

На правах рукописи



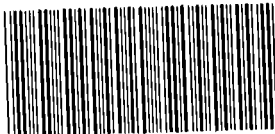
ИВАНОВ Георгий Анатольевич

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ
ОРГАНИЧЕСКИХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ ИМПУЛЬСНЫМ
ПУЧКОМ ЭЛЕКТРОНОВ**

Специальность 02.00.04. – «Физическая химия»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

15 ЯНВ 2015



005557244

Кемерово – 2014

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет» на кафедре теоретической физики

Научный руководитель: Ханефт Александр Вилливич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, профессор кафедры теоретической физики ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»

Официальные оппоненты: Павленко Анатолий Александрович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией физики преобразования энергии высокоэнергетических материалов ФГБУН «Институт проблем химико-энергетических технологий» СО РАН, г. Бийск

Нурмухаметов Денис Рамильевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт углекислоты и химического материаловедения» СО РАН, г. Кемерово

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск

Защита диссертации состоится «28» февраля 2015 г. в 10:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.088.03 при ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет» по адресу: 650043, г. Кемерово, ул. Красная, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет» и на сайте http://www.kemsvu.ru/pages/d03_dis_new

Автореферат разослан «31» декабря 2014 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.088.03
доктор физико-математических наук,
профессор



А.Г. Кречетов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. С созданием первых генераторов импульсных пучков электронов возник интерес к экспериментальному изучению инициирования конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) и твердых топлив сильноточными пучками электронов. Первые эксперименты по детонации ВВ импульсными пучками электронов микро- и наносекундной длительности были выполнены на инициирующих (первичных) ВВ, например, таких как азиды тяжелых металлов, фульминат ртути, стифнат свинца и тетразен. Однако в последнее десятилетие началось интенсивное изучение возможности зажигания и детонации вторичных взрывчатых веществ сильноточными пучками электронов наносекундной длительности. Этот научный интерес возник, во-первых, в связи с возросшими возможностями современной аппаратуры для регистрации и получения информации о быстропротекающих процессах, происходящих в энергетических материалах, таких, например, как импульсная люминесценция и акустический сигнал. Эти данные необходимы для обоснования механизма инициирования вторичных ВВ импульсным пучком электронов. Во-вторых, данные исследования необходимы для оценки чувствительности вторичных ВВ к большим потокам электронов, которые образуются, например, при поглощении жесткого рентгеновского излучения, а также возможности применения импульсных ускорителей для инициирования энергетических материалов в глубоком вакууме (космосе).

Наиболее интенсивно в данное десятилетие изучалось инициирование тетранитропентаэритрита (ТЭН) сильноточными электронными пучками в научных лабораториях Кемеровского государственного университета, Томского политехнического университета и Санкт-Петербургского государственного университета. Появились первые данные о применении импульсных сильноточных пучков электронов для инициирования фуразанотетразиндиоксида (FTDO) и гексогена.

В настоящее время существует три точки зрения на начало процесса инициирования вторичных ВВ электронными импульсами: развитие экзотермической реакции в канале электрического пробоя [1], тепловой взрыв в области поглощения пучка электронов [2] и факельный механизм совместно с тепловым механизмом в области поглощения пучка электронов [3]. Следовательно, выяснение механизма зажигания вторичных ВВ импульсными сильноточными пучками электронов является актуальной задачей.

Целью настоящей работы является систематическое численное исследование макроскопических закономерностей зажигания органических ВВ (ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ) сильноточными импульсными пучками электронов, выяснением влияния теплоты плавления, термоупругих напряжений, активационного объема и реакции автокатализа на пороги и времена задержки зажигания ВВ в рамках единых физико-химических моделей на основе уравнений теплопроводности, нелинейной системы уравнений связанной термоупругости и уравнений автокатализа.

Для достижения поставленной цели потребовалось решить следующие задачи:

1. Получить аналитический критерий для оценки порога зажигания конденсированных взрывчатых веществ импульсным пучком электронов с учетом его диаметра, теплоты плавления взрывчатых веществ и определения условий, при каких длинах пробега электронов сильноточного пучка необходим переход от одномерных уравнений теплопроводности и уравнений связанной термоупругости к двумерным.

2. Разработать численные схемы и алгоритмы, а на их основе создать комплексы программ для решения уравнений теплопроводности с учетом плавления и разложения взрывчатых веществ; для решения нелинейной системы уравнений связанной термоупругости с возможностью учета зависимости энергий активаций химических реакций разложения и автокатализа от упругих напряжений.

3. Провести численные расчеты по зажиганию ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ сильноточным пучком электронов, сопоставить с имеющимися экспериментами, проверить критерий зажигания ВВ и установить рядовую зависимость пороговой плотности энергии зажигания данных ВВ импульсным пучком электронов.

4. Рассчитать динамику распределения термоупругих напряжений и деформаций, возникающих в ТЭНе, гексогене, октогене и ТАТБ при поглощении импульсного пучка, и определить влияние работы упругих напряжений на условие зажигания взрывчатых веществ.

5. Разработать и провести численные расчеты механизма зажигания ТЭНа, включающего в себя реакцию автокатализа и радиационное образование активных частиц при поглощении пучка электронов, установить влияние радиационного выхода данных частиц на время задержки зажигания, определить влияние реакции автокатализа на пороговую плотность энергии зажигания ТЭНа.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней впервые:

1. Получен критерий зажигания конденсированных взрывчатых веществ пучком электронов малой длительности, учитывающий радиус пучка электронов и плавление ВВ. Показано, что влияние радиуса пучка электронов на условие зажигания органических ВВ необходимо учитывать только при длине линейного пробега электронов сильноточного пучка, сопоставимой с радиусом пучка.

2. Показано, что поглощенной энергии пучка электронов вполне достаточно для зажигания ТЭНа по тепловому механизму в области поглощения пучка электронов.

3. Впервые рассчитана рядовая зависимость порогов зажигания органических ВВ (ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ) от параметров сильноточного пучка электронов. Показано, что наименьший порог зажигания импульсным сильноточным пучком электронов имеет ТЭН, а наиболее термостойким является ТАТБ.

4. Показано, что модуль термоупругих напряжений в области порога зажигания заметно меньше экспериментального значения давления в детонационной волне. Следовательно, возникающие термоупругие напряжения не могут вызвать детонацию органических ВВ термоупругим ударом даже в случае отражения от жесткой преграды.

5. Показано, что активные частицы, образованные сильноточным импульсным пучком электронов, являются «затравкой» реакции автокатализа, вследствие чего реакция автокатализа снижает как энергетический порог зажигания, так и время задержки зажигания конденсированного взрывчатого вещества.

6. При радиационном выходе активных частиц, равном $\sim 0,05$, результаты расчетов времени задержки зажигания ТЭНа импульсным пучком электронов согласуются с известными экспериментальными данными.

Практическая значимость работы. Критерий зажигания ВВ импульсным пучком электронов, учитывающий радиус пучка и теплоту плавления ВВ, может быть использован в практической деятельности для оценки порога зажигания энергетических материалов. Комплекс программ, разработанный для решения системы нелинейных уравнений связанной термоупругости, может быть использован для моделирования процессов зажигания и распространения термоупругих волн напряжений и деформаций и для других конденсированных взрывчатых веществ.

Работа выполнена в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № 3.1235.2014 К.

Достоверность научных положений, результатов и выводов обусловлена совпадением критической энергии зажигания ВВ импульсным пучком электронов, полученной из результатов численных расчетов и критерия зажигания; совпадением периода акустических колебаний, полученного из результатов численного расчета и по формуле; близкими значениями термоупругих напряжений, оцененных по уравнению Ми-Грюнайзена и полученных из численного решения системы уравнений связанной термоупругости; использованием апробированных и хорошо зарекомендовавших себя численных методов, а также выполнением законов сохранения энергии в тестовых задачах. Полученные результаты находятся в качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными по временам задержки зажигания ТЭНа импульсным пучком электронов.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Критерий зажигания конденсированных взрывчатых веществ коротким сильноточным пучком электронов, учитывающий диаметр пучка электронов и теплоту плавления ВВ, согласующийся с результатами численных расчетов и экспериментальными результатами по инициированию ТЭНа.

2. Рассчитанная рядовая зависимость порога зажигания органических взрывчатых веществ от плотности энергии импульсного пучка электронов. Пороговая плотность энергии зажигания возрастает в следующей последовательности: ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ.

3. Результаты численных расчетов для ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ: по влиянию плотности энергии пучка электронов, активационного объема на энергию активации химических реакций и время задержки зажигания; по влиянию скорости деформации на амплитуду колебаний температуры в области максимума поглощения пучка электронов; по распределению динамики термоупругих напряжений и деформаций по толщине образцов.

4. Радиационно-термическая модель зажигания ТЭНа импульсным пучком электронов, учитывающая генерацию химически активных частиц «горячими электронами», которые являются затравкой в реакции автокатализа.

Личный вклад автора. Постановка задачи и определение направлений исследования были проведены совместно с научным руководителем. Разработка программного обеспечения и численные расчеты проведены автором. Результаты численного моделирования обсуждались непосредственно с научным руководителем. В работах, опубликованных с соавторами, автору принадлежат результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах.

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на ВНКСФ-15 (Кемерово – Томск, 2009), III Международной научно-инновационной молодежной конференции «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент» (Тамбов, 2011), конференциях «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященной 50-летию полета Ю.А. Гагарина и 90-летию со дня рождения основателя и первого директора НИИ ПММ ТГУ А.Д. Колмакова (Томск, 2011), «Energetic Materials: 43th International Annual Conference of ICT» (Karlsruhe, Federal Republic of Germany, 2012), 8-й Международной научной конференции «Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент» (Казахстан, Караганда, 2012), 3-rd International congress on radiation physics, high current electronics, and modification of materials (Tomsk, Russia, 2012), 4-rd International congress on radiation physics, high current electronics, and modification of materials (Tomsk, Russia, 2014), XIII Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2014), 15-th International Detonation Symposium (San Francisco, CA, 2014), Третьей международной конференции по горению и детонации «Мемориал Я.Б. Зельдовича» (Москва, 2014).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 14 работ, в том числе 7 статей в российских научных журналах из списка ВАК.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 114 наименований. Работа изложена на 133 страницах, содержит 7 таблиц и 86 рисунков.

Основное содержание работы.

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, определены научная новизна полученных результатов и

их практическая значимость, представлены защищаемые положения, достоверность и апробация работы.

В первой главе приводится обзор имеющихся литературных данных по структуре, свойствам, механизмам горения и термического разложения ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ. Приведены результаты экспериментов по инициированию ТЭНа и гексогена пучком электронов наносекундной длительности, а также рассмотрены существующие точки зрения на механизм инициирования органических взрывчатых веществ сильноточным пучком электронов исследователей из Томска, Кемерова и С.-Петербурга.

Во второй главе рассмотрена тепловая модель инициирования органических взрывчатых веществ пучком электронов наносекундной длительности с учетом плавления и превращения ВВ по реакции первого порядка:

$$\rho[c + H_f \delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\Lambda(x)}{R_{ef}} I(t) + \rho Q \frac{d\eta}{dt}, \quad (1)$$

$$\frac{d\eta}{dt} = k_1(1 - \eta), \quad k_1 = Z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (2)$$

где T – текущая температура образца; T_f – температура плавления; $\delta(T - T_f)$ – дельта-функция; λ , c , ρ – теплопроводность, теплоемкость и плотность образца; H_f – удельная теплота плавления на единицу массы вещества; Q – тепловой эффект реакции на единицу массы вещества; R_{ef} – эффективная длина линейного пробега электронов; $I(t)$ – плотность потока энергии электронного пучка; $\Lambda(x)$ – распределение плотности поглощенной энергии пучка электронов по кристаллу; η – глубина превращения ВВ; Z – частотный фактор; E – энергия активации скорости химической реакции; R – газовая постоянная.

Оценка экстраполированной длины линейного пробега электронов для органических ВВ проведена по формуле [4]:

$$R_{ex} = \frac{a_1}{\rho} \left[\frac{1}{a_2} \ln(1 + a_2 e_0) - \frac{a_3 e_0}{1 + a_4 e_0^{a_5}} \right], \quad (3)$$

где ρ – плотность среды в г/см³; $e_0 = E_0/mc^2$ – первоначальная относительная кинетическая энергия электрона; mc^2 – энергия покоя электрона; a_i – постоянные, зависящие от эффективной атомной массы вещества A_{ef} и эффективного атомного номера Z_{ef} .

На рисунке 1 приведены результаты расчетов зависимости эффективной длины пробега электронов в органических ВВ ($R_{ef} = R_{ex}/1,44$). На рисунке 2 представлены результаты расчетов критической плотности энергии зажигания W^* ВВ в области поглощения пучка электронов в зависимости от R_{ef} .

Получен критерий зажигания энергетических материалов с температурой плавления ниже температуры зажигания в зависимости от радиуса пучка электронов:

$$\rho Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT_m}\right) = \frac{\lambda \Delta T_m}{R_{ef}^2} \left[-\frac{1}{\Lambda_m} \frac{\partial^2 \Lambda_m}{\partial \xi^2} + \frac{4}{F(\gamma)} \frac{R_{ef}^2}{r_0^2} \right],$$

$$W^* = \rho R_{ef} (c \Delta T_m + H_f).$$

Показано, что влияние радиуса пучка электронов на условие зажигания органических ВВ необходимо учитывать только при длине пробега электронов, сопоставимой с радиусом пучка.

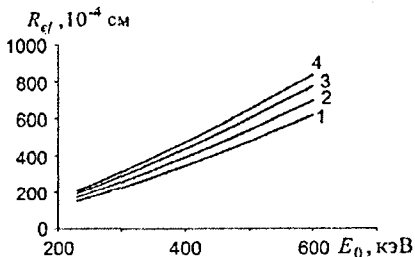


Рисунок 1 – Зависимость эффективной длины пробега электронов от начальной энергии электронов: 1 – ТЭН, 2 – октоген, 3 – ТАТБ, 4 – гексоген

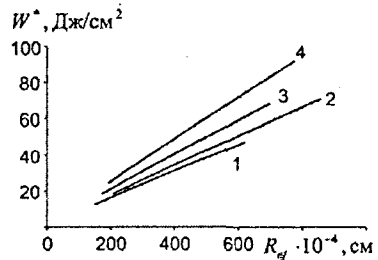


Рисунок 2 – Зависимость критической плотности энергии зажигания ВВ W^* от эффективной длины пробега R_{ef} : 1 – ТЭН, 2 – гексоген, 3 – октоген, 4 – ТАТБ

Расчеты критической плотности энергии зажигания для ТЭНа удовлетворительно согласуются с экспериментом (рисунок 3).

Проведена оценка давления образующейся плазмы в зоне энерговыведения при детонации ТЭНа по формуле [5]:

$$P = (\gamma_{ef} - 1)w,$$

где γ_{ef} – отношение удельных теплоемкостей твердого тела и плазмы; w – объемная плотность поглощенной энергии, которая вычислялась по формуле

$$w = \rho(Q - H_f) + W_D / \Delta z_1.$$

Здесь Δz_1 – ширина реакционного слоя. При $W_D = 60$ Дж/см², $R_{ef} = 415,0 \cdot 10^{-4}$ см для $E_0 = 450$ кэВ и $\Delta z_1 \approx 76 \cdot 10^{-4}$ см получим, что $P \approx 1,96$ ГПа, что сравнимо со значением давления в детонационной волне при возбуждении детонации ТЭНа ударом $P \sim 1,5$ ГПа [6].

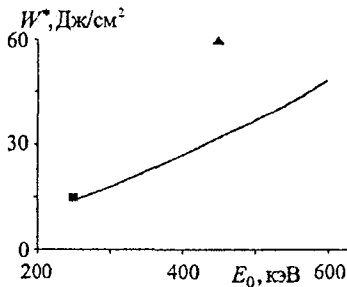


Рисунок 3 – Зависимость W^* инициирования ТЭНа от начальной энергии электронов в пучке: линия – расчет по критерию; ■ – эксперимент [2]; ▲ – пороговая энергия детонации (W_D) ТЭНа [1]

Установлена рядовая зависимость чувствительности инициирования ВВ пучком электронов. Показано, что наиболее чувствительным к воздействию пучка электронов является ТЭН, а наиболее термостойким – ТАТБ (табл.).

Таблица – Критические плотности энергии зажигания взрывчатых веществ электронным импульсом, вычисленные по критерию и численно

ВВ	ТЭН	Гексоген	Октоген	ТАТБ
W^* , Дж/см ² (критерий)	14,41	20,64	21,14	28,4
W^* , Дж/см ² (расчет)	15	21,5	22	28,9

На рисунке 4 представлены результаты расчетов времени задержки зажигания ТЭНа, октогена, гексогена и ТАТБ импульсным пучком электронов с энергией 250 кэВ. Наибольшее время задержки зажигания имеет ТАТБ, а наименьшее ТЭН. Расчетное значение времени задержки t^* для ТЭНа вблизи порога превышает экспериментальное на 2,5 порядка. Из рисунка 5 видно, что при больших плотностях энергии пучка электронов результаты расчета достаточно хорошо согласуются с экспериментом.

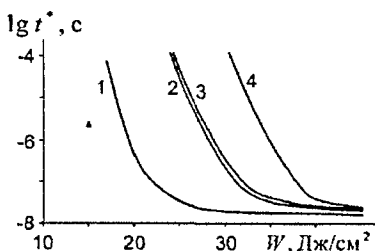


Рисунок 4 – Зависимость времени задержки зажигания органических ВВ от плотности энергии пучка электронов (линии расчет: 1 – ТЭН, 2 – октоген, 3 – гексоген, 4 – ТАТБ, ▲ – эксперимент для ТЭНа [2])

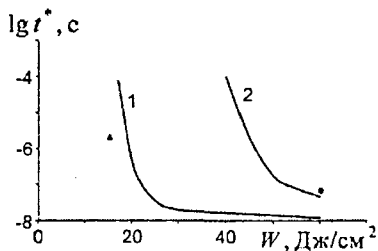


Рисунок 5 – Зависимость времени задержки зажигания ТЭНа от плотности энергии пучка электронов: 1 – расчет при $E_0 = 250$ кэВ, ▲ – эксперимент [2]; 2 – расчет при $E_0 = 450$ кэВ, ● – эксперимент [7]

В третьей главе проведено численное моделирование зажигания ВВ (ТЭН, октоген, гексоген, ТАТБ) электронным импульсом с учетом термоупругих напряжений, возникающих в ВВ вследствие импульсного нагрева. Решалась система нелинейных уравнений связанной термоупругости.

$$\rho[c + H_f \delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - 3\alpha_l K T \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\Lambda(x)}{R_e} I(t) + \rho Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (4)$$

$$c_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = 3\alpha_l K \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad (5)$$

где α_l – коэффициент линейного расширения; K – модуль всестороннего сжатия; σ – продольное напряжение; c_s – адиабатическая скорость звука. Зависимость энергии активации экзотермической реакции в работе задавалась выражением:

$$E(x, t) = E_a + \sigma(x, t) \Delta V^*,$$

где E_a – энергия активации термического разложения ВВ при $\sigma = 0$; ΔV^* – объем активации.

На рисунке 6 приведены результаты расчетов времени задержки зажигания ТЭНа в зависимости от плотности энергии электронов при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$ эВ/Па. Данное значение ΔV^* примерно на порядок превышает типичные значения активационного объема. Согласно рис. 6, кривая времени задержки зажигания ВВ от плотности энергии электронов при $E_0 = 450$ кэВ (кривая 2) лежит правее кривой времени задержки зажигания ВВ при $E_0 = 250$ кэВ (кривая 1). Это связано с тем, что порог зажигания при $E_0 = 450$ кэВ больше, чем при $E_0 = 250$ кэВ. Видно, что учет термоупругих напряжений привел к хорошему согласованию результатов расчетов с экспериментом [2].

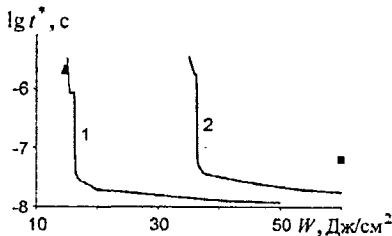


Рисунок 6 – Зависимость времени задержки зажигания ТЭНа от плотности энергии импульса электронов: 1 – расчет при $E_0 = 250$ кэВ, ▲ – эксперимент [2]; 2 – расчет при $E_0 = 450$ кэВ, ■ – эксперимент [7]

На рисунках 6–9 представлены результаты расчетов по влиянию активационного объема на динамику температуры в максимуме поглощения пучка электронов для ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ. Как видно из данных рисунков, пилообразные «зазубринки» на температурных кривых наблюдаются и при $\Delta V^* = 0$. Следовательно, их появление обусловлено не изменением

энергии активации химической реакции, а вкладом в уравнение теплопроводности слагаемого $-3\alpha_l K T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}$, обусловленного работой термоупругих напряжений.

Наибольший перепад температур в максимуме поглощения пучка электронов имеет ТАТБ. Это обусловлено тем, что температура зажигания ТАТБ пучком электронов значительно превышает температуры зажигания ТЭНа, гексогена и октогена.

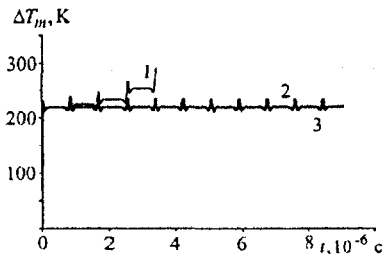


Рисунок 6 – Влияние объема активации на зависимость изменения температуры от времени в максимуме поглощения электронного пучка в ТЭНе при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$ (1), $\Delta V^* = -12 \cdot 10^{-10}$ (2) и $\Delta V^* = 0$ эВ/Па (3) ($W = 15$ Дж/см², $\tau_i = 15$ нс, $h = 1$ мм)

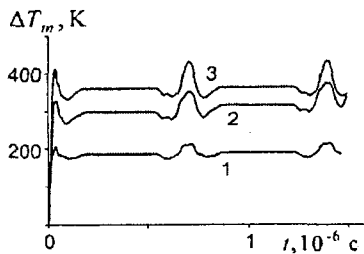


Рисунок 7 – Влияние объема активации на зависимость изменения температуры от времени в максимуме поглощения пучка электронов пучка в гексогене при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$, $W = 19,5$ (1), $\Delta V^* = -12 \cdot 10^{-10}$, $W = 25,5$ (2) и $\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $W = 29$ Дж/см² (3)

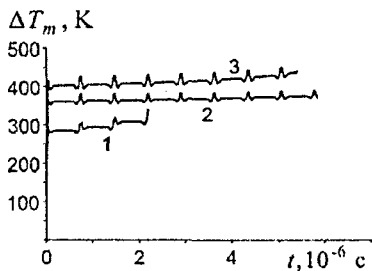


Рисунок 8 – Влияние объема активации на зависимость изменения температуры от времени в максимуме поглощения электронного пучка в октогене при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$, $W = 21,5$ (1), $\Delta V^* = -12 \cdot 10^{-10}$, $W = 25$ (2) и $\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $W = 27,5$ Дж/см² (3)

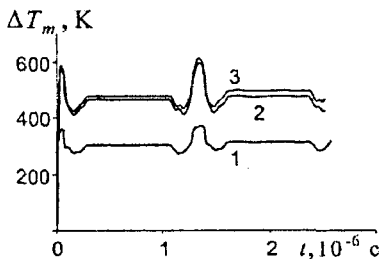
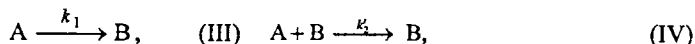
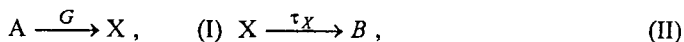


Рисунок 9 – Влияние объема активации на зависимость изменения температуры от времени в максимуме поглощения электронного пучка в ТАТБ при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$, $W = 27$ (1), $\Delta V^* = -12 \cdot 10^{-10}$, $W = 37$ (2) и $\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $W = 37$ Дж/см² (3)

Расчеты показали, что модуль амплитуды термоупругих напряжений в области инициирования составляет для ТЭНа порядка 0,3 ГПа, для гексогена ~ 0,8 ГПа, для октогена ~ 0,4 ГПа и ТАТБ ~ 0,6 ГПа. Данные значения термоупругих напряжений заметно ниже давлений, возникающих при детонации данных взрывчатых веществ.

В четвертой главе проведено численное моделирование инициирования ТЭНа в области поглощения пучка электронов с учетом термоупругих напряжений и реакции автокатализа. Было предположено, что энергия электронного пучка идет не только на нагрев образца, но и на генерацию активных частиц, запускающих реакцию автокатализа (затравка):



где A – молекула ТЭНа; X – активная частица; B – конечный продукт в конденсированной фазе; G – скорость генерации активных частиц при поглощении пучка электронов; τ_X – время жизни активной частицы X ; k_1 – константа термического образования частиц B ; k_2 – константа стадии автокатализа. Стадия (II) имеет тепловой эффект Q_X . Стадии автокатализа (III) и (IV) имеют тепловой эффект Q .

В приближении квазистационара по X уравнение автокатализа имеет вид

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{G}{N_L} + k_1(1-\eta) + k_2\eta(1-\eta). \quad (6)$$

Уравнения связанной термоупругости с учетом тепловыделения в стадиях реакции (II) – (IV) запишутся в виде

$$\rho[c + H_f\delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - 3\alpha_e K T \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (1-f) \frac{\Lambda(x)}{R_e} I(t) + f\rho Q_1 \frac{G}{N_L} + \rho Q [k_1(1-\eta) + k_2\eta(1-\eta)], \quad (7)$$

$$c_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = 3\alpha_e K \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad (8)$$

где f – радиационный выход активных частиц; $k_2 = K_2 N_L$ – нормированная константа скорости автокатализа; N_L – число Лошмидта.

Скорость генерации активных частиц в кинетическом уравнении (6) определялась по формуле

$$G = f \frac{\Lambda(x)}{R_e W_a} I(t),$$

где W_a – энергия образования одной активной частицы.

Расчеты показали, что пики распределения температуры (рис. 10) и степени превращения (рис. 11) становятся со временем более острыми по сравнению с данными пиками, приведенными во второй и третьей главах

диссертации. Обострение данных пиков вызвано реакцией автокатализа. Кроме того расчеты показали, что радиационно образованные активные частицы являются «заправкой» реакции автокатализа, вследствие чего реакция автокатализа снижает как энергетический порог зажигания, так и время задержки зажигания конденсированного взрывчатого вещества.

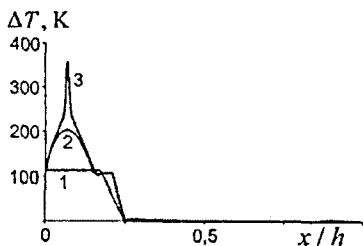


Рисунок 10 – Распределение температуры по толщине образца в различные моменты времени при $t = 1,5 \cdot 10^{-8}$ (1), $t = 1 \cdot 10^{-7}$ (2), $t = 2,06 \cdot 10^{-6}$ с (3) ($\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $W = 15$ Дж/см², $\tau_i = 15$ нс, $E_0 = 250$ кэВ, $f = 0,05$, $h = 1$ мм)

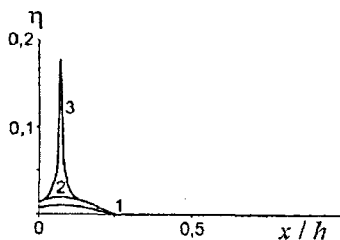


Рисунок 11 – Динамика распределения степени превращения в области поглощения пучка электронов при зажигании ТЭНа $t = 1,5 \cdot 10^{-8}$ (1), $t = 1 \cdot 10^{-7}$ (2), $t = 2,06 \cdot 10^{-6}$ с (3) ($\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $W = 15$ Дж/см², $\tau_i = 15$ нс, $E_0 = 250$ кэВ, $f = 0,05$, $h = 1$ мм)

На рисунках 12 и 13 представлены результаты расчетов времени задержки зажигания ТЭНа при $E_0 = 250$ кэВ и $E_0 = 450$ кэВ. Как видно, в данном случае результаты расчетов при $\Delta V^* = 0$ хорошо согласуются с имеющимся экспериментом при радиационном выходе активных частиц, равном $f \approx 0,05$.

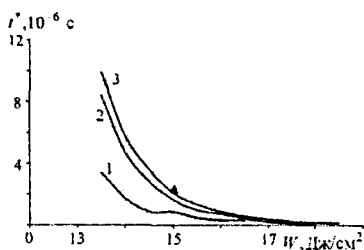


Рисунок 12 – Зависимость времени задержки зажигания от плотности потока энергии при $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$ (1), $-12 \cdot 10^{-10}$ (2), 0 эВ/Па (3), $\tau_i = 15$ нс; ▲ – эксперимент [2]

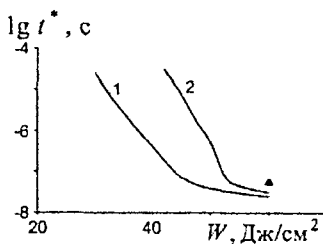


Рисунок 13 – Зависимость времени задержки зажигания ТЭНа от плотности потока энергии электронов: реакция с учетом автокатализа и термоупругих напряжений – кривая 1; реакция с учетом термоупругих напряжений – кривая 2 ($\Delta V^* = 0$ эВ/Па, $\tau_i = 15$ нс, $E_0 = 450$ кэВ, $f \approx 0,05$, $h = 2$ мм), ▲ – эксперимент [2]

Кривая 1 на рисунке 13 – это время задержки зажигания ТЭНа с учетом радиационной затравки в реакции автокатализа с радиационным выходом $f \approx 0,05$, а кривая 2 – без радиационной затравки. Из сравнения двух кривых реакции видно, что реакция автокатализа с радиационной затравкой снижает время задержки инициирования ТЭНа пучком электронов.

Основные результаты и выводы

1. Получены выражения для расчета критической температуры и плотности пороговой энергии зажигания конденсированных взрывчатых веществ пучком электронов малой длительности, которые учитывают радиус пучка электронов и плавление взрывчатых веществ. Показано, что влияние радиуса пучка электронов на условие зажигания взрывчатых веществ необходимо учитывать только при линейной длине пробега электронов, сопоставимом с радиусом пучка.

2. Разработаны и подготовлены к внедрению программные комплексы для решения нелинейных связанных уравнений термоупругости с экзотермической реакцией первого порядка и реакцией автокатализа.

3. Численно рассчитана рядовая зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ сильноточным пучком электронов. Порог зажигания ВВ возрастает в следующем порядке: ТЭН, гексоген, октоген, ГАТБ.

4. Проведена оценка давления плазмы в реакционной области при детонации ТЭНа. Полученное значение давления согласуется с литературными данными по давлению в детонационной волне, образующейся при ударе ТЭНа.

5. Показано, что если время задержки зажигания меньше примерно одной восьмой периода колебаний, то основной вклад в изменение температуры в индукционном периоде обусловлен изменением энергии активации химической реакции. В случае если время задержки зажигания превышает одну восьмую периода колебаний, то динамика изменения температуры от времени принимает пилообразный характер вследствие преобразования механической энергии в тепловую.

6. Показано, что учет работы упругих напряжений в уравнении теплопроводности при положительном значении активационного объема приводит к уменьшению времени задержки зажигания ВВ. При активационном объеме $\Delta V^* = 12 \cdot 10^{-10}$ эВ/Па, и экспериментальном значении плотности энергии пучка электронов $W = 15$ Дж/см² расчетное время задержки зажигания ТЭНа согласуется с экспериментальным временем задержки.

7. Возникновение пилообразных колебаний температуры в максимуме поглощения пучка электронов вызвано работой упругих напряжений. Амплитуда колебаний температуры в максимуме зависит от коэффициента линейного расширения вещества, модуля всестороннего сжатия и температуры.

8. Модуль термоупругих напряжений заметно меньше экспериментального значения давления в детонационной волне. Следовательно, возникающие

термоупругие напряжения не могут вызвать детонацию органических ВВ термоупругим ударом даже в случае отражения от жесткой преграды.

9. Расчеты показали, что радиационно образованные активные частицы являются «затравкой» реакции автокатализа, вследствие чего реакция автокатализа снижает как энергетический порог зажигания, так и время задержки зажигания конденсированных взрывчатых веществ. Концентрация активных частиц, образованных по тепловому механизму, по окончании импульса электронов аномально мала и не влияет на порог зажигания ВВ пучком электронов.

Список цитируемой литературы

1. Электрический пробой и взрывное разложение монокристаллов тетранитрата пентаэритрита при облучении электронным пучком / В.И. Олешко, В.М. Лисицын, А.С. Скрипин, В.П. Ципилев // Письма в ЖТФ. – 2012. – Т. 38, вып. 9. – С. 37–43.

2. Исследование ранних стадий взрывного разложения кристаллов тетранитропентаэритрита при иницировании импульсными электронными пучками / Б.П. Адуев, Г.М. Белокуров, С.С. Гречин, В.Н. Швайко // Известия вузов. Физика. – 2007. – № 2. – С. 3–9.

3. Морозов, В.А. К вопросу о возбуждении детонации в бризантных взрывчатых веществах / В.А. Морозов, Г.Г. Савенков // Химическая физика. – 2013. – Т. 32, № 6. – С. 69–77.

4. *Tatsuo Tabata*. An Algorithm for the Energy Deposition by Fast Electrons / Tatsuo Tabata, Rinsuke Ito // Nuclear Science and Engineering. – 1974. – Vol. 53. – P. 226–239.

5. Бацанов, С.С. Использование сильноточного РЭП для осуществления структурных превращений / С.С. Бацанов, Б.А. Демидов, Л.И. Рудаков // Письма в ЖЭТФ. – 1979. – Т. 30, вып. 9. – С. 611–613.

6. Морозов, В.А. Критерий ударно-волнового иницирования детонации в твердых взрывчатых веществах / В.А. Морозов, Ю.В. Петров, Г.Г. Савенков // Доклады АН. – 2012. – Т. 445, № 3. – С. 286–288.

7. О природе свечения, возникающего при облучении тетранитропентаэритрита электронным пучком / В.И. Олешко, В.И. Корепанов, В.М. Лисицын, В.П. Ципилев // ФГВ. – 2007. – Т. 43, № 5. – С. 87–89.

Список основных публикаций по теме диссертации

1. Дугинов Е.В. Влияние термоупругих напряжений на экзотермическую реакцию при иницировании РЕТН электронным импульсом / Е.В. Дугинов, Г.А. Иванов, А.В. Ханефт // Известия вузов. Физика. – 2009. – № 8/2. – С. 30–33.

2. Ханефт А.В. Моделирование иницирования ТЭНа пучком электронов наносекундной длительности / А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов, Г.А. Иванов // Химическая физика и мезоскопия. – 2012. – Т. 14, № 1. – С. 28–39.

3. *Khanefst A.V.* Radiation-thermal mechanism of initiation of PETN in the absorption region of the electron pulse / A.V. Khanefst, G.A. Ivanov // Известия вузов. Физика. – 2012. – Т. 55, № 11-3. – С. 71–75.

4. Критерии зажигания энергетических материалов лазерным и электронным импульсами / А.В. Ханефт, В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, Г.А. Иванов // Вестник КемГУ. – 2013. – Т. 3, № 3 (55). – С. 31–39.

5. *Иванов Г.А.* Влияние параметров пучка электронов на зажигание энергетических материалов / Г.А. Иванов, А.В. Ханефт // Химическая физика и мезоскопия. – 2013. – Т. 15, № 4. – С. 523–529.

6. *Иванов Г.А.* Радиационно-термический механизм инициирования ТЭНа в области поглощения пучка электронов наносекундной длительности / Г.А. Иванов, А.В. Ханефт // Химическая физика. – 2013. – Т. 32, № 12. – С. 38–44.

7. *Иванов Г.А.* Влияние распределения энергии электронов по радиусу пучка на критическую энергию зажигания конденсированного вещества / Г.А. Иванов, Е.В. Дугинов А.В. Ханефт // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 4/2. – С. 578–582.

8. *Khanefst A.V.* Radiation-thermal mechanism of initiation of PETN in the absorption region of the electron beam / A.V. Khanefst, G.A. Ivanov // Energetic Materials: 43th International Annual Conference of ICT, FRG, Karlsruhe, 26–29 June, 2012. – Karlsruhe, 2012. – P. 17-1–17-11.

Кроме того, опубликовано 6 докладов и тезисов докладов в материалах российских и международных конференций.

Подписано в печать 26.12.2014. Формат 60×84¹/₁₆. Бумага офсетная № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,2. Тираж 100 экз. Заказ № 391

Адрес издательства и типографии «АИ «Кузбассвуиздат»:
650099, г. Кемерово, пр. Советский, 60Б. Тел. 8 (3842) 58-29-34, т/факс 36-83-77.
E-mail: 58293469@mail.ru, vuzizdat@gmail.com