

## О ЗАВИСИМОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОЙ СТРУКТУРЫ ЗОНЫ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ОТ НАЧАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА

И. В. Кузьмицкий

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607190 Саров, igork@vniief.ru

Обсуждаются результаты исследования структуры зоны химической реакции для ряда взрывчатых веществ (ВВ). Было обнаружено, что при увеличении начальной плотности ВВ происходит структурная перестройка зоны химической реакции с ликвидацией пика Неймана в точке критической плотностью. И наоборот, при снижении начальной плотности ВВ отношения газодинамических параметров (в частности, массовых скоростей) в точке Неймана к аналогичным параметрам в точке Жуге возрастают. Показано, что для объяснения указанных особенностей нет необходимости привлекать предположение о возрастающем вкладе экзотермического разложения ВВ на ударном скачке. Полученные результаты можно объяснить, оставаясь в рамках классической теории Зельдовича — Неймана — Дёринга с обычным ударным скачком на фронте детонационной волны и, соответственно, с практически нулевым вкладом в полное энерговыделение в зоне химической реакции.

Ключевые слова: критическая плотность ВВ, ликвидация химического пика, пересечение ударной и детонационной адиабат.

### ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–3] методом лазерной интерферометрии исследовалась структура зоны химической реакции в зависимости от начальной плотности прессованных взрывчатых веществ (ВВ) RDX, HMX, TNETB, ZOХ, DNP. Было найдено, что пик Неймана в зоне реакции регистрируется при плотности ВВ меньше некоторой критической  $\rho_{cr}$ . Для RDX и HMX  $\rho_{cr} = 1,72$  и  $1,82$  г/см<sup>3</sup> соответственно. При указанных плотностях профиль массовой скорости в зоне химической реакции превращался в «полочку» [1, 2]. Наоборот, при снижении начальной плотности ВВ отношение  $N = U_N/U_J$  массовых скоростей в точке Неймана\* ( $U_N$ ) и

в точке Жуге ( $U_J$ ) возрастает. Так, для DNP в [3] найдено, что  $N = 1,7 \pm 0,1$  при плотности кристаллического ВВ  $\rho_0 = 1,49$  г/см<sup>3</sup> и  $N = 2,0 \pm 0,1$  при плотности пористого ВВ  $\rho_{00} = 1,34$  г/см<sup>3</sup>. Первый факт в [1] объяснялся возможной реализацией режима пересжатой детонации, в [2] — увеличением скорости реакции разложения ВВ на ударном скачке.

Ниже будет показано, что для объяснения указанных особенностей поведения профиля массовой скорости в зоне химической реакции при изменении начальной плотности ВВ нет необходимости привлекать предположение о возрастающем вкладе экзотермического разложения ВВ на ударном скачке. Можно, оставаясь в рамках классической теории Зельдовича — Неймана — Дёринга с обычным ударным скачком на фронте детонационной волны и, соответственно, с практически нулевым вкладом в полное энерговыделение в зоне реакции на этом скачке, объяснить полученные результаты. Для этого достаточно принять во внимание возможность пересечения ударных и детонационных адиабат ВВ и продуктов взрыва в плоскости «давление  $p$  — удельный объем  $v$ » [4]. В [4] приведены ссылки на более ранние работы других авторов, в которых затрагивался вопрос о возможности пересечения ударной и детонационной адиабат. В указанной работе про-

\*Поясним термин «точка Неймана»: это точка на ударном скачке, который согласно теории Зельдовича — Неймана — Дёринга предшествует зоне химических реакций. Выгорание в этой точке, согласно названной теории, равно нулю. В отечественной литературе обычно используют термин «химический пик». Однако в некоторых работах отечественных авторов этот термин применяют также и для обозначения всей структуры зоны химической реакции. Поэтому далее будет использоваться термин «точка Неймана». Тем более что давление в этой точке может иногда совпадать с давлением в точке Жуге (профиль зоны реакции — «полочка») и даже быть ниже, чем давление в точке Жуге (в пересжатой волне детонации — профиль «химическая ямка»).

анализирована эволюция профиля газодинамических величин (в том числе, и массовых скоростей) в зоне химической реакции при переходе от режима нормальной детонации ВВ к режиму пересжатой детонации. Приведены расчетные профили газодинамических величин в зоне реакции, которые реализуются либо с типичным пиком Неймана, либо в виде профиля типа «полочка», либо в виде профиля «химическая ямка» по мере возрастания скорости пересжатой волны детонации. В [4] показано также, что для нормального режима детонации возможны лишь профили с химическим пиком или «полочка». Последний случай реализуется, если прямая Михельсона касается детонационной адиабаты в точке ее пересечения с ударной адиабатой.

Аналогичная ситуация возникает и при наблюдении стационарных нормальных режимов детонации с точкой Жуге в конце зоны реакции при изменении начальной плотности ВВ  $\rho_{00}$ . Так, при снижении  $\rho_{00}$  (пористое ВВ), как показывают численные расчеты, наблюдается возрастание параметра  $N$ , и, наоборот, при увеличении  $\rho_{00}$  параметр  $N$  снижается и при некотором критическом  $\rho_{cr}$  реализуется значение  $N = 1,0$ . Эти результаты естественным образом получаются из решения следующих уравнений для законов сохранения массы, импульса и энергии в зоне химической реакции при вариации  $\rho_{00}$ :

$$\begin{aligned} D\rho_{00} - (D - U_J)\rho_J &= 0, \\ p_J &= \rho_{00} D U_J, \\ \varepsilon_2(p_J, \rho_J) &= U_J^2/2 + Q, \\ C_J(p_J, \rho_J) &= (D - U_J); \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} D\rho_{00} - (D - U_N)\rho_N &= 0, \\ p_N &= \rho_{00} D U_N, \\ \varepsilon_1(p_N, \rho_N) - \varepsilon_{00} &= U_N^2/2. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $\varepsilon_i(p, \rho)$  — внутренние энергии (уравнения состояний) ВВ ( $i = 1$ ) и продуктов взрыва ( $i = 2$ );  $\varepsilon_{00}$  — начальная энергия ВВ;  $D \equiv D(\rho_{00})$  — скорость волны детонации, зависящая от начальной плотности ВВ;  $p_N, U_N, \rho_N, p_J, U_J, \rho_J$  — давление, массовая скорость и плотность в точках Неймана (обозначено индексом N) и Жуге (J) соответственно;  $C_J(p_J, \rho_J)$  — скорость звука в продуктах взрыва (выражается известным образом через уравнение состояния).

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ ГЕКСОГЕНА (RDX)

Для получения решений уравнений (1), (2), которые достаточно хорошо описывали бы эксперимент [1, 2], необходимо задать правильные выражения для уравнений состояния RDX и продуктов его взрыва. Как будет видно из дальнейшего изложения, основная неопределенность при этом, по-видимому, связана с правильным построением уравнения состояния ВВ, которое адекватно описывало бы реальную ситуацию в области давлений вблизи пика Неймана при вариации начальной плотности RDX. Неопределенность, связанная с неточным заданием уравнения состояния продуктов взрыва RDX, играет, скорее всего, меньшую роль. Во всяком случае, определенный уровень качества уравнения состояния продуктов взрыва RDX можно проконтролировать при расчетном воспроизведении зависимости скорости волны детонации от начальной плотности ВВ. Эти данные получены экспериментально в различных работах, достаточно полная библиография которых приведена в [5, 6].

Константы уравнения состояния продуктов взрыва в форме JWL для PBX 9407 (94 % RDX, 6 % Eхon 461), которые будут использоваться ниже, взяты из [7] (см. также [5]):  $\rho_0 = 1,6$  г/см<sup>3</sup>,  $D = 7,91$  км/с,  $p_J = 26,5$  ГПа,  $A = 573,187$  ГПа,  $B = 14,639$  ГПа,  $R_1 = 4,6$ ,  $R_2 = 1,4$ ,  $\omega_1 = 0,32$ ,  $E_0 = 8,6$  ГПа/см<sup>3</sup>. Указанной здесь калорийности PBX 9407 соответствует параметр  $Q = E_0/\rho_0 = 5,375$  кДж/г.

В качестве первого приближения для уравнения состояния RDX взята форма для упругой (холодной) составляющей Борна — Майера из [6] с константами из [6, 8]:

$$p_{x1}(y) = B_0 y^2 \exp[B_1(1 - y)] - B_2 y^4, \quad (3)$$

где  $y \equiv (\rho/\rho_{0c})^{1/3}$ . Для коэффициента Грюнайна использовалось выражение из [6]:

$$\Gamma(v) = \frac{\tau - 2}{3} - \frac{v}{2} \frac{(p_{x1} v^{2\tau/3})''}{(p_{x1} v^{2\tau/3})'} + d. \quad (4)$$

Параметры в выражениях (3) и (4) имеют следующие значения:  $B_0 = 4,57317$  ГПа,  $B_1 = -10,7624$ ,  $B_2 = 6,09207$  ГПа,  $\rho_{0c} = 1,82$  г/см<sup>3</sup>,  $\tau = 2$ ,  $\Gamma_0 = 2,2$ ,  $d = 0,108$ ,  $c_{v1} = 1,256 \times 10^{-3}$  кДж/(г·К). Эти значения обеспечивают обращение полного давления (тепловое и упругое) в нуль при комнатной температуре  $T_0 = 292,2$  К и плотности ВВ  $\rho_0 = 1,82$  г/см<sup>3</sup>:

Таблица 1  
Коэффициенты в линейной зависимости  $D(U)$  [5, 6]

$\rho_{00}$ , г/см <sup>3</sup>	A	B
1,0	0,40	2,00
1,6	2,5	2,0
1,82	2,87	1,61

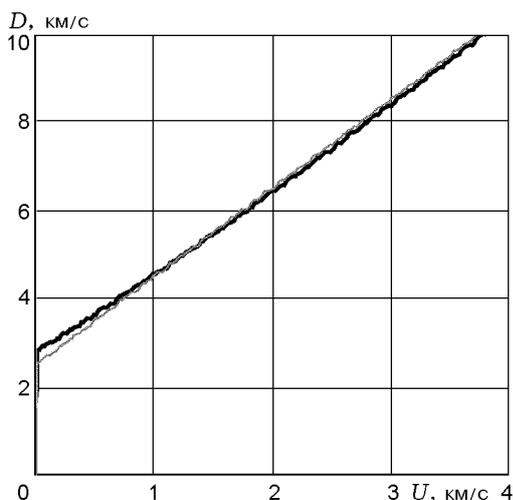


Рис. 1. Расчетная (толстая линия) и экспериментальная (тонкая линия) зависимости  $D(U)$  при  $\rho_{00} = 1,6$  г/см<sup>3</sup>

Таблица 2  
Экспериментальные данные [5, 6] для зависимости  $D(\rho_{00})$

$\rho_{00}$ , г/см <sup>3</sup>	D, км/с
1,0	6,05
1,6	8,03
1,72	8,5
1,8	8,754

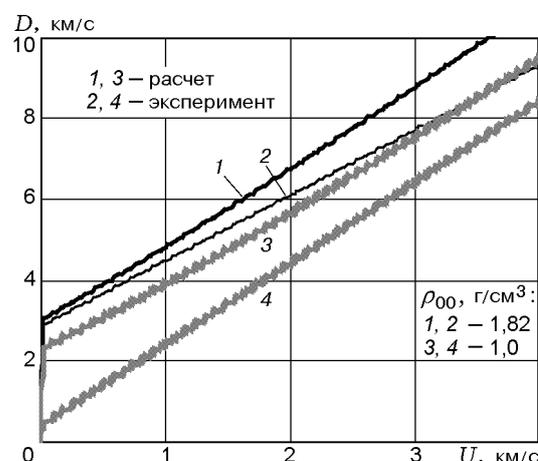


Рис. 2. Зависимости скорости волны детонации от массовой скорости при различных значениях начальной плотности ВВ

$$T_0 = -\frac{p_x(\rho_0)}{\Gamma(\rho_0) \rho_0 c_{v1}}$$

Решение системы (2) совместно с (3), (4) должно воспроизводить экспериментальные зависимости  $D(U) = A + BU$  из [5, 6] для некоторых начальных плотностей RDX. Коэффициенты  $A$  и  $B$  приведены в табл. 1. Для плотности ВВ 1,6 г/см<sup>3</sup> эти коэффициенты относятся к флегматизированному RDX и получены из рис. 8.30 в [6]. На рис. 1 и 2 приведены расчетные зависимости  $D(U)$ , полученные из решения системы (2) при значениях  $\rho_{00}$  из табл. 1 с использованием соотношений (3), (4) с указанными для них параметрами.

Видно, что используемое уравнение состояния хорошо описывает зависимость  $D(U)$  при  $\rho_{00} = 1,6$  г/см<sup>3</sup>, несколько хуже — при  $\rho_{00} = 1,82$  г/см<sup>3</sup>. Так, при  $U \approx 2,0 \div 3,0$  км/с расхождение для скорости волны детонации достигает  $\approx 1,0$  км/с. Но именно эта область массовых скоростей представляет интерес для

расчета критической плотности ВВ  $\rho_{cr}$ . Совпадение же результатов расчета и эксперимента при  $\rho_{00} = 1,0$  г/см<sup>3</sup> неудовлетворительное.

На рис. 3 приведены результаты расчетов зависимости скорости волны детонации от начальной плотности ВВ  $\rho_{00}$ , полученные из решения системы (1) с уравнением состояния JWL для RDX с указанными для них константами. Экспериментальные точки взяты из [5, 6] и приведены в табл. 2. Хорошее согласие результатов расчета с экспериментом на рис. 3, в том числе в диапазоне  $\rho_{00} \approx 1,7 \div 1,8$  г/см<sup>3</sup>, свидетельствует о применимости уравнения состояния для продуктов взрыва RDX в форме JWL для анализа поведения газодинамических величин в окрестности критической плотности ВВ.

Теперь рассмотрим поведение массовой скорости на фронте волны детонации в точке Неймана и в точке Жуге. Этот вопрос исследовался в экспериментах [1–3].

На рис. 4 показаны результаты расчетов

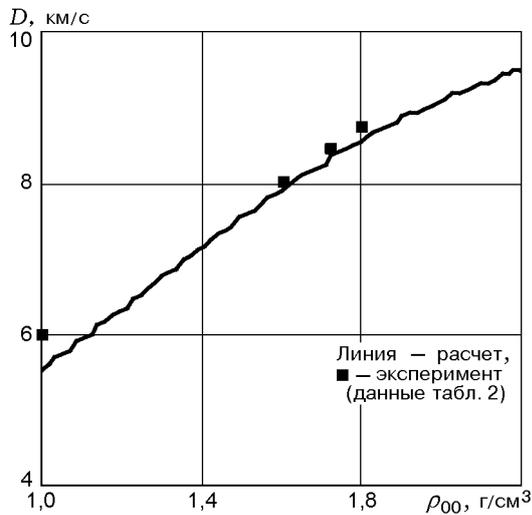


Рис. 3. Зависимость скорости волны детонации от начальной плотности ВВ

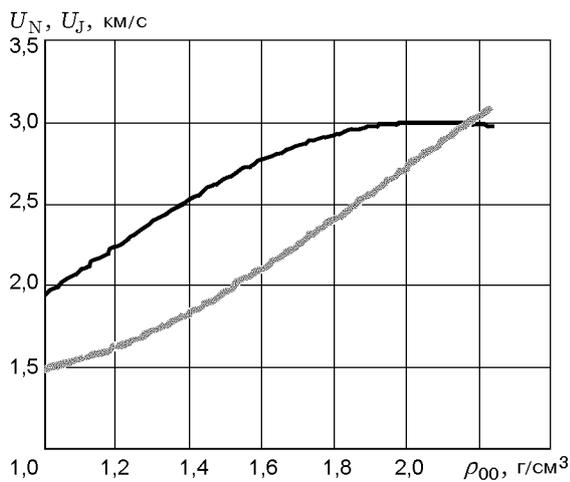


Рис. 4. Поведение массовых скоростей в точках Неймана (верхняя кривая) и Жуге (нижняя кривая) при изменении начальной плотности ВВ (уравнения (1), (2))

массовых скоростей в точках Неймана и Жуге при изменении  $\rho_{00}$ , которые получены из решения уравнений (1) и (2). Подтверждается сделанное выше утверждение, что при снижении начальной плотности ВВ параметр  $N = U_N(\rho_{00})/U_J(\rho_{00})$  возрастает, а при увеличении начальной плотности снижается и при некотором значении  $\rho_{cr}$  реализуется значение  $N = 1,0$ , т. е. профиль детонационной волны в зоне химических реакций превращается в «полочку» без ярко выраженного пика Неймана.

Как следует из рис. 4, при расчете с при-

менением уравнения состояния для ВВ в форме (3), (4) и уравнения состояния для продуктов взрыва в форме JWL с указанными константами оказалась, что  $\rho_{cr} = 2,169 \text{ г/см}^3$ , при этой плотности  $U_{cr} = 2,99 \text{ км/с}$ . Увеличение критической плотности ВВ в расчете по сравнению со значением из экспериментов [1, 2] связано, скорее всего, с неточностью уравнения состояния для ВВ.

Можно вопрос поставить иначе: необходимо подобрать константы уравнения состояния ВВ (в данном случае для RDX) так, чтобы по возможности максимально точно описать экспериментальные зависимости  $D(U)$  для ряда значений  $\rho_{00}$  и правильно описать точку экспериментально зафиксированной критической плотности ВВ  $\rho_{cr} = 1,72 \text{ г/см}^3$ . Эта программа была реализована при использовании уравнения состояния для RDX в форме JWL с константами  $\rho_0 = 1,6 \text{ г/см}^3$ ,  $A = 215\,000 \text{ ГПа}$ ,  $B = -7,68 \text{ ГПа}$ ,  $R_1 = 13,1$ ,  $R_2 = 2,0$ ,  $\omega_1 = 1,0$ ,  $c_{v1} = 2,01 \cdot 10^{-3} \text{ ГПа/(см}^3 \cdot \text{К)}$ ,  $T_0 = 298,3 \text{ К}$ . Расчетные параметры в точках Неймана и Жуге составили  $p_N = 31,7 \text{ ГПа}$ ,  $U_N = 2,5 \text{ км/с}$ ,  $\rho_N = 2,34 \text{ г/см}^3$ ,  $p_J = 26,5 \text{ ГПа}$ ,  $U_J = 2,094 \text{ км/с}$ ,  $\rho_J = 2,176 \text{ г/см}^3$ , расчетное значение критической плотности ВВ  $\rho_{cr} = 1,718 \text{ г/см}^3$ , а значения газодинамических величин в этой точке —  $p'_{cr} = 32,6 \text{ ГПа}$ ,  $U'_{cr} = 2,287 \text{ км/с}$ ,  $\rho'_{cr} = 2,37 \text{ г/см}^3$ . На рис. 5 показаны результаты расчетов массовых скоростей в точках Неймана и Жуге, полученные из решения системы (1), (2) с уравнениями состояния JWL для ВВ и продуктов взрыва с указанными значениями констант.

Данная система констант для RDX лучше описывает экспериментальные зависимости  $D(U)$ , чем система констант, приведенная после формул (3), (4). Как видно из рис. 6, улучшилось совпадение экспериментальных и расчетных кривых  $D(U)$  при  $\rho_{00} = 1,0 \text{ г/см}^3$ , по-прежнему хорошее совпадение наблюдается при  $\rho_{00} = 1,6 \text{ г/см}^3$  и осталось, как и прежде, расхождение кривых при  $\rho_{00} = 1,82 \text{ г/см}^3$ .

В [9] на рис. 16 приведена экспериментальная диаграмма давления в точке Жуге для гексогена в зависимости от начальной плотности ВВ. Из диаграммы видно, что  $p_J = 31,0 \div 32,5 \text{ ГПа}$  при  $\rho_{00} = 1,72 \text{ г/см}^3$ . Выше указано расчетное значение этого давления  $p_{cr} = 32,6 \text{ ГПа}$ . Наблюдается вполне приемлемое согласие расчетной величины с экспериментальной.

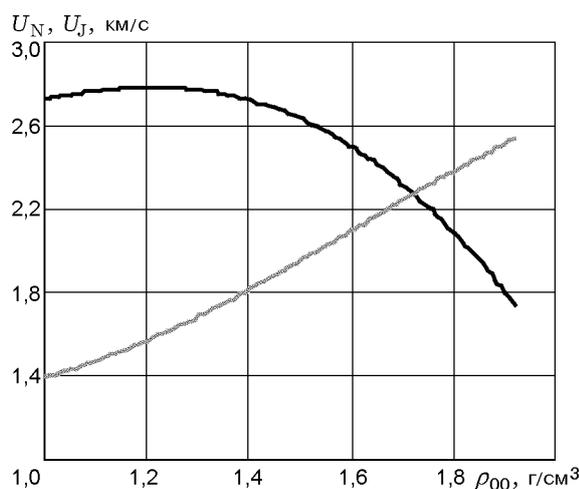


Рис. 5. Поведение массовых скоростей в точках Неймана (верхняя кривая) и Жуге (нижняя кривая) при изменении начальной плотности ВВ (уравнения состояния JWL для ВВ и продуктов взрыва):

точка пересечения кривых определяет критическую начальную плотность ВВ  $\rho_{cr} = 1,718 \text{ г/см}^3$

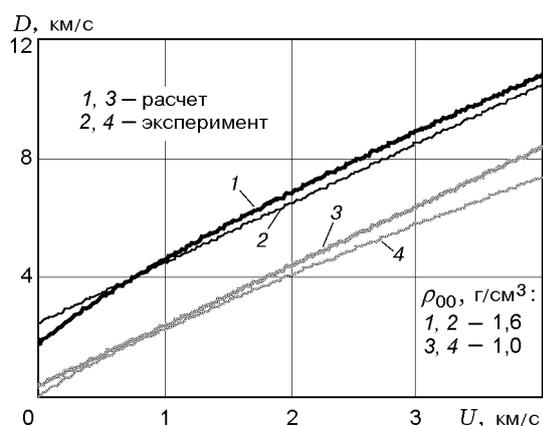


Рис. 6. Зависимость скорости волны детонации от массовой скорости при различных значениях начальной плотности ВВ

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ ОКТОГЕНА (НМХ)

В [1, 2] было найдено, что значение критической плотности для ВВ на основе октогена составляет  $1,82 \text{ г/см}^3$ . Близкое значение для ВВ на основе НМХ можно получить из решения системы (1), (2), если воспользоваться константами для уравнений состояния РВХ 9501 и продуктов его взрыва в форме JWL из [10].

На рис. 7 показаны результаты расчетов массовых скоростей в точках Неймана и Жуге

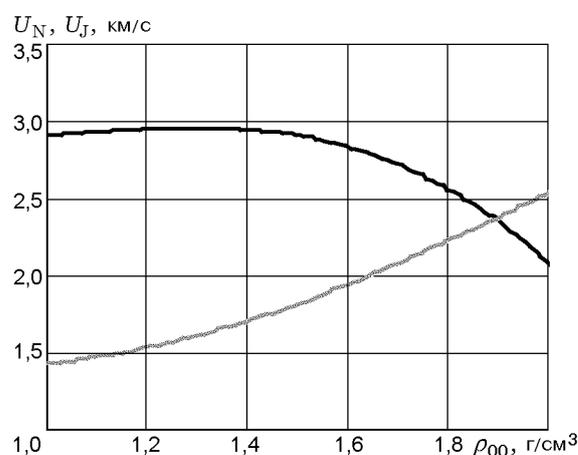


Рис. 7. Поведение массовых скоростей в точках Неймана (верхняя кривая) и Жуге (нижняя кривая) при изменении начальной плотности РВХ 9501 (уравнения состояния JWL для ВВ и продуктов взрыва с константами из [10])

при изменении начальной плотности ВВ, которые получены из решения уравнений (1) и (2) с уравнениями состояния JWL для ВВ и продуктов взрыва с константами из [10]. Расчетное значение критической плотности РВХ 9501 ( $\rho_{cr} = 1,894 \text{ г/см}^3$ ) отличается от экспериментального значения ( $\rho_{cr} = 1,82 \text{ г/см}^3$ ) примерно на 4 %.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что для объяснения особенностей профиля массовой скорости в зоне химической реакции при увеличении начальной плотности ВВ, при котором происходит ликвидация характерного классического «химического пика», нет необходимости привлекать предположение о возрастающем вкладе экзотермического разложения ВВ на ударном скачке. Полученные результаты можно объяснить, оставаясь в рамках классической теории Зельдовича — Неймана — Дёринга с обычным ударным скачком на фронте детонационной волны и, соответственно, с практически нулевым вкладом в полное энергосодержание в зоне реакции на этом скачке. Для этого достаточно принять во внимание возможность пересечения ударных и детонационных адиабат ВВ и продуктов взрыва в плоскости «давление — удельный объем».

В работе показано, что при некоторой доработке уравнения состояния для RDX удает-

ся достаточно точно воспроизвести полученное в экспериментах значение критической начальной плотности RDX, при котором фиксируется профиль зоны химической реакции в волне детонации в виде «полочки». Для получения аналогичных результатов для ВВ на основе НМХ практически даже нет необходимости уточнять константы уравнений состояний ВВ и продуктов взрыва. Константы уравнений состояний JWL для PBX 9501 из [10] с 4 %-й точностью воспроизводят критическую плотность НМХ.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Utkin A. V., Kolesnikov S. A., Pershin S. V., and Fortov V. E.** Reaction zone transformation for steady-state detonation of high explosives under initial density increase // Shock Compression of Condensed Matter-2001. P. 938.
2. **Utkin A. V., Kolesnikov S. A., Pershin S. V., and Fortov V. E.** Influence of initial density on the reaction zone for steady-state detonation of high explosives // Papers of 12th Intern. Detonation Symp. August 11–16, 2002. San Diego, California 92101.
3. **Ananin A. V., Utkin A. V., Pershin S. V.** Reaction zone of steady-state detonation waves in dinitrodiazapentane // Papers of Intern. Conf. Shock Waves in Condensed Matter. Saint-Petersburg, Russia, 1–6 September, 2002. P. 59.
4. **Кузьмицкий И. В.** Структура зоны химической реакции в стационарной пересжатой волне детонации // Хим. физика. 2002. Т. 21, № 8. С. 91.
5. **Физика взрыва** / Под ред. Л. П. Орленко. 3-е изд., перераб. М.: Физматлит., Т. 1. 2002.
6. **Ударно-волновые явления в конденсированных средах** / Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортов М.: Янус-К, 1996.
7. **Tarver C. M. and McGuire E. M.** Reactive flow modeling of the interaction of TATB detonation waves with inert materials // Papers of 12th Intern. Detonation Symp. August 11–16, 2002. San Diego, California 92101.
8. **Ахмадеев Н. Х.** Моделирование детонационных волн в твердых ВВ // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 1. С. 109–118.
9. **Альтшулер Л. В., Доронин Г. С., Жученко В. С.** Режимы детонации и параметры Жуге конденсированных взрывчатых веществ // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25, № 2. С. 84–103.
10. **Chidester S. K., Tarver C. M., Garza R. G.** Low amplitude impact testing and analysis of pristine and aged solid high explosives // Papers of 11th Intern. Detonation Symp., 1998, Snowmass Village, Colorado 81615. P. 331.

*Поступила в редакцию 24/III 2003 г.,  
в окончательном варианте — 6/XI 2003 г.*