

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ ДЕТОНАЦИИ И МЕТОДОВ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

Явление детонации лежит в основе многочисленных технологий полезного использования энергии взрыва взрывчатых веществ (ВВ). История его открытия и изучения насчитывает более ста лет, но многие стороны остаются не ясными.

Основной задачей исследований детонации является разработка такой теории, которая содержала бы решение следующих вопросов: физическая модель явления, стационарность процесса и правило отбора скорости (условие Чепмена – Жуге), механизм и кинетика превращения вещества, расчет параметров, обоснование и предсказание пределов инициирования и существования. Все эти вопросы взаимосвязаны, и решение их во многом зависит от конкретного механизма и кинетики превращения вещества в зоне реакции детонационной волны (ДВ), которые до настоящего времени детально не изучены. Важным этапом на пути решения указанных задач явилась разработка в 40-х годах на базе классической теории Чепмена – Жуге (ЧЖ) современной гидродинамической теории детонации в работах Зельдовича, Неймана и Деринга (модель ЗНД) [7]. По модели ЗНД детонация представляет собой стационарное распространение по ВВ комплекса из ударного фронта (УФ) и зоны химической реакции за ним. Ударный фронт инициирует химическую реакцию из-за сильного повышения температуры при сжатии ВВ (ударный механизм), а образующиеся при высоком давлении и температуре газы в конце зоны реакции оказывают «поршневое» действие, поддерживая постоянными параметры УФ. Сверхзвуковые скорости распространения ДВ обеспечиваются высокими скоростями химического разложения ВВ за УФ, хотя конкретный механизм его не рассматривается.

Первоначально теория была предложена для газов, но, как выяснилось позже, основные ее положения применимы и для описания детонации конденсированных ВВ [2]. Процесс детонации по модели ЗНД на диаграмме давление – удельный объем показан на рис.1, а. Переход вещества из начального (точка O) в сжатое состояние за УФ описывается ударной адиабатой исходного вещества (кривая 1). Детонационная адиабата (кривая 2) характеризует возможные состояния конечных продуктов превращения. Процесс самоподдерживающейся детонации описывается совместным решением

уравнения для прямой Михельсона (OA), тангенс угла наклона которой к оси абсцисс определяет квадрат скорости фронта $D^2/V_0 = (P - P_0)/(V - V_0)$, и детонационной адиабаты, которая в параметрическом виде описывается уравнением $E - E_0 = \frac{1}{2}(P + P_0)/(V_0 - V) + Q$ (где E и E_0 – внутренняя энергия продуктов превращения и исходного ВВ соответственно; Q – теплота превращения). В соответствии с опытом единственному значению скорости отвечает касание прямой Михельсона к кривой 2 в точке B (точка Чепмена – Жуге). Касание означает, что в точке B скорость волны относительно продуктов реакции $D - U_1$ равна местной скорости звука C_1 . Этим объясняется стационарность процесса. Условие касания означает также, что из всех возможных режимов детонации осуществляется только один с минимальной скоростью (правило отбора скорости). Условие касания было постулировано в модели ЧЖ, но не доказано. Оставалась возможность осуществления недосжатых режимов, характеризующихся большими скоростями

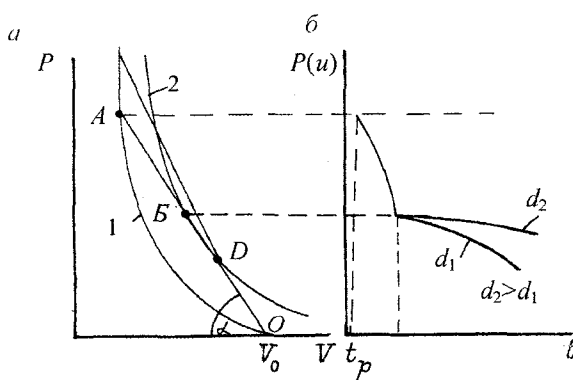


Рис.1

фронта и меньшими, чем в точке Чепмена – Жуге, давлениями (например, точка D , рис.1, a). Эта возможность обусловлена тем, что по модели ЧЖ в УФ вещество переводится из начального (точка O) состояния в конечное (точка B или точка D при недосжатом режиме) мгновенно. По модели ЗНД, наоборот, химическое разложение вещества происходит за время, гораздо большее (на порядки), чем сжатие его в УФ. Поэтому процесс неравновесного перехода вещества от исходного к сжатому в УФ не рассматривается, а его состояние непосредственно за УФ описывается ударной адиабатой исходного вещества. Следовательно, по модели ЗНД в стационарном самоподдерживающемся режиме детонации, имеющем скорость, определяемую точкой касания B , исходное вещество сначала попадает в точку A , лежащую на ударной адиабате исходного вещества, а затем его состояние по мере протекания химической реакции непрерывно меняется сверху вниз до точки B . Из диаграммы $P - V$ следует также, что все промежуточные состояния вещества в зоне реакции движутся с постоянной скоростью D , при этом давление в точке A максимально и снижается по мере приближения к точке B , а объем растет. Таким образом, по модели ЗНД за УФ должна существовать стационарная область повышенных давлений («химпик», рис.1, b). Распределение давления или массовой скорости по времени или координате в зоне реакции определяется кинетикой химических реакций, а за звуковой поверхностью в волне разрежения оно зависит от геометрических размеров заряда, наличия и свойств оболочки.

Предложенная в теории ЗНД физическая модель процесса и механизм превращения вещества дали возможность доказать невозможность осуществления недосжатых режимов и обосновать тем самым единственность режима детонации, определяемого точкой касания. Однако это доказательство было дано для частного случая одномерности течения за УФ и экзотермичности от начала до конца химической реакции. В действительности чаще всего УФ детонационной волны в конденсированных ВВ не является гладким в силу физической неоднородности заряда, что может приводить к турбулентности потока за ним, а также не исключена возможность протекания наряду с экзотермическими эндотермическими реакциями, особенно в смесевых ВВ. Поэтому вопрос о доказательстве невозможности осуществления недосжатых режимов детонации в общем случае остается открытым. Рассмотрение его в ряде теоретических работ [10] привело к выводу о том, что и при турбулентном потоке вещества в УФ условие касания выполняется, если коэффициент Грюнайзена для продуктов реакции $\Gamma > 2/3$ и состояние вещества в процессе реакции и затухания турбулентности на диаграмме $P - V$ приходит к равновесному сверху вниз.

Условие касания является важнейшим вопросом в теории детонации не только для объяснения стационарности процесса. Оно дает недостающее уравнение для расчета параметров детонации при известном уравнении состояния и теплоте взрывчатого превращения. Таким образом, несмотря на известный формализм, модель детонации ЗНД явилась фундаментом для развития экспериментальных и теоретических работ в целях не только подтверждения или опровержения самой теории, но и более глубокого изучения явления в целом, включая состояние вещества за УФ, механизм и кинетику его разложения на основе измерений газодинамических параметров и их распределения за фронтом. Смелое предсказание теории о наличии химпика в зоне реакции было подтверждено во многих ранних работах [5], обзорах [1,18]. Многочисленными исследованиями структуры детонационного фронта по методу преград и электромагнитным методом было показано существование химпика при детонации мощных молекулярных гомогенных (жидких) и гетерогенных индивидуальных и смесевых ВВ, включая промышленные смеси на основе нитрата аммония (обзор [16]).

Развитие и применение экспериментальной техники с большим временным разрешением для исследования ударных и детонационных волн, а также использование быстродействующей вычислительной техники позволило получить новые данные, подтверждающие справедливость теории ЗНД. Наряду с этим появились работы, в которых подвергаются сомнению ее основные положения, делаются попытки заменить ее на новые альтернативные теории. Суть новых концепций состоит в придании особой роли в механизме распространения детонации и превращения вещества за УФ неравновесным процессам сжатия и возможной деструк-

ции молекул ВВ внутри самого УФ. При этом высказываются прямо противоположные точки зрения. Так, по [6], образовавшиеся за счет деструкции части молекул ВВ активные частицы определяют процесс быстрого превращения вещества за УФ, «почти не зависящего от температуры», а, по [8], процесс разложения вещества протекает по «особому, новому механизму, в котором нестандартный неравновесный процесс (а именно перегрев) во фронте УВ играет решающую роль». В работах Уокера [11,12], наоборот, считается, что физический процесс, отвечающий за скорости ударных и детонационных волн, связан непосредственно со скоростями колебательных движений в материале, сжатом ударной волной. Эти процессы названы физической кинетикой, которая определяется как «нетепловая неравновесная концепция, основанная на кинетических микроскопических процессах сжатия, сдвига и разгрузки, которые вызывают механические разрывы связей в пределах очень узкого УФ (размерами от 70 до 100 А)». В работах Тарвера [25] делаются попытки синтеза двух принципиально различающихся подходов к обоснованию физической модели детонации твердых ВВ. В предлагаемой автором «неравновесной теории детонации ЗНД в твердых ВВ» последовательно рассматривается изменение состояния вещества внутри УФ и за ним.

Следует отметить, что критика теории детонации ЗНД, концепции и аргументы в пользу новых представлений о явлении даются авторами в большинстве работ без тщательного анализа их собственных и полученных к настоящему времени результатов других исследователей. Так, представления Уокера о нетепловой природе разложения ВВ за фронтом ударных и детонационных волн возникли давно на основе неправильной трактовки его собственных опытов по инициированию нитрометана (НМ) ударной волной сравнительно низкой (6 ГПа) амплитуды и большой (40 мкс) длительности, на что указывалось в работе [17]. Полученные к настоящему времени многочисленные данные по времени задержки взрыва при инициировании ударными волнами гомогенных (жидких) ВВ и данные по температуре ударного разогрева инертных материалов и ВВ подтверждают тепловую природу возникновения химического разложения ВВ в ударных и детонационных волнах [4,5,17]. Сильный нагрев вещества за УФ и аррениусовская зависимость скорости химических реакций от температуры, как и в газах, являются, видимо, основным фактором, определяющим колоссальные скорости распространения детонационных волн в конденсированных ВВ (КВВ). Из известных механизмов термического разложения ВВ при детонации реализуется только один механизм – механизм гомогенного (объемного) адиабатического теплового взрыва как в гомогенных (жидких), так и в гетерогенных индивидуальных и смесевых КВВ [5,14,15]. При этом период индукции всегда значительно меньше, чем общее время реакции (время химпика), и это принципиально отличает детонацию от нестационарных и квазистационарных взрывных процессов в КВВ [19]. Отсутствие заметного периода индукции означает, что химическая реакция всегда «привязана» к УФ, размеры которого существенно зависят как от параметров самого фронта, так и от химической природы, агрегатного состояния, компонентного состава и исходной физической структуры заряда ВВ. Поэтому вопрос о равновесности состояния вещества непосредственно за УФ детонационной волны, как и во всей стационарной зоне, не может быть решен однозначно без учета этих факторов.

Анализ экспериментальных данных по ударным адиабатам гомогенных (жидких) и гетерогенных ВВ различной пористости и размеров частиц компонентов, которые надежно получены в области сравнительно низких, по сравнению с давлениями на УФ, детонационных волн, показывает, что принципиально они не отличаются между собой и от ударных адиабат инертных материалов с близкими к ВВ свойствами [3]. В координатах $D - U$ (скорость фронта – массовая скорость) они описываются линейными зависимостями в области давлений детонации КВВ. Параметры на УФ (массовая скорость, давление), рассчитанные по известной скорости детонации и ударным адиабатам, совпадают, как правило, с максимальными регистрируемыми в эксперименте параметрами химпика. При этом возможные отклонения зависят как от точности определения самих ударных адиабат, так и от погрешностей регистрации состояний вещества в зоне реакции. Поэтому для проверки основ теории предпочтение следует отдавать экспериментам с гомогенными (жидкими) ВВ, ударные адиабаты которых определя-

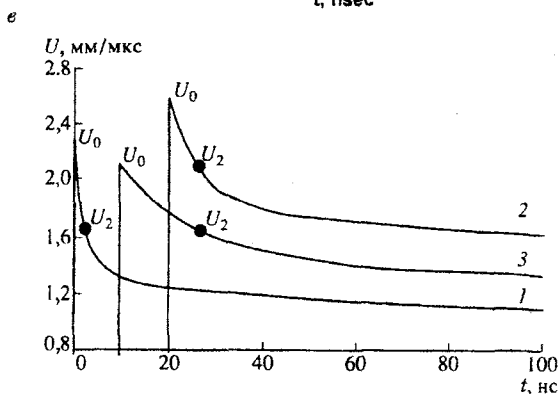
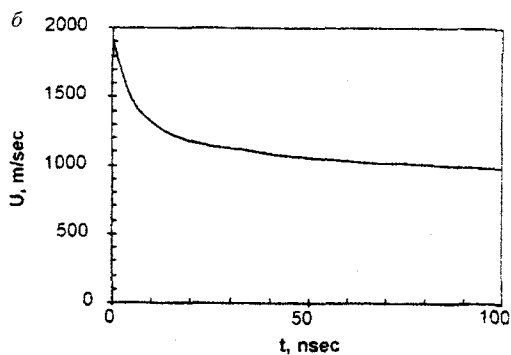
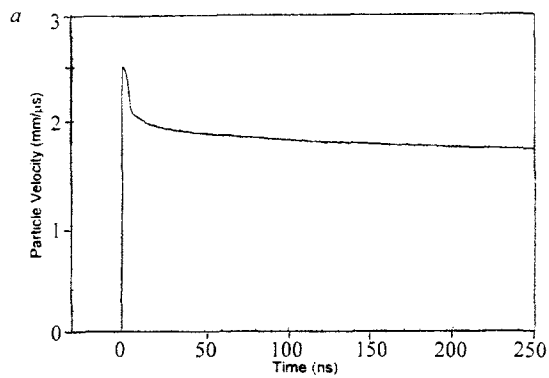


Рис.2

ются с достаточно высокой точностью из-за их химической инертности в значительном диапазоне динамических давлений (до 10 ГПа). Надежность регистрации параметров состояния вещества за УФ детонационной волны определяется во многом техникой постановки и интерпретацией результатов эксперимента, временным разрешением регистрирующей аппаратуры. Применение в последнее время техники с наносекундным разрешением по времени при тщательном подходе к ее воплощению дало новые подтверждения того, что состояние вещества непосредственно за УФ детонационной волны лежит на ударной адиабате исходного вещества. Рассмотрим профили массовой скорости (рис.2), полученные лазерными интерферометрами (разрешение по времени 2-3 нс) на границе раздела «детонирующее ВВ – инертная преграда»: а – НМ – плексиглас [24]; б – смесь тетронитрометан – нитрометан, 46/54, $\rho_0 = 1,365 \text{ г/см}^3$, кристалл LiF [21]; в – кривая 1 – пластифицированный ТЭН, $\rho_0 = 1,525 \text{ г/см}^3$, кривая 2 – пластифицированный октоген (10 % связки), $\rho_0 = 1,86 \text{ г/см}^3$, кривая 3 – состав тротил – гексоген, 50/50, $\rho_0 = 1,67 \text{ г/см}^3$, материал преграды – LiF [13]. Кривая 2 смещена на 20 нс, кривая 1 – на 10 нс. Рассчитанные по этим данным значения массовой скорости и давлений на ударном фронте полностью совпадают с расчетом по ударным адиабатам ВВ. На рис.3 приведены некоторые результаты наших исследований зависимости скорости детонации от диаметра заряда и материала оболочки (а) и профилей массовой скорости $U(t)$ за УФ при близких к идеальным режимам детонации ($D = 6,0 \text{ км/с}$) эмульсионного ВВ, $\rho_0 = 1,25 \text{ г/см}^3$, содержащего 1,25 % микросфер. Профили $U(t)$ получены электромагнитным ме-

тодом (временное разрешение 0,1 мкс). Из кривых $U(t)$ следует предсказанное моделью ЗНД наличие независимой от геометрии заряда стационарной зоны длительностью около 0,8 мкс. При этом максимальное значение массовой скорости $U_\phi = 2,1 \text{ км/с}$ совпадает с расчетным – 2,04 км/с, (пунктирная линия) по ударной адиабате $D = 1,92 + 1,98U$, полученной в [22] для близкого к исследуемому по составу эмульсионному ВВ ($\rho_0 = 1,248 \text{ г/см}^3$, с 1 % микросфер). Соответствие параметров состояния вещества непосредственно за УФ детонационных волн, рассчитанных по ударным адиабатам исходного вещества и известной скорости фронта, очевидно, означает отсутствие заметного химического разложения вещества внутри УФ. Это дает основание, по аналогии с трактовой ударных адиабат инертных материалов, считать, что разложение за УФ начинается в условиях достижения механического и теплового равновесия при детонации индивидуальных гомогенных и гетерогенных ВВ. При детонации бинарных смесевых ВВ и многокомпонентных систем, содержащих ВВ и различные добавки, в силу адиабатического характера и высокой скорости превращения вещества, тепловое равновесие, по видимому, не имеет место непосредственно за УФ и во всей стационарной зоне, а, следовательно, и нет химического равновесия в точке Чепмена – Жуге.

Таким образом, полученные к настоящему времени экспериментальные данные дают веские доказательства справедливости основных положений модели детонации ЗНД и несостоятельности альтернативных моделей и представлений, основанных на ведущей роли неравновесных процессов внутри УФ в механизме распространения и превращении вещества в процессах детонации КВВ. Однако ясно, что и модель ЗНД не дает решения всех проблем детонации КВВ, ее следует рассматривать как основу для дальнейших экспериментальных и теоретических исследований. Действительно, введение «ударного» механизма в модели ЗНД позволило создать более реалистичную физическую модель явления и доказать правило отбора скорости. В то же время ударный механизм означает, что процесс превращения вещества в зоне реакции в основе является адиабатическим. И в этом заложено внутреннее противоречие теории, когда она применяется для расчета идеальной детонации смесевых систем. Для них детонационной адиабаты равновесного состава продуктов превращения, которая фигурирует в модели ЗНД, заведомо не должно существовать. Поэтому даже при наличии надежного уравнения состояния продуктов детонации использование существующих термодинамических расчетов для прогнозирования параметров детонации смесевых КВВ является теоретически необоснованным. Видимо, это обстоятельство и отсутствие строгого уравнения состояния продуктов детонации приводит к сильному разбросу параметров детонации смесевых систем, что иллюстрируется таблицей. Для примера в ней приведены значения скоростей детонации и давлений нитрата аммония и некоторых смесей на его основе, рассчитанных термодинамическими методами с использованием различных уравнений состояния продуктов. Большой разброс в параметрах (до 1,0 км/с по скорости фронта) ставит такие расчеты на уровень инженерных, которые для сравнительной характеристики различных ВВ между собой или приблизительных оценок могут быть легко выполнены разработанными к настоящему времени экспресс-методами для исследованных классов ВВ. Возможно и в «идеальных» режимах детонации индивидуальных (молекулярных) ВВ также не достигается химического равновесия в состоянии Чепмена – Жуге, но возможные ошибки из-за этого в термодинамических расчетах компенсируются соответствующим выбором вида уравнения состояния или коэффициентов в нем.

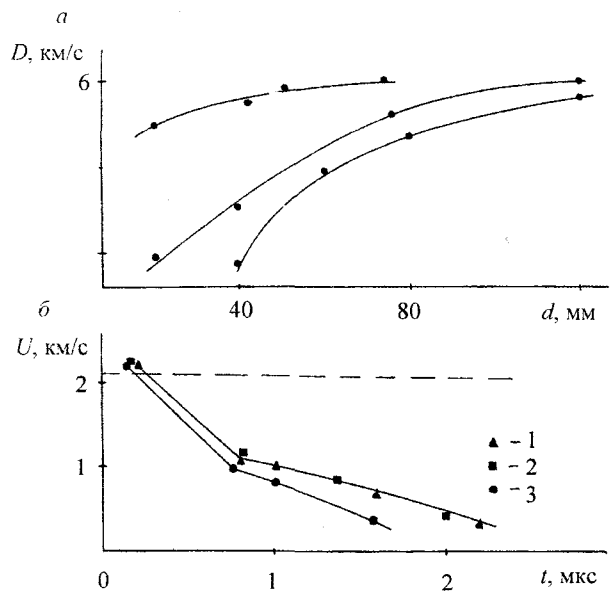


Рис.3
1 – $d = 55$ мм, сталь; 2 – $d = 120$ мм, бетон;
3 – $d = 120$ мм, бумага

Параметры детонации смесевых систем

УРС	НА, $\rho_0 = 0,85$ г/см ³ [23]		ИГДАНИТ, $\rho_0 = 0,85$ г/см ³ [20]		ЭВВ, $\rho_0 = 1,35$ г/см ³ [9]	
	D , км/с	P , ГПа	D , км/с	P , ГПа	D , км/с	P , ГПа
ВКВ	4,71	3,5	5,33	6,8	7,58	18,4
ICZ-3	4,01	4,9	4,96	5,6	-	-
ВКВ-R	-	-	5,43	6,9	7,08	15,8
КНТ	4,23	3,9	-	-	-	-
КОВОЛЮМ	3,6	3,0	-	-	-	-
IWL	-	-	4,65	6,0	-	-
ВКВ-RR	-	-	-	-	7,13	16,0
ВКВ-TNT	-	-	-	-	6,55	14,5

Очевидно, дальнейшее развитие теории идеальной и создание теории неидеальной детонации КВВ должно базироваться на детальном изучении и учете механизма и кинетики химического разложения вещества в условиях детонации. От решения этих вопросов во многом зависит и разработка пределов инициирования и существования режимов детонации КВВ, которая находится в стадии накопления фактов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Альтшулер Л.В.* Режимы детонации и параметры Жуге конденсированных взрывчатых веществ / Л.В.Альтшулер, Г.С.Доронин, В.С.Жученко // ФГВ. 1989. Т.25. С.84-103.
2. *Веретенников А.В.* О применимости гидродинамической теории к детонации конденсированных ВВ / А.В.Веретенников, А.Н.Дремин, О.К.Розанов, К.К.Шведов // Физика горения и взрыва. Новосибирск: Наука, 1967, № 1. С.3-10.
3. *Воскобойников И.М.* Определение критических условий инициирования ударной волной гомогенных ВВ / И.М.Воскобойников, В.М.Богомолов, А.Я.Апин // Физика горения и взрыва. Новосибирск: Наука, 1969. Т.5. № 4. С.471-474.
4. *Воскобойников И.М.* Расчет давления инициирования взрыва гомогенных взрывчатых веществ ударной волной / И.М.Воскобойников, В.М.Богомолов, А.Я.Апин // ФГВ. 1968. Т.4. № 1. С.45-49.
5. *Дремин А.Н.* Детонационные волны в конденсированных средах / А.Н.Дремин, С.Д.Савров, В.С.Трофимов, К.К.Шведов. М.: Наука, 1970.
6. *Дремин А.Н.* К теории детонации // Химическая физика. М.: Наука, 1995. Т.14. № 12. С.22-40.
7. *Зельдович Я.Б.* Теория детонации / Я.Б.Зельдович, А.С.Компанец. М.: Гостехиздат, 1955.
8. *Клименко В.Ю.* Многопроцессорная модель детонации (версия 3) // Химическая физика. М.: Наука, 1998. Т.17. № 1. С.11-24.
9. *Одинцов В.В.* Оценка термодинамической неидеальности детонации эмульсионного ВВ / В.В.Одинцов, В.И.Пепекин, Б.Н.Кутузов // Конверсия. М: ИЗАНА, 1996. № 4. С.29-32.
10. *Трофимов В.С.* К обоснованию правила отбора для скорости детонации / В.С.Трофимов, А.Н.Дремин // ФГВ. 1966. Т. 2. № 3. С.19-30.
11. *Уокер Ф.Е.* Новое подтверждение идеи физической кинетики // Химическая физика. М.: Наука, 1998. Т.17. С.25-29.
12. *Уокер Ф.Е.* Сравнение классической и современной теории детонации // Химическая физика. М.: Наука, 1995. Т.14. № 12. С.47-67.
13. *Федоров А.В.* Структура детонационного фронта в гетерогенных ВВ / А.В.Федоров, А.В.Меньших, Н.Б.Ягодин // Химическая физика. М: Наука, 1999. Т.18. № 11. С.64-68.
14. *Шведов К.К.* Некоторые вопросы детонации твердых неоднородных ВВ // Химическая физика горения и взрыва. Детонация / ИХФЧ РАН. Черноголовка, 1992. С.14-21.
15. *Шведов К.К.* О влиянии физического состояния и структуры заряда тротила на время разложения в детонационной волне / К.К.Шведов, С.А.Колдунов // Горение и взрыв: Материалы 4-го Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. М: Наука, 1974. С.439-446.
16. *Шведов К.К.* О параметрах детонации промышленных ВВ и их сравнительной оценке / К.К.Шведов, А.Н.Дремин // Взрывное дело. М: Недра, 1976. № 76/33. С.137-150.
17. *Шведов К.К.* О разложении тетранитрометана в ударных волнах / К.К.Шведов, С.А.Колдунов // Химическая физика горения и взрыва. Детонация: Материалы 4-го Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. М: Наука, 1980. С.60-64.
18. *Шведов К.К.* О регистрации параметров Чепмена – Жуге при детонации КВВ // ФГВ. 1987. № 4. С.94.
19. *Шведов К.К.* Физические модели развития ударной волны до детонационной в неоднородных конденсированных ВВ / К.К.Шведов, В.В.Лавров // Химическая физика. М: Наука, 1998. № 3. С.74-80.
20. *Bjarnholt G., Srinivas M.A.* // II Совещание по обработке материалов взрывом. Новосибирск: СО АН СССР, 1982. С.185-189.
21. *Fedorov A.V.* Detonation front in homogenous and heterogenous high explosives / A.V.Fedorov, E.V.Zotov, G.B.Krasovsky a.o. // CP505, Shock compression of condensed matter, American Institute of Physics. 1999. P.801-804.
22. *Lee J.* Detonation and shock initiation properties of emulsion explosives / J.Lee, E.W.Sandstrom, B.G.Graig and P.A.Persson // Proceed. of the 9-th Symp. (Int) on Detonation, Portland, Oregon, 1989.
23. *Miyake A.* Non-ideal detonation behavior of prilled ammonium nitrate / A.Miyake, T.Ogava // Proceed. of the 17-th Int. Pyrotechnics seminar and the 2-nd Int. Symp. on Pyrotechnics and Explosives, Beijing Institute of Technology Press: Beijing, China, 1991. P.31-38.
24. *Sheffield S.A.* Detonation physics and chemistry: Experimental state of the art / S.A.Sheffield, R.Engelke, R.Gustafson, L.Davis // Материалы международной конференции «Ударные волны в конденсированных материалах»: Тезисы докладов. СПб, 1998. С.72-76.
25. *Tarver C.M.* Energy transfer in solid explosives / C.M.Tarver, L.E.Fried, A.J.Ruggero and D.F.Galef // Proceed. 10-th Symp. (Int) on Detonation, Boston, Massachusetts, 1993. P.741-748.