваемой модели состоит в том, что макрокинетика энерговыделения в основном определяется температурой непрореагировавшего ВВ вне горячих точек. Поэтому необходимо знать не только уравнение состояния гетерогенной смеси ВВ и ПВ в зоне реакции, но и температуру непрореагировавшего ВВ вне горячих точек.

Пусть  $p$ ,  $V$ ,  $E$ ,  $p_{ВВ}$ ,  $V_{ВВ}$ ,  $E_{ВВ}$ ,  $p_{ПВ}$ ,  $V_{ПВ}$ ,  $E_{ПВ}$  — давление, удельный объем и удельная внутренняя энергия смеси, ВВ и ПВ соответственно,  $\xi$  — массовая концентрация ВВ. Таким образом, состояние компонентов смеси характеризуется шестью переменными и параметры гетерогенной смеси ВВ и ПВ смеси определяются из системы уравнений [1, 16], в которую входят уравнения состояния компонентов, условия аддитивности удельного объема и энергии смеси:

$$V = \xi V_{ВВ} + (1 - \xi) V_{ПВ},$$

$$E = \xi E_{ВВ} + (1 - \xi) E_{ПВ},$$

а также условие механического равновесия компонентов

$$p = p_{ВВ}(V_{ВВ}, E_{ВВ}) = p_{ПВ}(V_{ПВ}, E_{ПВ}).$$

Заметим, что последнее условие выполняется, поскольку характерный размер неоднородности в реагирующей среде ( $\delta$ ) порядка нескольких десятков микрометров и время выравнивания давления порядка  $\delta/c$  (где  $c$  — скорость звука), т. е. порядка 0.01 мкс, что много меньше времени реакции ВВ даже в условиях стационарной детонации.

Полная система уравнений, определяющих состояние смеси, включает также уравнения для энергий компонентов смеси, которые необходимо решать совместно с упомянутыми выше соотношениями. На практике обычно ограничиваются более простой и экономичной моделью, включающей уравнение для энергии смеси и какое-то простое замыкающее уравнение.

Влияние вида замыкающего соотношения на термодинамические параметры ВВ в зоне реакции было исследовано в работе [24] на примере задачи о структуре зоны реакции плоской стационарной детонационной волны. Рассматривалось три варианта замыкающего уравнения — условие изотермичности смеси, условие адиабатичности ВВ после ударно-волнового нагружения и, наконец, предположение о том, что отношение удельных объемов ВВ и ПВ в зоне реакции постоянно. Оказалось, что в этих приближениях газодинамические параметры смеси (давление, плотность, энергия) в зоне реакции слабо зависят от вида замыкающего соотношения, в то время как расчетное значение температуры ВВ в зоне реакции зависит от модели замыкания очень сильно. Последний результат вполне понятен: тепловая энергия ВВ составляет малую часть от полной энергии ВВ и вычисляется как разность двух больших величин — полной энергии ВВ и ее холодного компонента, поэтому даже небольшая неточность в перераспределении энергии между компонентами смеси приводит к значительной погрешности в тепловой энергии ВВ и, следовательно, в температуре.

Чтобы преодолеть эту трудность, можно воспользоваться тем обстоятельством, что для расчета газодинамики температура ВВ не требуется, она необходима только для вычисления скорости химических реакций. Поэтому можно отделить задачу расчета газодинамических параметров, которая мало чувствительна к деталям модели смеси, от расчета температуры ВВ в смеси, и моделировать газодинамику с калорическим уравнением состояния Ми — Грюнайзена для ВВ и с приближенным уравнением

состояния смеси, например, с замыкающим соотношением [24] или [25].

В результате из газодинамического расчета будут известны термодинамические параметры смеси ( $p$ ,  $\rho$ ,  $\varepsilon$ ) в каждой расчетной ячейке. Задача состоит в том, чтобы определить соответствующие им значения температуры ВВ и подставить эти значения в кинетическое уравнение. Рассмотрим наиболее распространенный случай, когда ВВ нагружается ударной волной, а затем изоэнтропически разгружается. Воспользовавшись термическим уравнением состояния ВВ [3], можно предварительно рассчитать температуру на фронте ударной волны (для каждого значения начальной плотности и начальной температуры ВВ) и аппроксимировать результат какой-то простой аналитической функцией, например, полиномом

$$T_f = C_1 + C_2 p_f + C_3 p_f^2,$$

где  $T$  дано в К, а  $p$  — в ГПа. Для нормальных значений начальной плотности ( $\rho_0 = 1.91 \text{ г/см}^3$ ) и температуры ( $20 \text{ }^\circ\text{C}$ ) для взрывчатого состава типа LX-17 на основе ТАТБ получены следующие значения коэффициентов полинома:  $C_1 = T_0 = 293$ ,  $C_2 = 22.5$ ,  $C_3 = 0.26$ . Аналогичным образом рассчитывались значения второго и третьего коэффициентов полинома для предварительно нагретого взрывчатого состава.

Температура ВВ при изоэнтропической разгрузке за фронтом ударной волны также была предварительно рассчитана с помощью термического уравнения состояния [3] ВВ, результат представлен в виде линейной функции давления

$$T(t) = T_f + A(p(t) - p_f),$$

где  $p_f$  — давление на фронте ударной волны,  $p(t)$  — текущее значение давления в данной ячейке и  $A = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_s$ . Как оказалось, все изоэнтропы можно описать одним значением параметра  $A = 8.0$  (рис. 5).

Можно ожидать, что предлагаемая модель, несмотря на простоту, будет давать вполне разумные результаты, поскольку точность моделирования температуры ВВ на фронте ударной волны определяется только точностью уравнения состояния ВВ, а изменение температуры за фронтом ударной волны

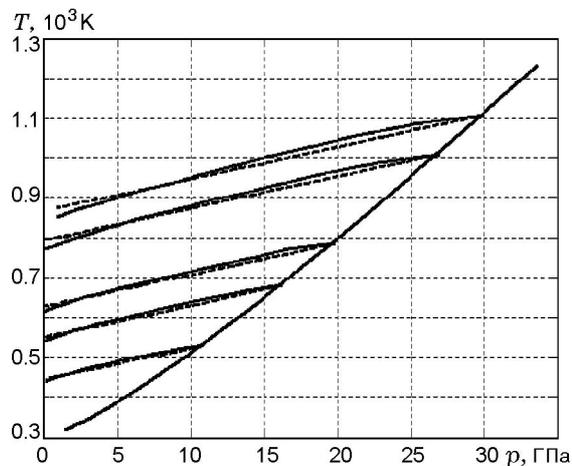


Рис. 5. Температура ВВ на ударной адиабате и изоэнтропах:

сплошные линии — расчет по термическому уравнению состояния ВВ [3], штриховые — температура на изоэнтропах, рассчитанная по интерполяционной формуле  $T(p) = T_f + A(p - p_f)$ ,  $A = 8.0$

невелико и хорошо описывается линейной зависимостью от давления. По поводу использованного в данной работе уравнения состояния ВВ [3] можно заметить, что при его построении особое внимание уделялось корректному описанию распределения давления и энергии между тепловой и холодной составляющими, в частности, учитывалась характерная для молекулярных сред сильная зависимость теплоемкости ВВ от температуры. Поэтому точность расчетов температуры ударно-сжатого ВВ с помощью уравнения состояния [3] должна быть удовлетворительной.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИНИЦИИРОВАНИЮ ДЕТОНАЦИИ В LX-17

Для проверки модели выполнено численное моделирование ряда экспериментов по иницированию детонации состава LX-17 (92.5 % ТАТБ) при различных условиях.

Расчетная зависимость глубины возникновения детонации во взрывчатом составе LX-17 от давления иницирующего ступенчатого импульса, полученная при нормальном и повышенном (до 523 К) значениях начальной температуры состава, показана на рис. 6, там же представлены соответствующие экспериментальные результаты из [26, 27]. Видно, что в расчетах хорошо воспроизводится зависимость глубины возникновения детонации от

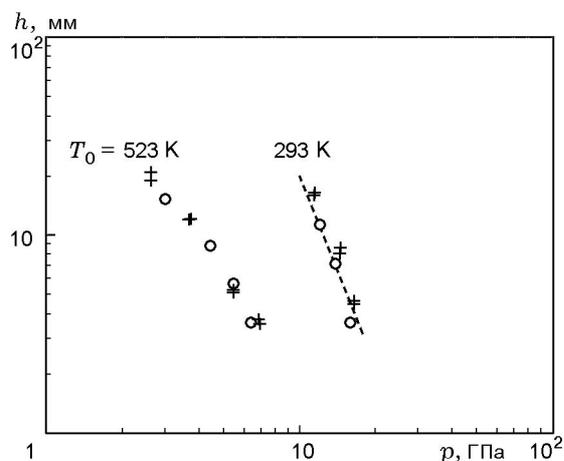


Рис. 6. Зависимость глубины возникновения детонации в LX-17 от давления:

штриховая линия — экспериментальная зависимость [27], крестики — экспериментальные точки из [26], кружки — результаты расчетов

давления при различных значениях начальной температуры ВВ.

Были также выполнены расчеты критического диаметра LX-17 в модельной постановке — начальная геометрия задачи представляла собой усеченный конус длиной 500 мм с диаметрами оснований 30 и 2 мм. Со стороны большего диаметра задавался инициирующей треугольный импульс давления с амплитудой 30 ГПа и длительностью 1 мкс. Детонационная волна «забывает» условия инициирования после прохождения расстояния порядка диаметра, поэтому оправдано такое упрощенное моделирование инициатора.

Расчетная зависимость давления на фронте волны на оси системы от расстояния до плоскости инициирования представлена на рис. 7. Видно, что при нормальной температуре детонация прерывается на расстоянии 31.5 см от плоскости инициирования, а при  $T_0 = 523$  К — на расстоянии 45 см, чему соответствуют значения диаметра заряда  $\approx 12$  и  $\approx 5$  мм, при которых происходит прерывание детонации. Таким образом, в расчетах воспроизводится экспериментальное значение критического диаметра LX-17 при нормальных условиях, составляющее 12 мм [28]. Критический диаметр нагретого LX-17 не измерялся, для близкого по свойствам состава РВХ 9502 на основе ТАТБ экспериментальное значение критического диаметра при  $T_0 = 523$  К составляет  $\approx 4$  мм [29].

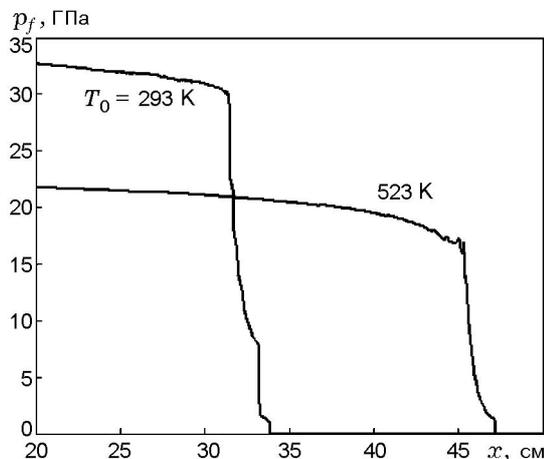


Рис. 7. Расчетная зависимость давления на фронте волны на оси системы от расстояния до плоскости инициирования для разных значений начальной температуры состава LX-17

Большой интерес представляют эксперименты по инициированию детонации летящей тонкой пластиной, в которых, в отличие от экспериментов по инициированию ступенчатым импульсом, давление быстро падает за фронтом инициирующей волны. Было выполнено расчетное моделирование эксперимента [30], в котором детонация в LX-17 инициировалась ударом тонкой летящей пластины из майлара. В расчетах, выполненных с использованием уравнения состояния майлара из [31], инициирование детонации происходит при скорости пластины  $\approx 3.6$  км/с (детонация возникает на глубине  $\approx 10$  мм), что хорошо согласуется с экспериментальным значением критической скорости пластины ( $3.6 \pm 0.2$ ) км/с.

Таким образом, температурная макрокинетическая модель позволяет описать наиболее важные эффекты, которые наблюдались в экспериментах с пластифицированным ТАТБ, в том числе сильную зависимость ударно-волновой чувствительности от начальной температуры ВВ. Последний эффект является естественным следствием модели и получается без привлечения каких-либо дополнительных эмпирических параметров, что подтверждает реалистичность исходных предпосылок модели.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена полуэмпирическая температурная физическая модель макрокине-

тики ударно-волнового инициирования детонации пластифицированного ТАТБ, основанная на модели горячих точек, уточненном термическом уравнении состояния ВВ и концепции электронного переноса энергии из горячих точек. Выполнено численное моделирование экспериментов по ударно-волновому инициированию детонации LX-17, полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В заключение отметим, что модель дает разумные оценки времени взрыва для случая инициирования низкоскоростным ударом, когда ударное нагревание ВВ мало и распространение волны горения из горячих точек происходит при температуре ВВ, близкой к начальной. При этом из температурной модели макрокинетики следует вывод о значительном влиянии начальной температуры ТАТБ на время взрыва в условиях инициирования низкоскоростным ударом, а именно прогнозируется уменьшение времени взрыва на порядок при повышении начальной температуры ВВ с 293 до  $\approx 523$  К. Экспериментальную проверку этого следствия модели можно выполнить с помощью стандартной методики определения чувствительности ВВ к удару (см., например, [32]), измерив зависимость времени взрыва от начальной температуры ТАТБ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Фортов В. Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
2. Уртъев П. А., Тарвер К. М. Ударное инициирование энергетических материалов при различных начальных температурах (обзор) // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 6. С. 181–192.
3. Grebenkin K. F., Zherebtsov A. L., Popova V. V., Taranik M. V. P,V,E,T equation of state for TATB-based explosives // Shock Compression of Condensed Matter-2003. AIP, 2004. P. 141–144.
4. Гребенкин К. Ф. Полупроводниковая модель детонации: состояние дел // Хим. физика. 2005. Т. 24, № 11. С. 18–25.
5. Лобанов В. Ф. Моделирование детонационных волн в гетерогенном конденсированном ВВ // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 6. С. 113–116.
6. Лобанов В. Ф., Караханов С. М., Бордзиловский С. А. Исследование переходных процессов при ударном инициировании ТНТ // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 3. С. 90–97.
7. Бордзиловский С. А., Караханов С. М., Лобанов В. Ф. Моделирование ударного инициирования детонации гетерогенных ВВ // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 5. С. 132–147.
8. Аминов Ю. А., Вершинин А. В., Еськов Н. С. и др. Исследование ударно-волновой чувствительности пластифицированного ВВ на основе ТАТБ // Физика горения и взрыва. 1995. Т. 31, № 1. С. 103–108.
9. Аминов Ю. А., Вершинин А. В., Еськов Н. С. и др. Модифицированная модель макрокинетики детонации ВВ на основе ТАТБ // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33, № 1. С. 94–97.
10. Aminov Yu. A., Es'kov N. S., Nikitenko Yu. A. Modeling of double shock initiation of TATB-based explosives // Tech. Papers of 12th Intern. Detonation Symp., Aug. 11–16, 2002, San Diego.
11. Математическая теория горения и взрыва // Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблат, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе М.: Наука, 1980.
12. Кришеник П. М., Шкадинский К. Г. Высокотемпературный тепловой фронт с нелинейной теплопроводностью // Докл. АН. 2003. Т. 392, № 6. С. 761–766.
13. Tarver C. M., Nichols A. L. Hot spot growth in a thermal-chemical-mechanical reactive flow model for shock initiation of solid explosives // Proc. 11th Symp. (Intern.) on Detonation. 1998. P. 599–605.
14. Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л., Тараник М. В. Электронная теплопроводность при распространении волны горения из «горячих точек» в детонирующем ТАТБ // Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41, № 5. С. 100–103.
15. Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
16. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. М.: Физматлит, 2002. Т. 1.
17. Menikoff R. Granular Explosives and Initiation Chemistry. Preprint LANL. LA-UR-99-6023. 1999.
18. Mader C. L., Kershner J. D. Numerical modeling of the effect of temperature and particle size on shock initiation properties of HMX and TATB // J. Energetic Mater. 1992. V. 10. P. 69–95.
19. Demol G., Lambert P., Trumel H. A study of microstructure of pressed TATB and its evolution after several kinds of insults // Proc. 11th Intern. Detonation Symp. 1998. P. 309–316.
20. Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л., Попова В. В., Тараник М. В. Оценки скорости распространения волны горения из горячих точек при ударном инициировании ТАТБ // Сб. докл. V Харитоновских тематических научных чтений. Саров, 2003. С. 189–194.

21. **Tarver C. M., Chidester S. K., Nichols A. L.** Critical conditions for impact and shock induced hot spots in solid explosives // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. P. 5794–5799.
22. **Suchkov V. A., Shnitko A. S.** Technique and set of programs GRAD for solution of nonstationary problems of continua mechanics // *Third Joint Conf. on Computational Mathematics.* Los Alamos, NM, USA, January 23–27, 1995.
23. **Гребенкин К. Ф., Жеребцов А. Л.** Расчетное моделирование температуры ударно сжатого ТАТБ и продуктов его взрыва // *Тр. междунар. конф. «V Забабахинские научные чтения, 21–25 сентября 1998 г.»* Снежинск, 1999. Ч. 1. С. 200–206.
24. **Stewart D. C., Yoo S., Davis W. C.** Equation of state for modeling the detonation reaction zone // *Tech. Papers of 12th Intern. Detonation Symp.*, Aug. 11–16, 2002, San Diego.
25. **Копышев В. П., Прошин М. М.** Численное моделирование химического пика // *Мат. моделирование.* 1991. Т. 3, № 9. С. 41–48.
26. **Dallman J. C., Wackerle J.** Temperature-dependent shock initiation of TATB-based high explosives // *Proc. 10th Intern. Detonation Symp.* 1993. P. 130–137.
27. **Gustavsen R. L., Sheffield S. A., Alcon S. A. et al.** Embedded electromagnetic gauge measurements and modeling of shock initiation in the TATB based explosives LX-17 and PBX 9502 // *Shock Compression of Condensed Matter-2001.* AIP, 2002. P. 1019–1022.
28. **Tran T. D., Tarver C. M., Maienschein J., et al.** Characterization of detonation wave propagation in LX-17 near the critical diameter // *Tech. Papers of 12th Intern. Detonation Symp.*, Aug. 11–16, 2002, San Diego.
29. **Asay B. W., McAfee J. M.** Temperature effects on failure thickness and the deflagration-to-detonation transition in PBX 9502 and TATB // *Tech. Papers of 10th Intern. Detonation Symp.*, July 12–16, 1993, Boston, Massachusetts. P. 485–489.
30. **Honodel C. A., Humphrey J. R., Weingard R. C., et al.** Shock initiation of TATB formulations // *Tech. Papers of 7th Intern. Detonation Symp.*, June 16–19, 1981. P. 425–434.
31. **Морозов В. Г., Дмитриева Л. В., Карпенко И. И., Корепова Н. В.** Численное моделирование по методике Д возбуждения детонации в ВВ на основе ТАТБ ударом тонкой летящей пластины // *ВАНТ. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 1999. Вып. 2. С. 12–17.
32. **Афанасьев Г., Боболев В.** Иницирование твердых взрывчатых веществ ударом. М.: Наука, 1968.

*Поступила в редакцию 16/VI 2005 г.,  
в окончательном варианте — 26/II 2006 г.*

---