

УДК 544.032.65;536.421.1

## МИКРООЧАГОВАЯ МОДЕЛЬ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ ПЛАВЛЕНИЯ

Б. П. Адуев<sup>1</sup>, М. В. Ананьева<sup>2</sup>, А. А. Звеков<sup>1</sup>, А. В. Каленский<sup>2</sup>,  
В. Г. Кригер<sup>2</sup>, А. П. Никитин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт углекислоты и химического материаловедения СО РАН, 650000 Кемерово, zvekova@gmail.com

<sup>2</sup>Кемеровский государственный университет, 650043 Кемерово, kriger@kemsu.ru

Исследована микроочаговая модель лазерного инициирования взрывного разложения, учитывающая плавление матрицы энергетического материала и содержащегося в ее объеме нанометаллического включения. Исследованы закономерности разогрева наночастицы в инертной матрице, построена зависимость максимальной температуры на поверхности включения от его радиуса. Показано, что процессы плавления приводят к уменьшению максимальной температуры нагрева и незначительному изменению радиуса наиболее прогретой наночастицы. Рассчитаны зависимости критической плотности энергии инициирования взрывного разложения пентаэритрит-тетранитрата (тэна) с наночастицами алюминия от радиуса включения с учетом и без учета плавления. При учете плавления модель дает повышенные значения критической плотности энергии инициирования взрывного разложения. В случае включений большого радиуса формирование очага реакции взрывного разложения происходит раньше полного плавления металлического включения, что приводит к его затвердеванию на стадии индукционного периода.

Ключевые слова: микроочаговая модель, тепловой взрыв, лазерное излучение, плавление, тэн.

### ВВЕДЕНИЕ

Микроочаговая модель инициирования взрывного разложения лазерным излучением [1–4] основана на предположении, что в объеме прозрачного энергетического материала находятся включения, эффективно поглощающие лазерное излучение. Предполагается, что основным следствием поглощения света включениями является их нагрев (без плавления и испарения), приводящий к увеличению температуры окружающего энергетического материала и образованию очага самоподдерживающейся экзотермической реакции. Первоначально модель была предложена для объяснения закономерностей низкопорогового инициирования взрывного разложения азидов тяжелых металлов импульсным лазерным излучением [1, 2]. Для низкопорогового инициирования взрывного разложения азидов серебра предложен альтернативный механизм развет-

вленной твердофазной цепной реакции разложения, позволяющий количественно объяснить ряд наблюдаемых закономерностей [5–7].

В работах [4, 8–11] показано, что добавки сильнопоглощающих наноразмерных включений сажи, алюминия и карбида алюминия позволяют снизить критическую плотность энергии лазерного инициирования пентаэритрит-тетранитрата (тэна). Это доказывает, что малые включения могут быть центрами поглощения световой энергии в объеме вторичных взрывчатых веществ. Показана принципиальная возможность использования вторичных взрывчатых веществ, содержащих наноразмерные примеси, в качестве капсульных составов для оптических систем инициирования. Для направленного поиска материала и размерных параметров вводимых добавок, позволяющих получить наименьшие пороги лазерного инициирования, необходимо провести моделирование данного процесса с учетом ряда свойств материалов, считавшихся ранее несущественными. В рамках теории Ми рассчитаны значения коэффициентов эффективности поглощения света включениями различных металлов в тэне. Показано, что наряду с плотностью энергии лазерного импульсного излуче-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 14-03-00534 а, 13-03-98032 р\_сибирь\_а) и Министерства образования и науки РФ (госзадание № 2014/64).

© Адуев Б. П., Ананьева М. В., Звеков А. А., Каленский А. В., Кригер В. Г., Никитин А. П., 2014.

ния решающее влияние на максимальную температуру разогрева включения оказывает эффективность поглощения [11, 12]. Следующим этапом развития микроочаговой модели лазерного инициирования является учет фазовых переходов материалов включения и матрицы, так как температуры, необходимые для образования очага взрывного разложения, превышают 1000 К [1–3] и выше температур плавления энергетических материалов и металлов [13, 14].

Цель работы — формулировка и исследование микроочаговой модели лазерного инициирования самоускоряющегося разложения энергетических материалов в окрестности металлических наночастиц с учетом процессов плавления.

### МИКРООЧАГОВАЯ МОДЕЛЬ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ С УЧЕТОМ ПЛАВЛЕНИЯ

Система дифференциальных уравнений, описывающая процессы кондуктивного теплопереноса во включении и в среде с реакцией экзотермического разложения, для сферической симметрии имеет вид [1–3]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{Q}{c} k_0 n \exp \left( -\frac{E}{k_B T} \right), \quad x > R,$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -k_0 n \exp \left( -\frac{E}{k_B T} \right), \quad x > R, \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_{met} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad x < R,$$

где  $T$  — температура,  $n$  — доля неразложившегося взрывчатого вещества,  $\alpha$  и  $\alpha_{met}$  — коэффициенты температуропроводности материалов матрицы и включения,  $R$  — радиус включения,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $E$  — энергия активации,  $Q$  — тепловой эффект разложения,  $k_0$  — предэкспонент,  $c$  — объемная теплоемкость взрывчатого вещества.

Начальные условия для приведенной системы уравнений:

$$T = 300 \text{ К}; \quad r = R; \quad r_{met} = R;$$

$$n = 1, \quad x \geq R; \quad n = 0, \quad x < R,$$

где  $r$  и  $r_{met}$  — положение фронта плавления в энергетическом материале и металле.

Использование сферической симметрии связано с особенностями взаимодействия света с прессованными образцами энергетических материалов. Для прессованных порошков тэна коэффициент диффузного отражения на длине волны 1064 нм составляет 0.88 [4], поэтому падающий в образец свет претерпевает многократные отражения на границах зерен. При не слишком высокой концентрации включений можно считать, что каждый квант света испытал перед поглощением несколько актов отражения [2]. В силу хаотичности актов отражения [4] происходит осреднение освещенности по направлениям, что и позволяет использовать (как и в работах [1–3]) в расчетах сферическую симметрию. Предполагалось, что включение поглощает всю падающую на его поверхность энергию излучения [1–3].

На границе включение — матрица  $x = R$  происходит поглощение излучения, что приводит к следующему граничному условию:

$$J - c_{met} \alpha_{met} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R-0} + c \alpha \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R+0} = 0, \quad (2)$$

где  $c$  и  $c_{met}$  — объемная теплоемкость материалов матрицы и включения,  $J(t)$  — поглощаемая плотность мощности излучения лазерного импульса. На границе рассматриваемой области (включение и слой энергетического материала толщиной  $8R$ ) ставилось условие первого рода  $T = 300 \text{ К}$ .

Движение фазовой границы рассматривалось как квазихимическая реакция перемещения атомов из одной фазы в другую. Скорость перемещения фазовой границы определялась по уравнению, подобному кинетическому уравнению для продукта обратимой реакции типа  $A \leftrightarrow B$  [15, 16]:

$$v = \gamma \frac{k_B T}{hL^{1/3}} \left\{ \exp \left[ -\frac{\Delta H_m^{met}}{k_B} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right) \right] - 1 \right\}. \quad (3)$$

Здесь  $\Delta H_m^{met}$  — энтальпия плавления,  $T_m$  — температура плавления,  $T$  — температура на границе твердой и жидкой фаз,  $h$  — постоянная Планка,  $L$  — число Лошмидта,

$$\gamma = \exp \left( \frac{\Delta S_{l \rightarrow s}^\ddagger}{k_B} - \frac{\Delta H_{l \rightarrow s}^\ddagger}{k_B T} \right),$$

где  $\Delta S_{l \rightarrow s}^\ddagger$  и  $\Delta H_{l \rightarrow s}^\ddagger$  — энтропия и энтальпия активации перехода молекулы из жидкой

фазы в твердую. При применении выражения (3) температуру на фазовой границе вычисляли при помощи линейной интерполяции значений температуры в ближайших к ней ячейках. В работе [16] сделана оценка множителя  $\gamma$  в (3):  $\gamma = 0.1$ . Это значение, соответствующее отсутствию активационного барьера и отрицательной энтропии активации, использовалось в расчетах.

Моделирование проводили при следующих значениях параметров:  $\alpha = 1.1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$  (тэн),  $\alpha_{met} = 0.973 \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$  (алюминий);  $c = 2.22 \text{ Дж/см}^3$ ,  $c_{met} = 2.7 \text{ Дж/см}^3$  [13, 14, 17]; температура и энтальпия плавления составляли: для включения —  $T_m^{met} = 933.5 \text{ К}$  и  $\Delta H_m^{met} = 10.75 \text{ кДж/моль}$  [14], для матрицы —  $T_m = 413 \text{ К}$  и  $\Delta H_m = 60.67 \text{ кДж/моль}$  [13] соответственно;  $E = 1.7 \text{ эВ}$ ;  $Q = 9640 \text{ Дж/см}^3$ ;  $k_0 = 10^{16} \text{ с}^{-1}$  [18]. Для величины  $J(t)$  использовалось выражение [5], в котором в качестве начала отсчета времени принято положение максимальной интенсивности импульса:

$$J(t) = \frac{k_i H_0}{\sqrt{\pi}} \exp(-k_i^2 t^2), \quad (4)$$

где  $k_i = 8.325 \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$  — параметр, определяющий длительность импульса (соответствует длительности импульса на полувысоте  $2\sqrt{\ln 2}/k_i = 20 \text{ нс}$ );  $H_0$  — плотность энергии в импульсе. Возможность описания выражением (4) временной зависимости плотности мощности излучения отмечалась в работе [19].

Численное решение уравнений модели (1)–(4) выполнялось на сетке с переменным шагом по координате. Для включений размером  $R \geq 30 \text{ нм}$  шаг в окрестностях включения не превышал  $1/20$  толщины прогрегого за время импульса инертного вещества ( $\sqrt{2\alpha/k_i}$ ), далее размер ячейки увеличивался по закону геометрической прогрессии таким образом, чтобы суммарная толщина слоя окружающего материала была не менее  $8R$ . При использованной длительности импульса длина прогрега составляла  $\approx 50 \text{ нм}$ , размер ячеек около включения  $\approx 2.5 \text{ нм}$ . Соответственно характерное время выравнивания температуры между двумя соседними ячейками равнялось  $t_1 = 57 \text{ пс}$ . Поэтому используемая сетка достоверно описывает теплофизические процессы вплоть до температуры  $\frac{E}{k_B \ln(k_0 t_1)} \approx 1500 \text{ К}$ . Формирование очага реакции происходит при значительно

меньшей температуре, что позволяет использовать настоящую методику для численного решения уравнений модели (1)–(4). Шаг сетки внутри включения превышал шаг снаружи в  $\sqrt{\alpha_{met}/\alpha}$  раз. Данная методика позволяет корректно учитывать поглощение света при помощи граничного условия (2) [16].

Полученная после разбиения пространства на ячейки система обыкновенных дифференциальных уравнений решалась методом Рунге — Кутты 1–5-го порядков с переменным шагом по времени. Относительная погрешность на шаге интегрирования не превышала  $10^{-9}$ , при этом интегральная относительная погрешность, оцениваемая по точности выполнения закона сохранения энергии, была не выше  $2.5 \cdot 10^{-5}$ .

Радиус наиболее опасного включения рассчитывали следующим образом. По модели (1)–(4) определялась критическая плотность энергии при нескольких значениях радиуса наночастицы. Далее проводилась квадратичная интерполяция полученных результатов для оценки положения минимума. После этого рассчитывалась критическая плотность энергии в окрестности минимума. Процедуру повторяли до тех пор, пока точность определения координаты минимума не достигала  $1 \text{ нм}$ .

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО НАГРЕВА ВКЛЮЧЕНИЯ В ИНЕРТНОЙ СРЕДЕ

На рис. 1 представлена зависимость температуры на поверхности включения радиусом  $50 \text{ нм}$  от времени при плотности энергии  $H = 0.1 \text{ Дж/см}^2$  с учетом и без учета плавления. Из рисунка следует, что плавление, требующее дополнительных затрат энергии, приводит к уменьшению максимальной температуры разогрева. Кроме того, на зависимости  $I$  наблюдаются участки медленного изменения температуры, что связано с фазовыми превращениями. Данных участков три: плавление и затвердевание материала включения (в окрестности температуры  $933 \text{ К}$ ), затвердевание матрицы (около температуры  $415 \text{ К}$ ). На рис. 2 представлены зависимости максимальной температуры на поверхности включения от его радиуса, рассчитанные при плотности энергии  $0.15 \text{ Дж/см}^2$ , с учетом и без учета плавления. При учете плавления максимум на зависимости наблюдается при радиусе включения  $63.3 \text{ нм}$ , а без учета плавления —  $72.5 \text{ нм}$ . При меньших и больших

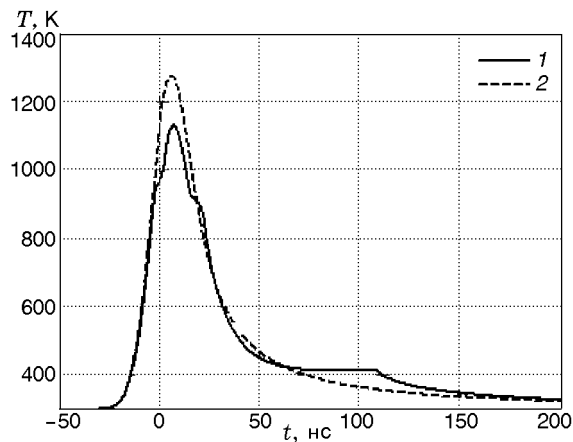


Рис. 1. Зависимость температуры на поверхности включения радиусом 50 нм, нагреваемого лазерным излучением плотностью  $H = 0.1 \text{ Дж/см}^2$ :

1 — при учете плавления, 2 — при пренебрежении плавлением

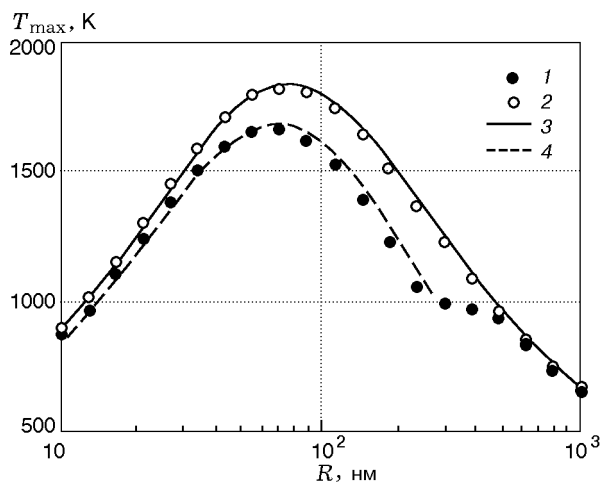


Рис. 2. Зависимость максимальной температуры нагрева на поверхности включений при плотности энергии  $0.15 \text{ Дж/см}^2$  от их радиуса:

1 — численное моделирование при учете плавления, 2 — численное моделирование без учета плавления, 3 — расчет по выражению (6), 4 — расчет по выражению (5)

радиусах максимальная температура нагрева уменьшается.

Для описания кривой 2 на рис. 2 в работах [12, 16] предложено приближенное выражение

$$T_{\max} = T_0 + \frac{HR/4c}{R\xi_1\sqrt{2\alpha/k_i} + \xi_1^2 2\alpha/k_i + c_{\text{met}}R^2 3c}, \quad (5)$$

где  $\xi_1$  — варьируемый параметр порядка единицы. Результат аппроксимации приведен на рис. 2 (кривая 4),  $\xi_1 = 0.9388$ .

Максимум на зависимости наблюдается при  $R(T_{\max}) = \xi_1\sqrt{3c/c_{\text{met}}}\sqrt{2\alpha/k_i}$ . Существование оптимального размера включения, имеющего максимальную температуру нагрева лазерным импульсом, постулировалось еще в работе [1] и косвенно подтверждается последними экспериментальными результатами [9–11].

Качественно близкая зависимость максимальной температуры от радиуса включения наблюдается и при учете процессов плавления. Фазовые переходы приводят к уменьшению максимальной температуры (см. рис. 2). В предельных случаях — большие и малые включения — зависимости практически совпадают. Кроме того, на зависимости, рассчитанной с учетом плавления, имеется пологий участок (плечо), связанный с неполным расплавлением больших включений. Если включение расплавлялось полностью во время лазерного нагрева, разность температур между случаями с плавлением и без него увеличивается при росте радиуса включения. Включения большого радиуса не плавятся, так как при большом радиусе включения, обладающего высокой теплопроводностью, температура включения низка.

По аналогии с уравнением (5) для описания среднего участка кривой 1 на рис. 2 можно предложить выражение

$$T_{\max} = T_0 + \frac{1}{c} \left[ \frac{HR}{4} - \frac{\Delta H_m^{\text{met}} R^2}{3} - \Delta H_m \left( R\xi_2\sqrt{\frac{2\alpha}{k_i}} + \xi_2^2 \frac{2\alpha}{k_i} \right) \right] / \left( R\xi_1\sqrt{\frac{2\alpha}{k_i}} + \xi_1^2 \frac{2\alpha}{k_i} + \frac{c_{\text{met}}R^2}{3c} \right). \quad (6)$$

В данной формуле предполагается, что включение расплавлено полностью и толщина слоя расплавленной матрицы пропорциональна длине прогрева. Результат аппроксимации рассчитанной зависимости уравнением (6) приведен на рис. 2 (кривая 3) при том же значении  $\xi_1$  и при  $\xi_2 = 0.4971$ . Максимальный нагрев характерен для включений радиусом

$$R(T_{\max}) = \xi_1\sqrt{\frac{3c}{c_{\text{met}}}}\sqrt{\frac{2\alpha}{k_i}}[M - N], \quad (7)$$

где

$$M = \left\{ \left[ 1 - 4\Delta H_m \xi_2 (\xi_1 - \xi_2) \frac{\sqrt{2\alpha/k_i}}{\xi_1 H} \right] / \right. \\ \left. / \left[ 1 - \frac{4\sqrt{2\alpha/k_i} (\Delta H_m \xi_2 - \Delta H_m^{met} \xi_1 c / c_{met})}{H} \right] \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$N = \sqrt{\frac{c_{met}}{3c}} \times \\ \times \frac{\Delta H_m^{met} c \xi_1 / c_{met} - \Delta H_m \xi_2^2 / \xi_1}{H / (4\sqrt{2\alpha/k_i}) - \Delta H_m \xi_2 + \Delta H_m^{met} c \xi_1 / c_{met}}.$$

Разность  $[M - N]$  немного меньше единицы. Например, для приведенных на рис. 2 кривых  $[M - N] = 0.893$ . То есть учет плавления не только приводит к уменьшению амплитуды максимума, но и к его сдвигу в область меньших радиусов. Наблюдаемый сдвиг связан с большей теплотой плавления материала включения по сравнению с матрицей, что приводит к значениям  $M \approx 1$  и  $N \approx 0.1$ .

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ

В рамках модели (1)–(4) проведен расчет критических значений плотности энергии иницирования и выполнено моделирование динамики образования очага реакции. На рис. 3 приведены зависимости критической плотности энергии иницирования ( $H_{cr}$ ) от радиуса включений алюминия в матрице тэна при длительности импульса 20 нс, рассчитанные с учетом и без учета плавления. Разница в значениях критической плотности энергии, полученных без учета плавления и с учетом, увеличивается при росте радиуса включения. Это естественно объясняется тем, что для расплавления включения большего объема требуется больше энергии. Как и в отсутствие плавления, на кривой наблюдается минимум в области  $R = 50 \div 100$  нм, связанный с тем, что в данный промежуток попадает наиболее разогретое импульсом включение. Минимум на зависимостях с плавлением и без него наблюдается при радиусах включения 61.6 и 75.7 нм соответственно. Минимальные значения критической плотности энергии составляют 0.09036 и 0.07077 Дж/см<sup>2</sup> в каждом из случаев.

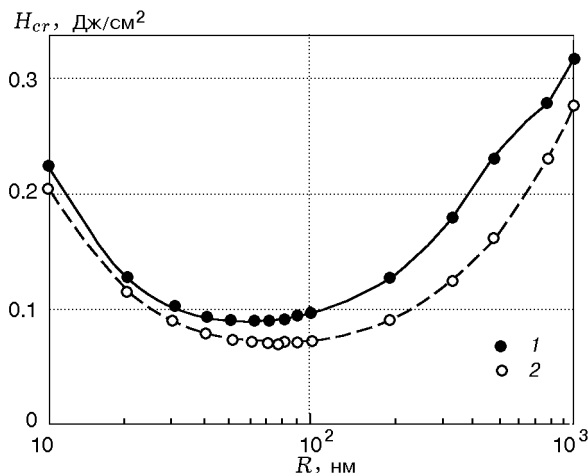


Рис. 3. Зависимость критической плотности энергии импульса от радиуса включения при длительности импульса 20 нс:

1 — с учетом плавления, 2 — без учета плавления

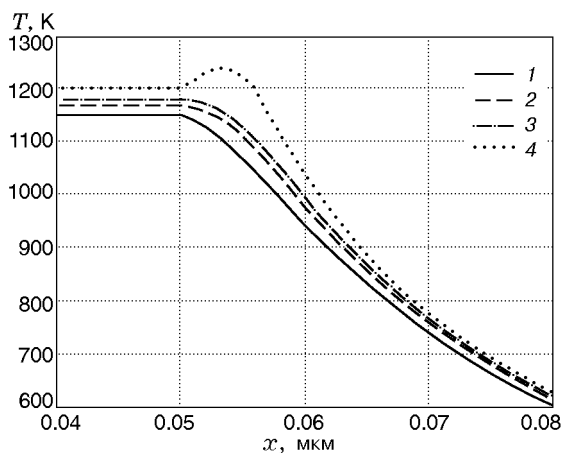


Рис. 4. Распределение температуры в моменты времени 14 нс (1), 15 нс (2), 15.25 нс (3), 15.5 нс (4) ( $t = 0$  соответствует максимуму импульса) при  $R = 50$  нм и пороговой интенсивности воздействия

Распределения температуры во включении радиусом  $R = 50$  нм и взрывчатом веществе, иллюстрирующие образование очага реакции, при пороговой интенсивности воздействия (0.09134 Дж/см<sup>2</sup>) в моменты времени 14, 15, 15.25 и 15.5 нс приведены на рис. 4. Образование очага реакции разложения происходит на расстоянии  $\approx 3$  нм от поверхности из-за большой теплоемкости включения, не позволяющей температуре расти на поверхности. Аналогичная закономерность наблюдается и без учета плавления [2].

Результаты расчета для включений радиусом 50 и 1000 нм при пороговой интенсивности воздействия приведены на рис. 5, 6 и 7, 8 соответственно.

Рассмотрим особенности кинетики зажигания, возникающие при учете плавления матрицы и алюминиевого включения. При малом радиусе включения наблюдается непрерывное возрастание температуры (см. рис. 6), сопровождаемое убылью неразложившегося взрывчатого вещества. На зависимости положения фазовых границ от времени видно понижение скорости проплавления взрывчатого вещества

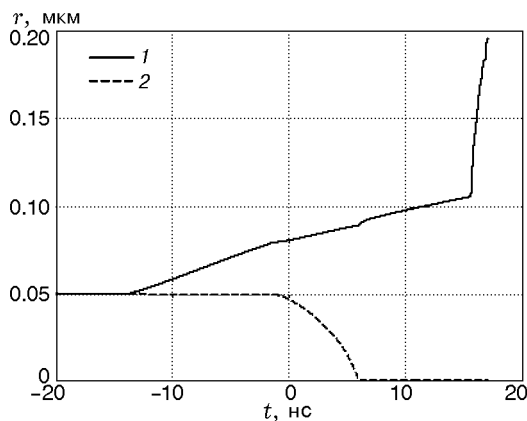


Рис. 5. Зависимость положения фазовых границ от времени при пороговой плотности энергии и радиусе включения 50 нм:

1 — граница во взрывчатом веществе, 2 — во включении

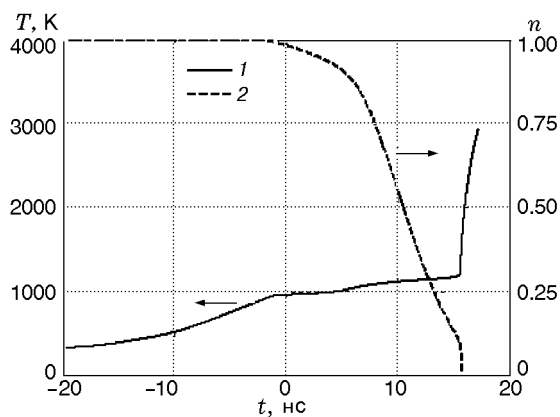


Рис. 6. Кинетика инициирования реакции при пороговой плотности энергии и радиусе включения 50 нм:

1 — температура на поверхности включения, 2 — доля неразложившегося взрывчатого вещества на границе с включением

после начала плавления включения. Переход к самоускоряющемуся режиму разложения происходит после полного расплавления включения радиусом 50 нм (см. рис. 5, 6). Фазовый переход является быстрым средством диссипации энергии внешнего воздействия. Из этого следует увеличение критической плотности энергии инициирования. Плавление взрывчатого вещества приводит также к дополнительным теплотерям из образующегося очага реакции. Уменьшение запаса тепла в очаге в единицу времени, связанное с плавлением, равно  $4\pi r_m^2 \Delta H_m v$ , где  $r_m$  — положение фронта плавления во взрывчатом веществе,  $v$  — линейная скорость движения фронта плавления. Величина  $r_m$  является суммой радиуса включения и толщины проплавленного слоя, поэтому скорость теплотерь из очага за счет плавления увеличивается при росте радиуса включения. Изложенные рассуждения на качественном уровне объясняют более сильный сдвиг экстремума на зависимости критической плотности энергии от радиуса включения по сравнению с зависимостью максимальной температуры нагрева в инертной среде.

Для включения радиусом 1000 нм на кинетической зависимости температуры на поверхности включения от времени наблюдается локальный максимум, совпадающий с окончанием импульса излучения. Как следует из рис. 7, энергии импульса на пороге инициирования достаточно для начала плавления вклю-

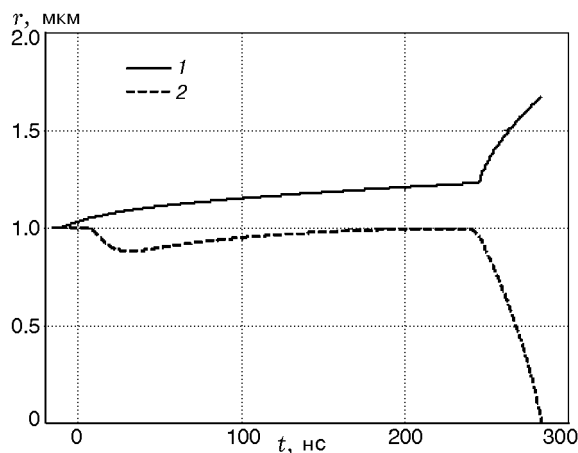


Рис. 7. Зависимость положения фазовых границ от времени при пороговой плотности энергии и радиусе включения 1000 нм:

1 — граница во взрывчатом веществе, 2 — во включении

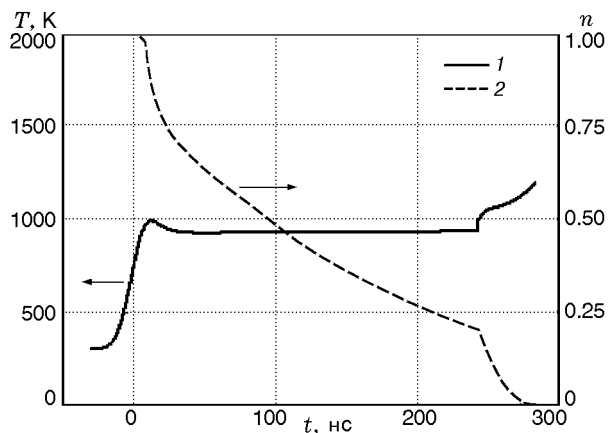


Рис. 8. Кинетика инициирования реакции при пороговой плотности энергии и радиусе включения 1 000 нм:

1 — температура на поверхности включения, 2 — доля неразложившегося взрывчатого вещества на границе с включением

чения. На начальном этапе плавление требует дополнительных энергозатрат и приводит к понижению температуры системы. Однако по мере остывания включения фазовая граница может начать двигаться в обратном направлении. Выделяющееся при этом тепло будет способствовать «консервации» температуры (см. рис. 8). После этого вещество начинает остывать, но температура в окрестности включения остается практически постоянной из-за тепловыделения при застывании материала включения и экзотермического разложения взрывчатого вещества (см. рис. 7, 8). К моменту почти полного замерзания включения в его окрестности разлагается достаточное количество взрывчатого вещества для перехода реакции в самоускоряющийся режим. Подобный эффект отсутствует в случае включений малого радиуса (см. рис. 5, 6), когда включение успевает полностью расплавиться до перехода разложения к взрывному режиму.

Следует отметить, что наличие двух режимов инициирования: с полностью расплавленным включением при малом его радиусе и с частично расплавленным включением и стадией затвердевания при большом радиусе включения — зависит от соотношения характерной температуры образования очага реакции и температуры плавления включения. Как видно из представленных результатов, ситуация с двумя режимами реализуется для включений алюминия, поскольку его температура плавления

(933 K) близка к характерной температуре перехода реакции в очаге разложения в самоускоряющийся режим ( $\approx 1\,000$  K). В случае, например, включений свинца (температура плавления 600 K) или никеля (температура плавления 1 728 K) может наблюдаться только один режим, поскольку их температуры плавления значительно отличаются от температуры очага в меньшую или большую сторону. На условия проявления режимов влияет также длительность инициирующего лазерного импульса, что требует дополнительного исследования.

Рассмотрим соответствие теоретических оценок и экспериментальных данных. Согласно последним [11] критическая плотность энергии лазерного инициирования прессованных таблеток тэна, содержащих 0.1 % наноалюминия (средний радиус включений 50 нм), излучением неодимового лазера с длиной волны 1 064 нм составляет 1.15 Дж/см<sup>2</sup> при длительности импульса 12 нс. Согласно оценкам по теории Ми включение алюминия такого радиуса поглощает 10.6 % энергии излучения с длиной волны 1 064 нм, падающего на его поверхность [11, 12]. С учетом корректировки на эффективность поглощения (см. рис. 3) оцененная плотность энергии равна 0.86 Дж/см<sup>2</sup>, что неплохо соответствует эксперименту.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализирована микроочаговая модель лазерного зажигания взрывчатых веществ в окрестности металлических включений, учитывающая процессы плавления. Проведены расчеты динамики нагрева и изменения положения фазовых границ при нагреве в инертной среде, построена зависимость максимальной температуры на поверхности включения от его радиуса. Показано, что плавление приводит к уменьшению максимальной температуры нагрева. Наиболее сильное отличие максимальных температур нагрева, рассчитанных с учетом процессов плавления и без них, наблюдается при больших радиусах включения, когда оно перестает полностью расплавляться под действием лазерного импульса.

Рассчитана критическая плотность энергии инициирования, и проведено моделирование динамики образования очага реакции. Учет плавления приводит к повышению критической плотности энергии. Выделены два режима зажигания при инициировании реакции

вблизи алюминиевого включения в тэне. Включения малых размеров полностью расплавляются до начала перехода разложения в самоускоряющийся режим. При больших включениях формирование очага происходит до того, как включения расплавились полностью, что приводит к появлению участка затвердевания до перехода к взрывному режиму. Наблюдаемые режимы возникают в случае, если температура плавления материала включения и характерные температуры образования очага реакции близки. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными.

Авторы выражают благодарность проф. В. М. Лисицину и проф. В. П. Ципилеву за полезные дискуссии.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Александров Е. И., Ципилев В. П. Исследование влияния длительности возбуждающего импульса на чувствительность азидов к действию лазерного излучения // Физика горения и взрыва. — 1984. — Т. 20, № 6. — С. 104–109.
2. Буркина Р. С., Морозова Е. Ю., Ципилев В. П. Иницирование реакционно-способного вещества потоком излучения при поглощении его неоднородностями вещества // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 5. — С. 95–105.
3. Ассовский И. Г. Физика горения и внутренняя баллистика. — М.: Наука, 2005.
4. Александров Е. И., Вознюк А. Г., Ципилев В. П. Влияние поглощающих примесей на зажигание ВВ лазерным излучением // Физика горения и взрыва. — 1989. — Т. 25, № 1. — С. 3–9.
5. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звеков А. А., Ананьева М. В., Боровикова А. П. Диффузионная модель разветвленной цепной реакции взрывного разложения азидов тяжелых металлов // Хим. физика. — 2009. — Т. 28, № 8. — С. 67–71.
6. Каленский А. В., Ананьева М. В., Кригер В. Г., Звеков А. А. Коэффициент захвата электронных носителей заряда на экранированном отталкивающем центре // Хим. физика. — 2014. — Т. 33, № 4. — С. 11–16.
7. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звеков А. А. Релаксация электронно-возбужденных продуктов твердофазной реакции в кристаллической решетке // Хим. физика. — 2012. — Т. 31, № 1. — С. 18–22.
8. Yang Y., Sun Z., Wang S., Dlott D. Fast spectroscopy of laser-initiated nanoenergetic materials // J. Phys. Chem. B. — 2003. — V. 107, N 19. — P. 4485–4493.
9. Адуев Б. П., Белокуров Г. М., Нурмухаметов Д. Р., Нелюбина Н. В. Светочувствительный материал на основе смеси тэна и наночастиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 3. — С. 127–132.
10. Адуев Б. П., Нурмухаметов Д. Р., Ципилев В. П., Фурега Р. И. Влияние добавок ультрадисперсных частиц Al—C на чувствительность тэна к лазерному воздействию // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 2. — С. 102–105.
11. Адуев Б. П., Нурмухаметов Д. Р., Фурега Р. И., Звеков А. А., Каленский А. В. Взрывчатое разложение тэна с нанодобавками алюминия при воздействии импульсного лазерного излучения различной длины волны // Хим. физика. — 2013. — Т. 32, № 8. — С. 39–42.
12. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звеков А. А., Зыков И. Ю., Адуев Б. П. Влияние эффективности поглощения лазерного излучения на температуру разогрева включений в прозрачных средах // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 6. — С. 54–58.
13. Физика взрыва: в 2 т / под ред. Л. П. Орленко. — М.: Физматлит, 2004. — Т. 1.
14. Рабинович В. Я., Хавин З. Я. Краткий химический справочник. — Л.: Химия, 1991.
15. Жвавый С. П. Моделирование процессов плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии наносекундного лазерного излучения // Журн. техн. физики. — 2000. — Т. 70, № 8. — С. 58–62.
16. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звеков А. А., Зыков И. Ю., Никитин А. П. Процессы теплопереноса при лазерном разогреве включений в инертной матрице // Теплофизика и аэромеханика. — 2013. — Т. 20, № 3. — С. 375–382.
17. Олинджер Б., Кейди Г. Ударная сжимаемость тэна, ТАТБ, CO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O при давлениях до 10 ГПа, рассчитанная на основании экспериментальных данных по гидростатическому сжатию // Детонация и взрывчатые вещества: сб. / под ред. А. А. Борисова. — М.: Мир, 1981. — С. 203–219.
18. Денисов Е. Т. Константы скорости гомолитических жидкофазных реакций. — М.: Наука, 1971.
19. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звеков А. А. Определение начала механического разрушения кристаллов азидов серебра, инициированных лазерным импульсом // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 1. — С. 69–72.

Поступила в редакцию 1/XII 2013 г.,  
в окончательном варианте — 24/III 2014 г.