

УДК 536.46

ИНИЦИИРОВАНИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ПОЛУПРОЗРАЧНОЙ СМЕСИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ИМПУЛЬСОМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. Г. Князева^{1,2}, В. Е. Зарко³¹Томский политехнический университет, 634050 Томск²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск³Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, 630090 Новосибирск
zarko@kinetics.nsc.ru

Предложена модель нагрева и разложения двухкомпонентной смеси энергетических материалов коротким лазерным импульсом, учитывающая плавление и формирование двухфазной зоны, а также реакции разложения индивидуальных компонентов смеси. В качестве модельной системы выбран бинарный раствор ФТДО ($C_2N_6O_3$) — ДНП ($C_3H_8N_4O_4$). Рассчитано изменение давления в реакционной зоне, и рассмотрено влияние давления на скорость реакций разложения. Численно исследована динамика процесса, выделены основные стадии: плавление, распространение зон реакции по смеси, быстрое развитие взрыва или прекращение реакций в зависимости от количества запасенной энергии. Продемонстрировано влияние оптических свойств смеси на динамику процесса инициирования.

Ключевые слова: инициирование, энергетические материалы, импульс лазерного излучения, двухкомпонентная смесь, двухфазная зона.

DOI 10.15372/FGV20180114

ВВЕДЕНИЕ

Иницирование химических реакций в энергетических материалах (ЭМ) импульсным лазерным излучением привлекает внимание исследователей многие десятилетия. С одной стороны, это обусловлено практическими нуждами в связи с разработкой светодетонаторов, обладающих высокой помехозащищенностью. С другой стороны, подобные исследования имеют непосредственное отношение к проблемам защиты от внешних воздействий энергетических материалов и их смесей в условиях хранения, транспортировки и переработки. Несмотря на большое число публикаций (см., например, [1–10]), остается нерешенным ряд вопросов, связанных с физическими механизмами инициирования реакций, стадийностью процессов, ведущей ролью различных явлений на разных стадиях распространения реакции при воздействии высокоинтенсивных лазерных импульсов. При действии таких импульсов время инициирования крайне мало и механизм процесса

определяется как особенностями воздействия концентрированных потоков лучистой энергии на вещество, так и структурными, теплофизическими, кинетическими и механическими свойствами вещества.

В литературе обсуждаются тепловой [6] и цепной [7] механизмы инициирования, деформационный механизм формирования начального очага реакции [8] при различных видах внешнего воздействия. В работах теоретического характера, как правило, изучаются характеристики стадии зажигания в зависимости от параметров излучения, теплофизических и оптических свойств материалов [9], соотношения между температурами плавления и зажигания [10] и пр.

Можно отметить, что в первых работах по инициированию импульсом излучения исследовались азиды тяжелых металлов. Далее исследования были распространены на бризантные вещества, и лишь недавно в круг изучаемых веществ были включены светочувствительные ЭМ типа вторичных взрывчатых веществ, а также фуразанотетразиндиоксид (ФТДО). При этом оказалось, что для ФТДО можно обеспечить сравнительно высокую светочувствительность при значительном снижении механи-

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00217).

© Князева А. Г., Зарко В. Е., 2018.

ческой чувствительности, если сокристаллизовать его с другим ЭМ — линейным нитрамино (динитразапентаном, ДНП). В связи с этим возникла задача экспериментального и теоретического исследования лазерного инициирования двухкомпонентных смесей.

Целью настоящей работы является разработка модели нагрева и разложения двухкомпонентной смеси кристаллических ЭМ, а также численный анализ влияния плавления и изменения давления в реакционной зоне на процесс нагрева ЭМ коротким лазерным импульсом.

1. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В эксперименте [11] инициирование реакции в смеси осуществлялось в условиях сопряженного теплообмена (рис. 1): в центре полого диска 4 размещался слой ЭМ 2 толщиной h ; слой 3 выполнял функцию подложки; через слой 1 (например, стекло) проникало лазерное излучение. Каждый материал характеризуется собственными теплофизическими и оптическими свойствами. В [12] проведен анализ процесса нагрева трехслойной системы с различными свойствами слоев и границ. При этом внешняя граница подложки полностью поглощает дошедшее до нее излучение, а результирующий поток, отраженный от внутренних границ, покидает стеклянную пластину беспрепятственно. В результате численного решения установлено, что при вариации оптических и теплофизических свойств материалов системы могут реализовываться различные температурные профили (с максимумом и минимумом внутри полупрозрачного среднего слоя),

что может приводить к изменению условий зажигания.

В настоящей работе полагаем, что радиус луча много меньше радиуса плоского слоя ЭМ:

$$a \ll R_0. \tag{1}$$

В результате быстрого нагрева в образце формируются волны механических возмущений, которые покидают образец за время порядка $t_0 \approx H/C$, где H — толщина образца, C — скорость звука. При условии, что время действия импульса лазерного излучения $t_{imp} \gg t_0$, а характерное время инициирования реакции $t_{ign} > t_{imp}$, в первом приближении можно не анализировать динамические процессы, связанные с распространением волн механических возмущений.

Это позволяет разделить задачу на две — собственно задачу об инициировании химических реакций и задачу об оценке механических напряжений в области воздействия, если это необходимо.

Для нахождения температуры и концентраций продуктов реакции требуется в общем случае решить двумерную сопряженную (с границами раздела между материалами) задачу теплопроводности с химическими источниками в ЭМ. Но учитывая, что область прогрева концентрированным источником много меньше размеров плоского слоя ЭМ, а теплопроводность ЭМ и материала диска 4 (см. рис. 1) достаточно низкая, будем в первом приближении считать боковые поверхности образца ЭМ теплоизолированными.

Стеклянная пластина выполняет одновременно две функции: препятствует выходу газообразных продуктов разложения и отнимает часть тепла из зоны прогрева. Первое позволяет не учитывать испарение и процессы в газовой фазе. Второе можно учесть приближенно, принимая во внимание результаты [13]: при нагреве слоевой системы потоком тепла потери тепла теплопроводностью в окружающую среду обуславливают уменьшение прошедшего потока в $1 + K_\varepsilon$ раз, где $K_\varepsilon = \sqrt{c_1 \rho_1 \lambda_1 / (c_2 \rho_2 \lambda_2)}$ — коэффициент тепловой активности, c — удельная теплоемкость, ρ — плотность, λ_i — теплопроводность компонентов 1 и 2. В случае полупрозрачного вещества 2 (см. рис. 1) на основе аналитического решения сопряженной задачи теплопроводности можно установить, при каком условии

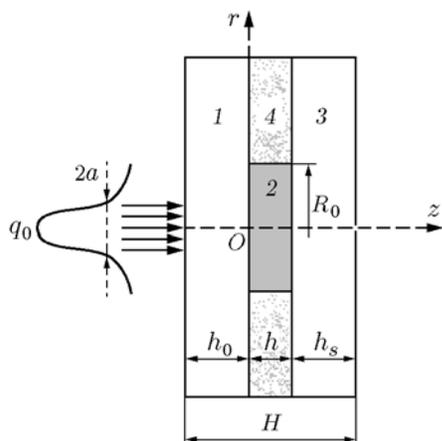


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи

такое приближение корректно (этот вопрос обсуждается ниже в § 2).

Энергетический материал представляет собой бинарный твердый раствор или смесь, что приводит к особенностям в его плавлении (см. § 3): доля жидкой фазы η_l в области прогрева меняется от 0 до 1. Полагаем, что реакции разложения начинаются только при появлении жидкой фазы. Теплофизические свойства смеси, тепловыделение в реакциях зависят от содержания компонентов, разложение каждого из которых описывается суммарными реакциями. Скорости реакций зависят от температуры по закону Аррениуса и степенным образом от давления p . Так как речь идет о суммарных реакциях в фазах, то степенная зависимость скорости от давления есть лишь предположение. Показатель степени — экспериментально измеряемая величина.

С учетом кратковременности действия источника излучения математическая модель принимает вид:

$$c_{eff} \rho_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} =$$

$$= \lambda_{eff} \left[\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] + W_{ch} + W_{ext},$$

$$\frac{d\eta_1}{dt} = k_1 \varphi_1(\eta_1) \exp \left(-\frac{E_1}{RT} \right) \eta_l \left(\frac{p}{p_0} \right)^u,$$

$$\frac{d\eta_2}{dt} = k_2 \varphi_2(\eta_2) \exp \left(-\frac{E_2}{RT} \right) \eta_l \left(\frac{p}{p_0} \right)^u,$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad z = h;$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad r = 0, \quad r = R;$$

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad \eta_1 = 0, \quad \eta_2 = 0, \quad \eta_l = 0,$$

где T — температура; r, z — радиальная и осевая координаты цилиндрической системы координат; $c_{eff}, \rho_{eff}, \lambda_{eff}$ — эффективные теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности смеси; η_1, η_2 — степени разложения независимо разлагающихся компонентов 1 и 2; E_1, E_2 — энергии активации реакций разложения; k_1, k_2 — предэкспоненты; R — универсальная газовая постоянная; φ_1, φ_2 — кинетические функции. Соответственно, имеем

$$W_{ch} = W_1 \xi + W_2 (1 - \xi);$$

$$W_1 = Q_1 \frac{d\eta_1}{dt}, \quad W_2 = Q_2 \frac{d\eta_2}{dt},$$

где Q_1, Q_2 — теплота реакций, ξ — доля ФТДО, $0 < \xi < 1$. Таким образом, одновременно в системе могут находиться два исходных реагента и два продукта их разложения.

Оптические свойства материалов влияют на динамику нагрева [9, 12, 14] и, следовательно, на инициирование реакции.

В настоящей работе полагаем, что стеклянная пластина, отделяющая ЭМ от источника, абсолютно прозрачна; поток $q_0(1 - f_1)$ проходит через границу $z = 0$, следовательно, для любой точки $0 < z < h$ имеем поток в прямом направлении

$$(1 - f_1) \sigma q_0 \exp(-\sigma z - (r/a)^2),$$

где σ — показатель поглощения излучения, a — полуширина пучка излучения, f_1 — коэффициент отражения при $z = 0$. Граница $z = h$ характеризуется коэффициентом отражения f_2 . Поэтому отраженный от этой поверхности поток есть

$$f_2 q_0 \exp(-\sigma h).$$

Как результат, в произвольной точке ЭМ получаем скорость тепловыделения, обусловленную действием суммы двух потоков излучения:

$$W_{ext} = (1 - f_1) \sigma q_0 \exp(-\sigma z - (r/a)^2) \times$$

$$\times [1 + f_2 \exp(-2\sigma(h - z))].$$

Заметим, что в [15] отражение излучения от подложки не учитывалось.

Коэффициент отражения f_2 зависит от материала, используемого в качестве подложки. Величина потока может зависеть от времени [16]. В этом случае в функции W_{ext} появится множитель вида $F(t)$.

2. ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ СЛОЕВ НА ДИНАМИКУ НАГРЕВА

Для оценки влияния свойств слоев на динамику нагрева можно использовать точные аналитические решения одномерных сопряженных задач теплопроводности. Так, если нагрев толстого слоя ЭМ осуществляется через абсолютно прозрачную пластину конечной толщины h_0 и далее поглощается в ЭМ по закону Бугера, то поле температуры (без учета плавления и химических реакций) описывается сопряженной задачей:

$$c_1\rho_1\frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z}\right), \quad -h_0 < z < 0;$$

$$c_2\rho_2\frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z}\right) + \sigma q_0 \exp(-\sigma z), \quad z > 0;$$

$$z = -h_0: \quad \lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z} = 0;$$

$$z = 0: \quad \lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z} = \lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z}, \quad T_1 = T_2;$$

$$z \rightarrow \infty: \quad \lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z} = 0;$$

$$t = 0: \quad T_k = T_0, \quad k = 1, 2,$$

где индекс $k = 1$ относится к стеклянной пластине, $k = 2$ — к энергетическому материалу.

Решение этой задачи находится операционным методом, но имеет весьма громоздкий вид и неудобно в использовании. Тем не менее с его помощью удается показать [17], что чем выше σ , тем более приемлемо приближение $q_{eff} \approx q_0/(1 + K_\varepsilon)$. При малых значениях σ и t температура на границе раздела материалов растет практически линейно. Это подтверждается численным решением задачи.

Если прозрачную стеклянную пластину вследствие ее низкой теплопроводности считать бесконечной, а слой ЭМ имеет конечные размеры, то важен теплообмен с подложкой. В этом случае для подложки, полностью поглощающей излучение, приходим к задаче теплопроводности:

$$c_1\rho_1\frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z}\right), \quad z < 0;$$

$$c_2\rho_2\frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z}\right) + \sigma q_0 \exp(-\sigma z), \quad 0 < z < h;$$

$$c_3\rho_3\frac{\partial T_3}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_3\frac{\partial T_3}{\partial z}\right), \quad z > h;$$

$$z \rightarrow -\infty: \quad \lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z} = 0;$$

$$z = 0: \quad \lambda_1\frac{\partial T_1}{\partial z} = \lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z}, \quad T_1 = T_2;$$

$$z = h: \quad \lambda_2\frac{\partial T_2}{\partial z} =$$

$$= \lambda_3\frac{\partial T_3}{\partial z} + q_0 \exp(-\sigma h), \quad T_2 = T_3;$$

$$z \rightarrow \infty: \quad \lambda_3\frac{\partial T_3}{\partial z} = 0;$$

$$t = 0: \quad T_k = T_0, \quad k = 1, 2, 3.$$

Решение этой задачи приведено в [18], где показано, что в случае поглощения излучения полупрозрачной оболочкой в среде действительно происходит уменьшение прошедшего потока в $1 + K_\varepsilon$ раз.

Для корректности таких оценок здесь, как и в [14], необходимо принять, что суммарная толщина ЭМ (расположенного в центре) и пластин 1 и 3 много меньше размера трехслойного образца в направлениях, перпендикулярных оси Oz .

На рис. 2 представлено суммарное количество тепла, запасаемое в слоях конечных

размеров, $Q_1 = \int_{-h_0}^0 c_1\rho_1(T_1 - T_0)dz$ и $Q_2 =$

$\int_0^h c_2\rho_2(T_2 - T_0)dz$, в зависимости от времени

при разных показателях поглощения ЭМ и времени действия импульса $2 \cdot 10^{-2}$ с (что соответствует перегибу на кривых).

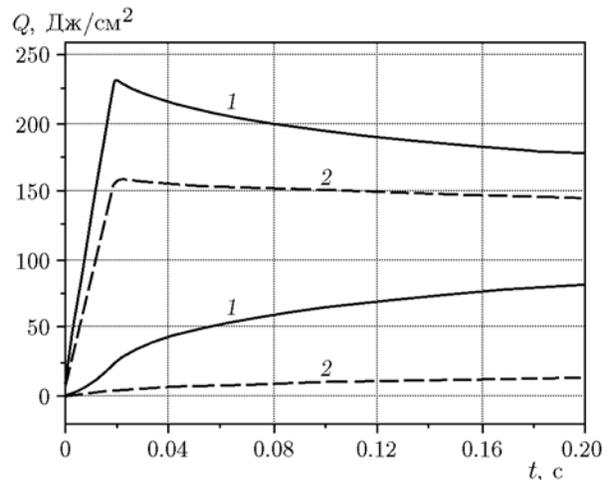


Рис. 2. Тепло, идущее на нагрев стекла (верхние кривые) и слоя ЭМ (нижние кривые) при $\sigma = 50$ (1) и $\sigma = 5 \text{ см}^{-1}$ (2), в зависимости от времени

В расчетах принято: $\lambda_1 = 1$ Дж/(м·с·К), $\rho_1 = 2.5 \cdot 10^3$ кг/м³, $c_1 = 700$ Дж/(кг·К) (стекло); $\lambda_2 = 0.17$ Дж/(м·с·К), $\rho_2 = 1.6 \cdot 10^3$ кг/м³, $c_2 = 1200$ Дж/(кг·К) (ЭМ); $\lambda_3 = 2.19$ Дж/(м·с·К), $\rho_3 = 4.54 \cdot 10^3$ кг/м³, $c_3 = 530$ Дж/(кг·К) (металл, титан); $h_0 = 0.001$ м, $h = 0.002$ м, $h_s = 0.001$ м (s — подложка); $u = 1$. Из рис. 2 видно, что на начальной стадии процесса соотношение между Q_1 и Q_2 нельзя считать постоянным. Чем тоньше слой ЭМ, тем больше потери тепла в окружающие материалы. Для выбранных размеров потери тепла в металлическую подложку незначительны, так как излучение практически не доходит до границы раздела ЭМ — подложка. Если ЭМ абсолютно прозрачный, он может нагреваться за счет теплопередачи от нагретой металлической пластины. В этом случае стеклянная пластина не будет нагреваться.

3. ПЛАВЛЕНИЕ БИНАРНОЙ СМЕСИ

В соответствии с диаграммой состояния смеси ФТДО ($C_2N_6O_3$) — ДНП ($C_3H_8N_4O_4$) [19] в области $\xi > 0.65$ имеется интервал температуры от T_s до T_l (температуры солидуса и ликвидуса, зависящие от состава исходного раствора), в котором одновременно присутствуют две фазы — жидкость и кристаллы твердого вещества. В соответствии с теорией двухфазной зоны [20] доля жидкой фазы изменяется по закону, зависящему от динамики нагрева и типа смеси:

$$\eta_l = 1 - \left(\frac{T_l - T}{T_l - T_s} \right)^n, \quad T \in [T_s, T_l].$$

Вследствие плавления (появления жидкой фазы) изменяется теплоемкость в области температуры $T \in [T_s, T_l]$, так что

$$c_{eff} \rho_{eff} = \begin{cases} (c\rho)_s, & T \leq T_s, \\ c\rho + Q_{ph}\rho_s \frac{\partial \eta_l}{\partial T}, & T_s < T < T_l, \\ (c\rho)_l, & T \geq T_l, \end{cases}$$

где $(c\rho)_s$ — эффективная теплоемкость твердого раствора, $(c\rho)_l$ — теплоемкость жидкого раствора. Так как по определению в условиях постоянного объема или постоянного давления

$$c = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right),$$

а энтропия S — величина аддитивная, то для любой фазы (жидкости и твердого раствора) можно записать

$$c = c_1 \xi + c_2 (1 - \xi),$$

где доля ФТДО находится в диапазоне $0 < \xi < 1$.

В общем случае температуры ликвидуса и солидуса можно аппроксимировать подходящими полиномами. В соответствии с [19] при $\xi = 0.85$ принимаем $T_s = 322$ К и $T_l = 350$ К.

В ряде работ используются более сложные модели двухфазной зоны [21, 22].

4. ДАВЛЕНИЕ В ЗОНЕ ПРОГРЕВА И РЕАКЦИИ

Исследуемая система является многофазной, причем соотношение между фазами изменяется неравномерно во времени вследствие различия характерных скоростей разных процессов. Уравнение состояния вещества в разных температурных интервалах, соответствующих разным фазовым состояниям, должно иметь различный вид. Однако в нашей модели можно воспользоваться достаточно простым приближением. Неравновесное уравнение состояния в дифференциальной форме представим в виде [23]

$$dp = K_T [\alpha_T dT + \alpha_1 d\eta_1 + \alpha_2 d\eta_2],$$

где p — неравновесное давление, зависящее от температуры и степеней превращения компонентов, K_T — изотермический объемный модуль, α_T — коэффициент теплового расширения, α_1, α_2 — коэффициенты концентрационного расширения, отражающие различие удельных объемов продуктов реакции и реагентов в стандартных условиях. Полагая, что свойства вещества постоянны, находим

$$p - p_0 = K_T [\alpha_T (T - T_0) + \alpha_1 \eta_1 + \alpha_2 \eta_2].$$

Естественно ожидать, что давление, рассчитанное по этой формуле, будет завышенным. Подобное уравнение состояния, в принципе, может отражать также изменение давления вследствие плавления (мало) и вследствие испарения (может быть значительным). В более общем случае коэффициенты K_T, α_T и др. — функции температуры. В газе и в паровой фазе $\alpha_T \sim T^{-1}$ и $K_T \sim p$. Уравнение состояния в дифференциальной форме фактически является представлением приращения давления в ряд

Тейлора по степеням приращений других термодинамических параметров — температуры и концентраций. Так как объем считается неизменным, в это уравнение он не входит. Подобные уравнения состояния известны в акустике, в физике релаксационных явлений, в геофизике и т. п.

5. ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ И АЛГОРИТМ

Задача решается численно с использованием неявной разностной схемы расщепления и покоординатной прогонки, а также с использованием схемы переменных направлений. Так как в модели учитываются физические и химические процессы с разными характерными скоростями, наиболее удачным оказался алгоритм с переменным шагом по времени, адаптированным к скорости изменения максимальной температуры, накопления доли жидкой фазы и накопления продуктов реакций в области с максимальной температурой.

В расчетах принято:

$$R_0 = 0.003 \div 0.005 \text{ м}; \quad h = 0.0008 \div 0.0091 \text{ м};$$

$$\rho_{eff} = [1.84\xi + 1.48(1 - \xi)] \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3;$$

$$c_{eff} = 1200 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)};$$

$$\lambda_{eff} = 0.17 \text{ Дж/(м} \cdot \text{с} \cdot \text{К)};$$

$$Q_{ph,1} = \left[\frac{9849}{156} \xi + \frac{15012}{164} (1 - \xi) \right] \cdot 10^6 \text{ Дж/м}^3;$$

$$Q_{ph,2} = \frac{8500}{156} \xi + \frac{18000}{164} (1 - \xi);$$

$$F(t) = \begin{cases} 1, & t \leq t_i, \\ 0, & t > t_i, \end{cases}$$

где t_i — время действия импульса. Параметры реакций разложения [24]:

$$E_1 = 112 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль},$$

$$E_2 = 75 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль};$$

$$Q_1 = 2 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3, \quad Q_2 = -2 \cdot 10^8 \text{ Дж/м}^3.$$

Получение достоверных результатов численных расчетов затруднено отсутствием или неудовлетворительной точностью данных о свойствах веществ. В особенности это относится к параметрам химических реакций и к «механическим» свойствам ЭМ. Для качественного анализа модели принято $K_T = 8.44 \cdot 10^7 \text{ Н/м}^2$, $\alpha_T = 10^{-5} \text{ К}^{-1}$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.3$, $p_0 = 1 \text{ атм} = 10^5 \text{ Н/м}^2$.

6. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для практически непрозрачного энергетического материала ($\sigma = 925 \text{ см}^{-1}$) при условиях $f_1 = 0.75$, $f_2 = 1$, $h = 0.0005 \text{ см}$ и $a = 0.0014 \text{ см}$ динамика процесса подобна описанной в [15]. Так как различные физические явления, учтенные в модели, характеризуются разными пространственными и временными масштабами, процесс состоит из трех стадий. На первой стадии происходит прогрев ЭМ за счет внешнего источника. Так как теплопроводность ЭМ низкая, расширение области прогрева со временем идет медленно. Прогрев сопровождается плавлением. На рис. 3,а видны перегибы на температурных зависимостях, связанные с плавлением; рис. 3,б дает представление о размерах двухфазной зоны (где доля жидкой фазы изменяется от 0 до 1); из рис. 3,в видно, что давление в зоне прогрева невелико и обусловлено лишь изменением температуры. На кривых давления можно выделить три участка: область низких температур до начала плавления; область, соответствующая двухфазной зоне, где доля жидкой фазы изменяется от нуля до некоторого значения (именно в начале этой зоны появляется первый перегиб на кривой давления); область, где внешний нагрев максимален, что приводит к постоянному росту температуры, градиента температуры и, следовательно, давления. Второй перегиб на кривых температуры и давления практически соответствует границе раздела двухфазной зоны и жидкости.

Для непрозрачного вещества протяженность зоны прогрева вдоль оси Oz незначительна и не превышает 0.01 см для всех стадий, что связано с низкой теплопроводностью ЭМ.

На второй стадии (рис. 4) инициируются химические реакции разложения каждого вещества. Вследствие значительного суммарного тепловыделения температура быстро возрастает (рис. 4,а), радиальный размер двухфазной зоны возрастает сравнительно медленно (рис. 4,б). Фронт реакции быстро распространяется из области облучения (рис. 4,в,д). В силу значительного изменения объема в ходе реакции давление резко возрастает (рис. 4,в), что может стать причиной разрушения в условиях реального эксперимента.

Третья стадия на рисунках не показана, так как она вряд ли реализуется в эксперименте из-за разрушения образца. В рамках модели после отключения внешнего импульса в те-

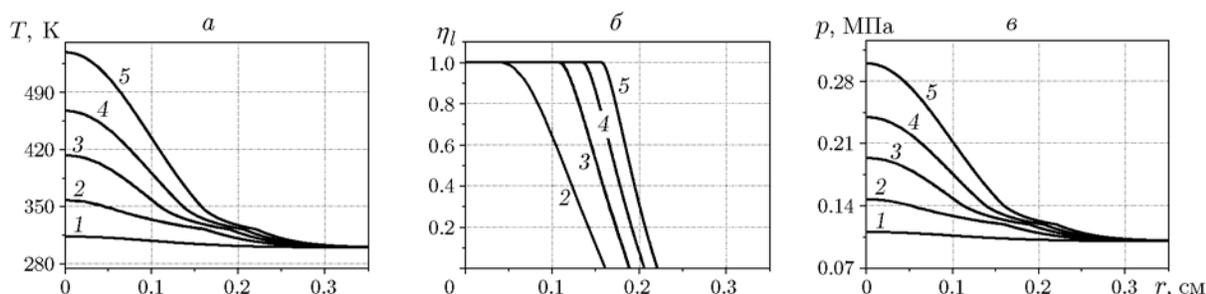


Рис. 3. Распределение температуры (а), доли жидкой фазы (б) и давления (в) вдоль радиуса при $z = 0$ для непрозрачного ЭМ ($\sigma = 925 \text{ см}^{-1}$) на первой стадии процесса:

$q_0 = 2 \cdot 10^5 \text{ Вт/см}^2$; t , с: 1 — 10^{-6} , 2 — $6.4 \cdot 10^{-6}$, 3 — $1.07 \cdot 10^{-5}$, 4 — $1.5 \cdot 10^{-5}$, 5 — $2.08 \cdot 10^{-5}$

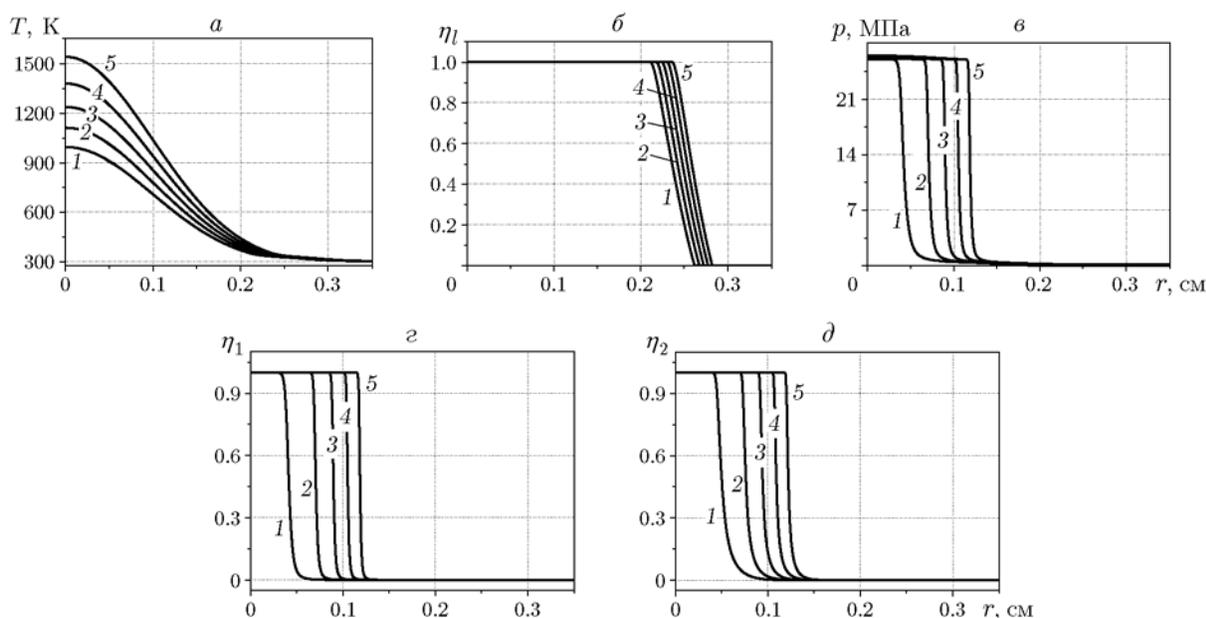


Рис. 4. Распределение температуры (а), доли жидкой фазы (б), давления (в) и доли прореагировавших компонентов 1 и 2 (г, д) вдоль радиуса при $z = 0$ для непрозрачного ЭМ ($\sigma = 925 \text{ см}^{-1}$) на второй стадии процесса:

$q_0 = 2 \cdot 10^5 \text{ Вт/см}^2$; t , с: 1 — $6.95 \cdot 10^{-5}$, 2 — $8.1 \cdot 10^{-5}$, 3 — $4.17 \cdot 10^{-4}$, 4 — $9.36 \cdot 10^{-4}$, 5 — $1.08 \cdot 10^{-3}$

чение некоторого времени фронт реакции распространяется в глубь вещества за счет имеющегося запаса тепла. Затем из-за остывания реакции тормозятся и вовсе прекращаются; область, занятая жидкой фазой, постепенно уменьшается.

Значительную роль в осуществлении динамики процесса играет соотношение между размерами ЭМ вдоль оси Oz , оптической толщиной σ^{-1} и характерными размерами зоны прогрева $\sqrt{\kappa t_i}$, где $\kappa = \lambda/(c\rho)$. Для рассматриваемой смеси оптические свойства компонентов практически не изучены. Поэтому представляет интерес проанализировать качественное

различие в форме областей, занятых жидкой фазой, и областей, приходящихся на двухфазные зоны, при вариации показателя поглощения σ (рис. 5). Светло-серый цвет соответствует двухфазной зоне, темно-серый — области, занятой жидкой фазой. При поглощении излучения в объеме, несмотря на прогрев и расплавление почти по всей толщине ЭМ (рис. 5,а), тепла недостаточно для инициирования и распространения реакции. Во втором случае (менее прозрачный ЭМ, рис. 5,б) тепло оказывается локализованным в более узкой области, что приводит к инициированию реакций в жидкой фазе. Однако после отключения внешнего

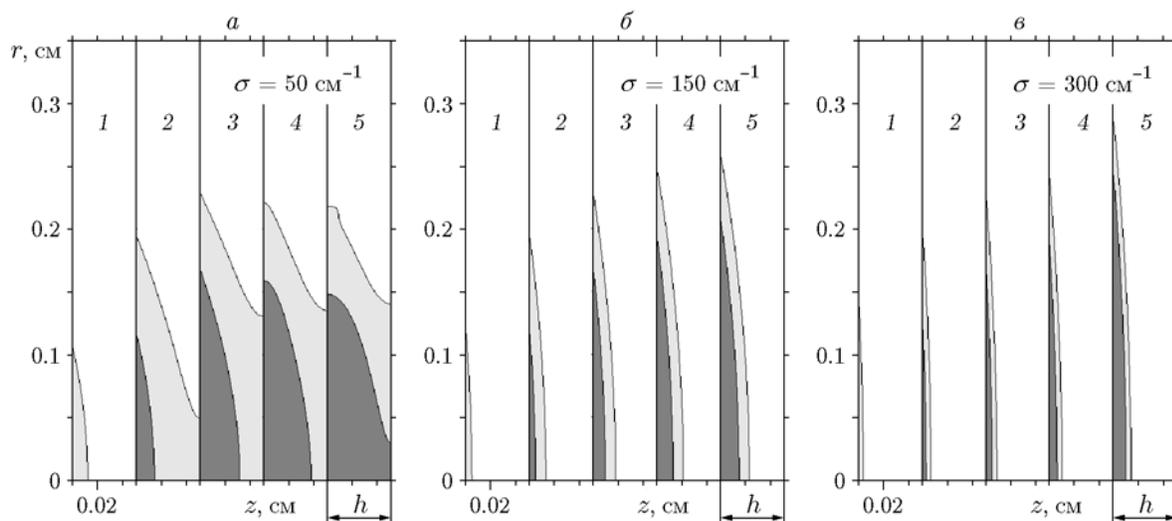


Рис. 5. Эволюция размеров и формы областей, занятых расплавом (темно-серый цвет) и двухфазным раствором (светло-серый цвет):

$q_0 = 3 \cdot 10^5$ Вт/см²; а — t , с: 1 — $2.25 \cdot 10^{-5}$, 2 — $8.7 \cdot 10^{-5}$, 3 — $1.8 \cdot 10^{-4}$, 4 — $3.9 \cdot 10^{-2}$, 5 — 0.16; б — t , с: 1 — $9.3 \cdot 10^{-6}$, 2 — $3.08 \cdot 10^{-5}$, 3 — $6.3 \cdot 10^{-5}$, 4 — $9.89 \cdot 10^{-5}$, 5 — $1.37 \cdot 10^{-4}$; в — t , с: 1 — $6.9 \cdot 10^{-6}$, 2 — $1.7 \cdot 10^{-5}$, 3 — $3.3 \cdot 10^{-5}$, 4 — $5.0 \cdot 10^{-5}$, 5 — $1.63 \cdot 10^{-4}$

импульса излучения процесс плавления существенно замедляется. Поэтому размеры области расплава и двухфазной зоны в моменты времени $t = 9.89 \cdot 10^{-5}$ и $1.37 \cdot 10^{-4}$ с практически не отличаются. При $\sigma = 300$ см⁻¹ процесс развивается аналогично описанному выше, поскольку при таком показателе поглощения слой реагента заданной толщины можно считать практически непрозрачным. Реакции продолжают и после отключения внешнего источника тепла до тех пор, пока не начнет уменьшаться область, занятая расплавом.

Заметим, что в процессе накопления продуктов реакции оптические свойства составляющих смеси могут изменяться [25, 26]. При этом изначально прозрачное вещество медленно нагревается в начальной стадии процесса, а затем по мере накопления продуктов, поглощающих излучение, реакции разложения ускоряются, что показано в [27].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена модель инициирования смеси кристаллических энергетических материалов импульсом лазерного излучения, на основе которой изучена динамика процесса на примере бинарной смеси ФТДО (C₂N₆O₃) — ДНП (C₃H₈N₄O₄). Обнаружено, что температурно-временные характеристики

(время начала реакции, максимальная температура, размер и форма областей, занятых расплавом и твердой фазой, и т. п.) зависят от соотношения различных пространственных масштабов: характерного теплового масштаба, определяемого температуропроводностью; толщины слоя реагента; оптической толщины, обратно пропорциональной показателю поглощения излучения. Показано, что процесс можно разделить на стадии, для которых типично преобладание разных физических явлений: плавление; формирование двухфазной зоны; распространение зон реакции по смеси и быстрое развитие взрыва или прекращение реакций в зависимости от энергии, запасенной в ЭМ за время действия импульса и первых двух стадий. Продемонстрировано, что оптические свойства смеси в значительной степени определяют характер процесса инициирования. Дальнейшее усовершенствование модели может быть связано с учетом эффектов разрушения вещества под действием высокого давления в зоне реакции или разлета газообразных продуктов в случае свободной поверхности.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ahmad S. R., Cartwright M.** Laser Ignition of Energetic Materials. — Chichester: Wiley, 2015.
2. **Hagan J. T., Chaudhri M. M.** Low energy laser initiation of single crystals of lead azide //

- J. Mater. Sci. — 1981. — V. 16, N 9. — P. 2457–2466.
3. **Карабанов Ю. Ф., Боболев В. К.** Зажигание инициирующих ВВ импульсом лазерного излучения // Докл. АН СССР. — 1981. — Т. 256, № 5. — С. 1152–1154.
 4. **Илюшин М. А., Угрюмов И. А., Козлов А. С., Долматов В. Ю., Шугалей И. В., Головчак А. Н., Веденецкий А. В., Королев Д. В., Осташев В. Б.** Влияние добавок ультрадисперсных частиц углерода на порог лазерного инициирования полимерсодержащего светочувствительного взрывчатого состава // Хим. физика. — 2005. — Т. 24, № 10. — С. 49–56.
 5. **Корепанов В. И., Лисицын В. М., Олешко В. И., Ципилев В. П.** К вопросу о кинетике и механизме взрывного разложения азидов тяжелых металлов // Физика горения и взрыва. — 2006. — Т. 42, № 1. — С. 106–119.
 6. **Александров Е. И., Вознюк А. Г., Ципилев В. П.** Влияние поглощающих примесей на зажигание ВВ лазерным импульсом // Физика горения и взрыва. — 1989. — Т. 26, № 1. — С. 3–9.
 7. **Кригер В. Г., Каленский А. В., Захаров Ю. А.** Единый механизм фото- и радиационно-стимулированного разложения азидов тяжелых металлов // Материаловедение. — 2005. — № 7. — С. 10–15.
 8. **Лисицын В. М., Журавлев Ю. Н., Олешко В. И., Федоров Д. Г., Ципилев В. П.** Деформационный механизм взрывного разложения азидов тяжелых металлов при импульсном воздействии // Химия высоких энергий. — 2006. — Т. 40, № 4. — С. 259–264.
 9. **Ассовский И. Г.** Физика горения и внутренняя баллистика. — М.: Наука, 2005.
 10. **Ханефть А. В., Долгачев В. А., Дугинов Е. В., Иванов Г. А.** Критерии зажигания энергетических материалов коротким лазерным и электронным импульсами // Вестн. КемГУ. — 2013. — Т. 55, № 3. — С. 31–38.
 11. **Зарко В. Е., Симоненко В. Н., Калмыков П. И., Квасов А. А., Чесноков Е. Н., Купер К. Э.** Лазерное инициирование кристаллизованных смесей фуразанотетразиндиоксида и динитродиазапентана // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 6. — С. 131–134.
 12. **Князева А. Г., Зарко В. Е.** Особенности нагрева лазерным излучением полупрозрачного материала, помещенного между стеклянной и металлической пластинами // Изв. вузов. Физика. — 2014. — Т. 57, № 9/3, спецвыпуск. — С. 70–75.
 13. **Князева А. Г., Дик И. Г.** Приближенный расчет характеристик зажигания в условиях сопряженного теплообмена. — М., 1989. — Деп. в ВИНИТИ, № 6441-В 89.
 14. **Хлевной С. С., Михеев В. Ф.** Влияние начальной температуры и прозрачности нитроглицеринового пороха на зажигание его световым излучением // Физика горения и взрыва. — 1968. — Т. 4, № 4. — С. 579–583.
 15. **Князева А. Г., Зарко В. Е.** Нагрев кристаллизованной смеси энергетических материалов коротким импульсом лазерного излучения // Изв. вузов. Физика. — 2013. — Т. 56, № 7/2. — С. 8–13.
 16. **Чивель Ю. А.** Гетерогенная лазерная абляция и ее влияние на формирование приповерхностной плазмы при воздействии импульсного лазерного излучения // Опт. журн. — 2011. — Т. 78, № 8. — С. 16–23.
 17. **Knuzeva A. G., Demidov V. N.** Influence of optical properties of the shield on the laser heating of the treated material // Automation and Control Systems (MEACS), Intern. Conf. on Mechanical Engineering, 2015.
 18. **Демидов В. Н., Князева А. Г.** О выборе параметров источника для процессов закалки и поверхностной термической обработки // Машиностроение: сетевой электронный науч. журн. — 2015. — Т. 3, № 2. — С. 17–31.
 19. **Жарков А. С., Калмыков П. И., Зарко В. Е. и др.** Фазовые равновесия и структурно-фазовые превращения в системе фуразано[3,4-е]тетразин-4,6-диоксид-2,4-динитро-2,4-диазапентан // Изв. АН. Сер. хим. — 2014. — № 8. — С. 1785–1800.
 20. **Борисов В. Т.** Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Металлургия, 1987.
 21. **Журавлев В. А.** Затвердевание и кристаллизация сплавов с гетеропереходами. — Ижевск: РХД, 2006.
 22. **Павленко В. Г., Трусов П. В.** Моделирование кристаллизации двухфазной области // Мат. моделирование систем и процессов. — 2000. — № 8. — С. 69–77.
 23. **Князева А. Г.** Связные уравнения тепло- и массопереноса в химически реагирующей твердой смеси с учетом деформирования и разрушения // ПМТФ. — 1996. — Т. 37, № 3. — С. 97–108.
 24. **Синдицкий В. П., Буржава А. В., Егоршев В. Ю., Шереметьев А. Б., Зеленов В. П.** Горение фуразанотетразиндиоксида // Физика горения и взрыва. — 2013. — Т. 49, № 1. — С. 134–137.
 25. **Князева А. Г., Дик И. Г.** Зажигание горячей пластиной конденсированного вещества с инертным экраном между ними // Физика горения и взрыва. — 1990. — Т. 26, № 2. — С. 8–18.
 26. **Дик И. Г., Князева А. Г.** Зажигание лучистой энергией тонкой пленки с меняющимися в ходе реакции оптическими свойствами // Физика горения и взрыва. — 1990. — Т. 26, № 3. — С. 3–7.

27. **Князева А. Г., Зарко В. Е.** Иницирование взрывного разложения смеси энергетических материалов коротким лазерным импульсом в условиях сопряженного теплообмена // Сб. тр. Восьмой Всерос. конф. по внутрика-

мерным процессам и горению в установках на твердом топливе и в ствольных системах (ICOS'2014). — Екатеринбург: Ин-т механики УрО РАН, 2014. — С. 129–136.

Поступила в редакцию 5/IV 2017 г.
