

К ВОПРОСУ О ПАРАМЕТРАХ ДЕТОНАЦИИ ОКТАНИТРОКУБАНА

А. М. Астахов, Р. С. Степанов, А. Ю. Бабушкин*

Красноярская государственная технологическая академия, 660049 Красноярск

* Красноярский государственный технический университет, 660074 Красноярск

Проведена оценка прогнозной значимости некоторых широко используемых методов расчета детонационных параметров для мощных, высокоплотных, безводородных взрывчатых веществ (на примере октанитрокубана). Наилучшие результаты получены при использовании модели ВКВ-RDX (с $k_{CO_2} = 680$) и метода Камлета.

В работе [1] дана оценка некоторых детонационных параметров полинитрокубанов, основанная на корреляционном методе расчета относительного импульса $I_{отн}$ и модельном сравнении тринитробензола (ТНВ), гексанитробензола (ННВ) и их гомологических брутто-аналогов — тетранитрокубана и октанитрокубана (ОНС) соответственно. Однако в [1] не приведены значения наиболее фундаментального параметра взрывчатого вещества (ВВ) — скорости детонации D . Вычисленная по $I_{отн}$, детонационному давлению p_{CJ} из [1] и основным уравнениям гидродинамической модели детонации величина D для ОНС оказалась меньше полученной в эксперименте для ННВ. Это физически противоречиво, так как практически при одинаковом составе продуктов детонации ОНС имеет большую плотность и почти на 10 % большую расчетную теплоту взрыва Q_p . Сравнительно низким оказался и расчетный показатель политропы n продуктов детонации.

Поскольку в программах численного поиска энергетических соединений [2, 3] скорость детонации является, как правило, целевым параметром, актуальным остается вопрос о выборе достоверного метода расчета.

Цель настоящей работы — оценить корректность некоторых известных методов расчета детонационных параметров для такого экстремального ВВ, как ОНС (наиболее энергоемкого представителя полинитрокубанов). Важность этого вопроса обусловлена тем, что современные работы по поиску новых мощных ВВ ведутся именно в области высокоплотных, безводородных соединений с близким к нулю кислородным балансом [2].

Для решения поставленной задачи применяли термодинамический метод расчета с уравнением состояния ВКВ при различных наборах коэффициентов [4–6] и корреляцион-

ные экспресс-методы [7–9]. Результаты расчета детонационных параметров ОНС и ННВ, использованных в качестве модельного ВВ, приведены в таблице.

Термодинамическая модель ВКВ-RR [6], хорошо согласующаяся с экспериментом для ВВ, имеющих в продуктах детонации конденсированный углерод, оказалась не в состоянии воспроизвести экспериментальные данные для ННВ.

Метод [7], обеспечивающий точное совпадение расчетной и экспериментальной скоростей D для ТНВ и удовлетворительное совпадение (–3 %) для ННВ, в случае полинитрокубанов дает значения детонационных параметров ниже, чем у соответствующих им ароматических гомологов. Это объясняется отсутствием учета напряженности кубанового каркаса и наглядно демонстрирует ограничение подхода модельного сравнения.

Наилучшие результаты показали термодинамическая модель ВКВ-RDX [4] с коволюмом для CO_2 $k_{CO_2} = 680$, рекомендованным в [4] для расчетов безводородных ВВ, и экспресс-метод [8]. Оба метода дают совпадение с экспериментальным значением D для ННВ, а метод [8] — и с остальными детонационными параметрами. Значение температуры детонации T_{CJ} по модели [4] занижено, а показатель политропы отличается от вычисленного по экспериментальным данным.

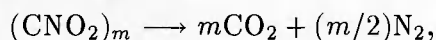
Значения D и p_{CJ} , полученные по методу [9], также близки, хотя и несколько завышены, однако некоторые промежуточные величины нереальны и противоречат друг другу. Так, расчетное количество молей продуктов детонации (на моль ВВ) для ННВ и ОНС по методу [9] равно 11,31 и 15,49 соответственно. Это возможно только при диссоциации 77 и 87 % CO_2 соответственно. Рассчитанные с учетом диссоциации значения Q_p (3,60 и 3,80 МДж/кг) мно-

Взрывчатое вещество	Метод расчета	Детонационные параметры						Состав продуктов детонации в точке Чепмена — Жуге, моль/моль ВВ				
		Q_p , МДж/кг	D , км/с	p_{CJ} , ГПа	T_{CJ} , К	n	$I_{отн}$	CO ₂	CO	O ₂	N ₂	NO
ONC (C ₈ N ₈ O ₁₆), $\rho = 2,09$ г/см ³ , $\Delta H_f^0 = 594,1$ кДж/моль	[1]	8,07	9,20* ⁴)	46,9	—	2,77* ⁴)	146,7	8	0	0	4	0
	BKW-RDX* ¹)	7,99	9,90	49,8	3325	3,11	144,9	7,899	0,101	0,037	3,987	0,027
	BKW-R	7,94	9,51	46,6	4849	3,06	140,9	7,826	0,173	0,037	3,951	0,098
	BKW-RR	7,87	9,31	44,8	4798	3,05	138,3	7,760	0,240	0,008	3,888	0,224
	[7]* ²)	—	8,93	37,7	—	3,46* ⁴)	121,6* ⁴)	—	—	—	—	—
	[8]	8,06	9,97	48,0	—	3,33* ⁴)	138,7* ⁴)	8	0	0	4	0
	[9]	7,63	10,16	50,7	—	3,25* ⁴)	146,6	—	—	—	—	—
[9]* ⁵)	8,06	8,95	41,2	—	3,06* ⁴)	124,4	8	0	0	4	0	
HNB (C ₆ N ₆ O ₁₂), $\rho = 1,973$ г/см ³ , $\Delta H_f^0 = 200,8$ кДж/моль	BKW-RDX* ¹)	7,33	9,31	42,1	3244	3,07	129,9	5,931	0,069	0,025	2,990	0,019
	BKW-R	7,24	8,94	39,2	4631	3,03	126,0	5,871	0,129	0,029	2,965	0,071
	BKW-RR	7,18	8,76	37,7	4587	3,02	123,8	5,830	0,170	0,007	2,922	0,155
	[7]* ³)	—	9,11	39,4	—	3,21* ⁴)	124,6* ⁴)	—	—	—	—	—
	[8]	7,36	9,35	40,9	—	3,22* ⁴)	125,9* ⁴)	6	0	0	3	0
	[9]	6,88	9,40	42,5	—	3,10* ⁴)	132,7	—	—	—	—	—
	[9]* ⁵)	7,36	8,48	35,6	—	2,98* ⁴)	115,9	6	0	0	3	0
Эксперимент [4]	—	~ 9,3	40	—	3,27* ⁴)	123,8* ⁴)	—	—	—	—	—	

Примечания. *¹) $k_{CO_2} = 680$; *²) при плотности монокристалла $d_4^{20} 2,11$ г/см³; *³) при плотности монокристалла $d_4^{20} 2,00$ г/см³; *⁴) рассчитано по основным уравнениям гидродинамической модели детонации; *⁵) при $Q_p = Q_{max}$.

го меньше, чем найденные этим же методом (см. таблицу).

При идеализированном уравнении детонационного превращения:



где $m = 6$ (HNB) и $m = 8$ (ONC), метод [9] не имеет прогнозной значимости для рассматриваемых соединений. Его использование в программном комплексе [3] может привести к тому, что многие перспективные ВВ не пройдут параметрические фильтры.

Таким образом, в программах, осуществляющих поиск новых энергоемких материалов перебором структурных формул безводородных соединений, вероятно, следует пользоваться моделью VKW-RDX ($\kappa_{\text{CO}_2} = 680$) или методом Камлета.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Еременко Л. Т., Нестеренко Д. А.** Энергетические возможности полинитрокубанов // *Материалы XI симпозиума по горению и взрыву: Химическая физика процессов горения и взрыва*. Черноголовка, 1996. Т. 2. С. 43–49.
2. **Coburn M. D., Harris B. W., Lee K.-Y., et al.** Explosives synthesis at Los Alamos // *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.* 1986. V. 25. P. 68–72.
3. **Шляпочников В. А., Смирнов Б. Б., Евтущенко А. В.** Компьютерный поиск энергоемких органических соединений с требуемыми физико-химическими характеристиками // *Изв. АН. Сер. хим.* 1996. № 9. С. 2168–2175.
4. **Mader C. L.** Numerical Modeling of Detonation. Berkeley: Univ. of California Press, 1979.
5. **Фингер М., Ли Е., Хелм Ф. и др.** Влияние элементарного состава на детонационные свойства ВВ // *Детонация и взрывчатые вещества*. М.: Мир, 1981. С. 52–75.
6. **Губин С. А., Одинцов В. В., Пепекин В. И.** Термодинамический расчет идеальной и неидеальной детонации // *Физика горения и взрыва*. 1987. Т. 23, № 4. С. 75–84.
7. **Rothstein L. R., Petersen R.** Predicting high explosive detonation velocities from their composition and structure // *Propellants and Explosives*. 1979. N 4. P. 56–60.
8. **Kamlet M. J., Hurwitz H.** Chemistry of detonation. IV. Evaluation of a simple method for detonation velocities of C–H–N–O explosives // *J. Chem. Phys.* 1968. V. 48, N 8. P. 3685–3692.
9. **Пепекин В. И., Лебедев Ю. А.** Критерий оценки параметров детонации ВВ // *Докл. АН СССР*. 1977. Т. 234, № 6. С. 1391–1394.

Поступила в редакцию 28/1 1997 г.