

А. В. Уткин, И. Ф. Головнев, В. М. Фомин

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия

Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЕЩЕСТВА НА СВОЙСТВА ДЕТОНАЦИИ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВАХ*

В представленной работе в рамках метода молекулярной динамики проводилось численное исследование влияния молекулярных параметров конденсированного взрывчатого вещества на характеристики детонационной волны. Было проведено сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования с предсказаниями континуальной теории детонации, в частности выполнена проверка условия Чепмена–Жуге. В результате исследований была разработана ясная и четкая методология построения уравнения состояния продуктов детонации для общего случая, когда невозможно использовать уравнение состояния идеального газа.

Введение

Целью данного исследования является решение фундаментальной проблемы влияния молекулярных параметров конденсированного взрывчатого вещества на характеристики детонационной волны. Решение этой проблемы позволит как управлять явлением детонации путем изменения физико-химического состава исходного конденсированного взрывчатого вещества (КВВ), так и получать новые КВВ с контролируемой величиной и скоростью энерговыделения, что открывает практически неограниченные возможности по использованию взрыва. Это касается не только таких традиционных областей применения, как разведка и разработка месторождений полезных ископаемых, гидротехническое строительство, сварка взрывом и взрывное компактирование порошков, но и таких достаточно новых областей применения, как синтез новых материалов, которые невозможно получить в равновесных условиях и для создания которых требуются экстремально высокие температуры и давления.

Все это обуславливает актуальность исследования как детализированной структуры фронта детонационной волны, так и механизма протекания химических реакций, которые вызывают и поддерживают детонационную волну. Следует отметить, что модели, основанные на континуальной теории, не дают и не могут дать информацию о микроско-

пических химических и физических процессах во фронте детонационной волны КВВ. Кроме этого, так как во фронте имеется сильно неравновесное состояние, замыкание системы макроскопических уравнений механики сплошной среды путем привлечения различных феноменологических соотношений вызывает определенные затруднения. Весьма дорогостоящие экспериментальные исследования химических реакций, структуры детонационных и ударных волн в конденсированных средах также связаны со значительными трудностями, вызванными, во-первых, высокой интенсивностью рассматриваемых процессов и, во-вторых, масштабами явления, как во времени, так и в пространстве.

Все вышеприведенные причины и обусловили необходимость применения метода молекулярной динамики, который, в силу своего пространственно-временного масштаба, дает уникальную возможность для детализированных исследований на субатомном уровне как особенности механизма химических реакций и переноса энергии, которые управляют детонационной волной, так и условий, которые влияют на эти механизмы.

Метод исследования и физическая система

В качестве физической системы рассматривался трехмерный гипотетический молекулярный кристалл, имеющий кубическую структуру (рис. 1).

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект РНП.2.2.2.3.10036), а также в рамках проектов № НШ-8732.2006.1 и МК-2061.2006.1.

Для моделирования межмолекулярного взаимодействия использовался двухчастичный член потенциала Стиллинджера–Вебера:

$$U_{inter} = e_{inter} \left(\frac{b_{inter}}{r_{ij}^4} - 1 \right) \times \text{Exp} \left(\frac{\sigma_{inter}}{r_{ij} - a_{inter}} \right). \quad (1)$$

Внутримолекулярное взаимодействие описывает сборный потенциал, допускающий протекание экзотермической реакции типа $A_2 \rightarrow A + A + Q$:

$$U_{intra1} = e_{intra} \left(\frac{b_{intra}}{r_{ij}^4} - 1 \right) \times \text{Exp} \left(\frac{\sigma_{intra}}{r_{ij} - a_{intra}} \right) + d_0, \quad (2)$$

$$r_{ij} < a_{intra},$$

$$U_{intra2} = U_{cut} \text{Exp} \left(- \left(\frac{r_{ij} - a_{intra}}{s_{intra2}} \right)^3 \right), \quad (3)$$

$$r_{ij} \geq a_{intra}.$$

Численный эксперимент проводился с кристаллом, помещенным в адиабатическую оболочку, ограничивающую разлет продуктов реакции в плоскости YZ. Этот вариант граничных условий интересен тем, что позволяет свести трехмерную задачу в данной постановке на микроуровне к одномерной задаче континуальной теории детонации. Адиабатическая оболочка (абсолютно недеформируемая стенка) моделировалась при помощи отталкивательной ветви потенциала Леннарда–Джонса:

$$W_{surf} = 4e_{surf} \left(\frac{d_{surf}}{r - a_{surf}} \right)^8. \quad (4)$$

Массы частиц в кристалле полагались равными $m_{at} = 60; 100; 180 \cdot 10^{-27}$ кг, а энергия активации (предел диссоциации) составляет $8 \cdot 10^{-21}$ Дж. Инициирование реакции осуществлялось при помощи постоянной силы F_0 , действующей на левую грань кристалла в течение временного интервала $\tau_c = 2 \cdot 10^{-13}$ с.

Тепловой эффект химической реакции изменялся в широком диапазоне значений: $Q = 300 \div 1602,19 \cdot 10^{-21}$ Дж. Это достига-

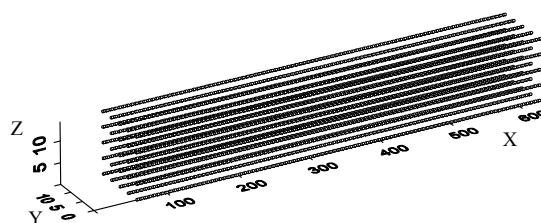


Рис. 1. Внешний вид невозмущенного 3-D кристалла (линейные размеры по осям указаны в ангстремах)

лось варьированием двух параметров d_0 и U_{cut} потенциала межатомного взаимодействия (2, 3). Поскольку такие свойства системы, как плотность, скорость звука и модуль Юнга при этом остаются неизменными, это делает возможным однозначное определение связи между величиной теплового эффекта химической реакции и структурой детонационной волны, состоящей из ударного фронта и области химических реакций, задняя граница которой определяется точкой Чепмена–Жуге (согласно определению, в этой точке наступает локальное термодинамическое равновесие и завершаются химические реакции).

Для численного моделирования была использована пропагаторная реализация метода молекулярной динамики (численная схема второго порядка точности по временному шагу). Суть этого метода состоит в следующем. Общий вид функции Гамильтона для 3-D кристалла:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_{xi}^2}{2m_i} + \frac{p_{yi}^2}{2m_i} + \frac{p_{zi}^2}{2m_i} \right) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{k=i+1}^N U_{ik} + W(x_1, \dots, x_N), \quad (5)$$

где p_{xi}, p_{yi}, p_{zi} – компоненты импульса \vec{p}_i , N – число атомов в системе, а m_i – масса частицы i (в дальнейшем просто m_{at}).

Первое слагаемое – это кинетическая энергия атомов, второе – потенциальная энергия взаимодействия атомов между собой, а третье – описывает взаимодействие атомов с внешним полем. В рассматриваемом случае внешний потенциал взаимодействия примет достаточно простой вид:

$$W(x_1, \dots, x_N) = - \sum_j F_0 x_j + W_{surf}, \quad (6)$$

где F_0 – сила, действующая на левую грань кристалла (перпендикулярно плоскости YZ),

причем суммирование ведется по атомам левой грани, а W_{surf} определяется в (4).

Для численного расчета траекторий в пропагаторной реализации метода молекулярной динамики эволюция системы описывается не дифференциальными уравнениями Гамильтона, а с помощью классического пропагатора $\hat{U}(t)$, т. е.:

$$\bar{p}_i(t) = \hat{U}(t) \bar{p}_i(0), \quad (7)$$

$$\bar{r}_i(t) = \hat{U}(t) \bar{r}_i(0), \quad (8)$$

где $\hat{U}(t)$ следует понимать в смысле ряда

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^n}{n!} (i\hat{L})^n, \quad (9)$$

здесь \hat{L} – оператор Лиувилля. Для вышеприведенной функции Гамильтона этот оператор имеет вид

$$i\hat{L} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial p_{xj}} + \frac{\partial H}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial p_{yj}} + \frac{\partial H}{\partial z_j} \frac{\partial}{\partial p_{zj}} \right) - \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial p_{xj}} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial H}{\partial p_{yj}} \frac{\partial}{\partial y_j} + \frac{\partial H}{\partial p_{zj}} \frac{\partial}{\partial z_j} \right), \quad (10)$$

где H – функция Гамильтона.

В этом случае обобщенные импульсы и координаты на $(k+1)$ -м временном слое определяются по следующим явным формулам:

$$p_{\xi_i}^{k+1} = \sum_{n=0}^2 \frac{(-1)^n \tau^n}{n!} (i\hat{L}_k)^n p_{\xi_i}^k, \quad (11)$$

$$\xi_i^{k+1} = \sum_{n=0}^2 \frac{(-1)^n \tau^n}{n!} (i\hat{L}_k)^n \xi_i^k, \quad (12)$$

где $\xi = x, y, z$.

В расчетах величина шага по времени τ подбиралась исходя из требований точности (в представленном исследовании он составлял 10^{-16} с), при этом величина ошибки в конце процесса оставалась в пределах 1 %. Для большей наглядности все нижеприведенные результаты относились к начальной температуре кристалла $T = 0$, К (когда все атомы в кристалле находились в положении равновесия). Более детальное описание потенциала и численной схемы можно найти в [1; 2].

Влияние массы атомов на зарождение и развитие детонации

Как уже упоминалось выше, численный эксперимент проводился с кристаллом, помещенным в адиабатическую оболочку, ограничивающую разлет продуктов реакции в плоскости YZ . Массы частиц в кристалле полагались равными $m_{at} = 60; 100; 180 \cdot 10^{-27}$ кг, тепловой эффект химической реакции $Q = 400 \cdot 10^{-21}$ Дж, а инициирование реакции осуществлялось при помощи постоянной силы F_0 , действующей на левую грань кристалла в течение временного интервала $\tau_c = 2 \cdot 10^{-13}$ с.

Для каждой из масс, было найдено пороговое значение силы необходимое для начала самоподдерживающейся детонации. Так, для массы $m_{at} = 60 \cdot 10^{-27}$ кг пороговое значение силы $F_0 = 20 \cdot 10^{-11}$ Н, для массы $m_{at} = 100 \cdot 10^{-27}$ кг – $F_0 = 26 \cdot 10^{-11}$ Н, для массы $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг – $F_0 = 35 \cdot 10^{-11}$ Н, т. е. увеличение массы молекулярных фрагментов приводит к уменьшению чувствительности рассматриваемого вещества. Все нижеприведенные расчеты проводились при силе $F_0 = 20,5 \cdot 10^{-11}$ Н для массы $m_{at} = 60 \cdot 10^{-27}$ кг, $F_0 = 26,5 \cdot 10^{-11}$ Н для $m_{at} = 100 \cdot 10^{-27}$ кг и $F_0 = 35,5 \cdot 10^{-11}$ Н для $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг.

Одной из основных характеристик детонационной волны является ее скорость. На рис. 2 приводятся зависимости положения фронта детонационной волны от времени для трех различных атомных масс. Видно, что для всех рассматриваемых значений массы атомов детонация является стационарной и распространяется с постоянной скоростью, большей скорости звука, причем увеличение массы приводит к уменьшению скорости детонации (суммарные результаты приводятся в табл. 1).

В качестве дополнительного доказательства стационарности рассматриваемых процессов может служить зависимость ширины зоны химической реакции от времени для атомной массы $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг (рис. 3). Из построений следует, что размер зоны химических превращений остается постоянным с точностью до флуктуаций, после выхода детонации на стационарный режим.

Для исследования на макроуровне процесса зарождения детонации в кристалле с тяжелыми атомами использовались такие макропараметры возмущенной области как внутримолекулярная энергия E_{MOL} , вращательная энергия молекул E_{ROT} , кинетическая энергия E_K и энергия центров масс молекул E_{CMOL} (рис. 4).

Таблица 1

Исследование влияния массы

Источник информации	Атомная масса, кг	Давление P_x , ГПа	Плотность ρ , кг/м ³	Скорость детонации D , км/с
Численный эксперимент	$60 \cdot 10^{-27}$	6,21	$2,3 \cdot 10^3$	3,8
Предсказания континуальной теории		6,49	$2,59 \cdot 10^3$	3,3
Численный эксперимент	$100 \cdot 10^{-27}$	6,29	$3,9 \cdot 10^3$	2,6
Предсказания континуальной теории		6,33	$4,31 \cdot 10^3$	2,51
Численный эксперимент	$180 \cdot 10^{-27}$	6,08	$6,6 \cdot 10^3$	1,92
Предсказания континуальной теории		6,01	$7,69 \cdot 10^3$	1,83

Из сравнительного анализа поведения энергетических макрохарактеристик для моделей с различными массами следует, что увеличение массы приводит к увеличению времени зарождения химической реакции при силовом воздействии, незначительно превышающем пороговое значение инициирования (все графические зависимости построены в одинаковом временном масштабе). Однако следует отметить, что качественное поведение характеристик совпадает. На основании зависимости E_{ROT} от времени можно заключить, что перед началом химической реакции в молекулярном кристалле происходит переход твердой фазы в жидкое состояние. Одновременно с увеличением E_{ROT} происходит рост остальных характеристик возмущенной области и после определенной временной задержки начинается химическая реакция.

Влияние теплового эффекта на зарождение и развитие детонации

Численный эксперимент проводился с кристаллом, помещенным в адиабатическую оболочку, ограничивающую разлет продуктов реакции в плоскости YZ. Массы частиц в кристалле полагались равными массе атома серебра $m_{at} = 179,079 \cdot 10^{-27}$ кг. Была проведена серия численных экспериментов, в которых тепловой эффект химической реакции изменялся в широком диапазоне значений: $Q = 300 \div 1602,19 \cdot 10^{-21}$ Дж. Все исследования были выполнены для инициирующей силы $F_0 = 35 \cdot 10^{-11}$ Н. Как уже упоминалось ранее, одной из основных характеристик детонационной волны является ее скорость. На рис. 5 приводятся зависимости положения

фронта детонационной волны от времени для трех различных Q .

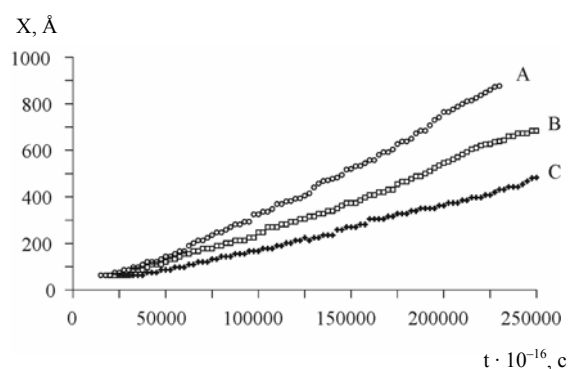


Рис. 2. Зависимость положения фронта детонационной волны от времени: A – масса атома, $m_{at} = 60 \cdot 10^{-27}$ кг; B – $m_{at} = 100 \cdot 10^{-27}$ кг; C – $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг

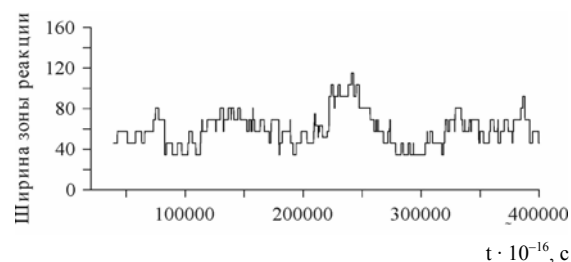


Рис. 3. Ширина зоны химической реакции (Å) как функция времени. $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг

Для всех рассматриваемых значений теплового эффекта детонация начинается в один и тот же момент времени, является стационарной и распространяется с постоянной скоростью, большей скорости звука, причем уменьшение Q приводит к уменьшению скорости детонации (суммарные результаты приводятся в табл. 2).

Таблица 2

Исследование влияния теплового эффекта химической реакции

Источник информации	Тепловой эффект Q , Дж	Давление P_x , ГПа	Плотность ρ , кг/м ³	Скорость детонации D , км/с
Численный эксперимент	$300 \cdot 10^{-21}$	4,345	$6,723 \cdot 10^3$	1,79
Предсказания континуальной теории		4,919	$7,685 \cdot 10^3$	1,654
Численный эксперимент	$680,5 \cdot 10^{-21}$	11,117	$6,712 \cdot 10^3$	2,469
Предсказания континуальной теории		11,225	$7,72 \cdot 10^3$	2,491
Численный эксперимент	$900 \cdot 10^{-21}$	14,92	$6,79 \cdot 10^3$	3,019
Предсказания континуальной теории		15,023	$7,72 \cdot 10^3$	2,882
Численный эксперимент	$1100 \cdot 10^{-21}$	18,693	$6,518 \cdot 10^3$	3,416
Предсказания континуальной теории		18,615	$7,72 \cdot 10^3$	3,208
Численный эксперимент	$1602,19 \cdot 10^{-21}$	27,83	$7,0 \cdot 10^3$	4,173
Предсказания континуальной теории		28,212	$7,72 \cdot 10^3$	3,95

Для изучения состояния молекулярного кристалла в ударном фронте детонационной волны, а также для определения связи между этим состоянием и величиной теплового эффекта Q , использовалась методология, описанная в [1]. На расстоянии $460,12 \text{ \AA}$ от левой грани кристалла помещалась контрольная мезоячейка, в которой проводилось наблюдение за изменениями таких энергетических параметров, как колебательная энергия E_{MOL} и вращательная энергия E_{ROT} с течением времени. Для сравнения на рис. 6 приводятся результаты численных экспериментов для трех значений теплового эффекта. Из поведения энергетических зависимостей следует, что с уменьшением Q ширина ударного фронта увеличивается. Если для $Q = 1602,19 \cdot 10^{-21}$ Дж ширина фронта составляет $\sim 3 \cdot 10^{-13}$ с, то для $Q = 680,5 \cdot 10^{-21}$ Дж — $\sim 8 \cdot 10^{-13}$, а для $Q = 400 \cdot 10^{-21}$ Дж — $\sim 3 \cdot 10^{-12}$ с.

Для этой же ячейки на рис. 7 представлены зависимости химического состава и двух компонент кинетической температуры (T_x , T_y) от времени.

Видно, что в зоне химической реакции отсутствует термодинамическое равновесие. В первую очередь происходит рост поступательной температуры T_x , который опережает по времени рост T_y , а само значение T_x превышает величину T_y . После завершения химических реакций происходит выравнивание значений компонент кинетической температуры за счет перераспре-

деления энергии между всеми поступательными степенями свободы.

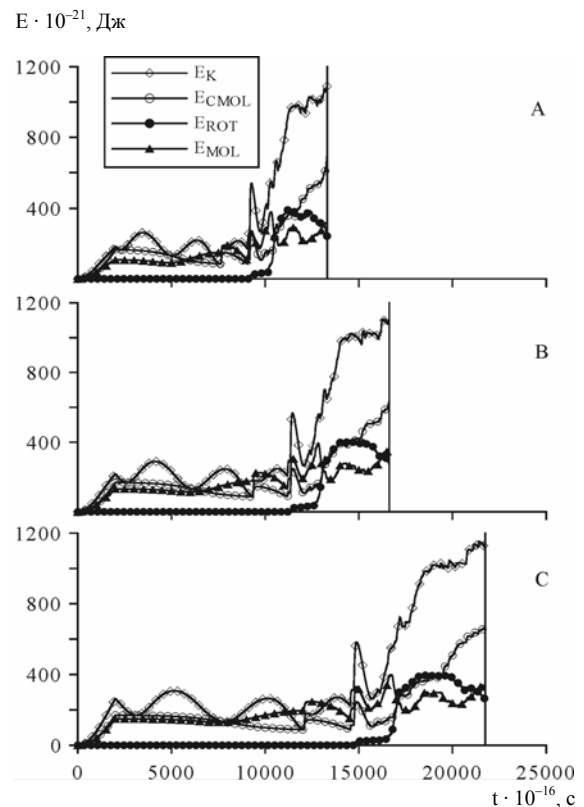


Рис. 4. Зависимость энергетических макропараметров возмущенной области кристалла от времени:

A — масса атома $m_{at} = 60 \cdot 10^{-27}$ кг;

B — $m_{at} = 100 \cdot 10^{-27}$ кг; C — $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг.

Прямая вертикальная линия, на каждом из графиков, обозначает начало химической реакции

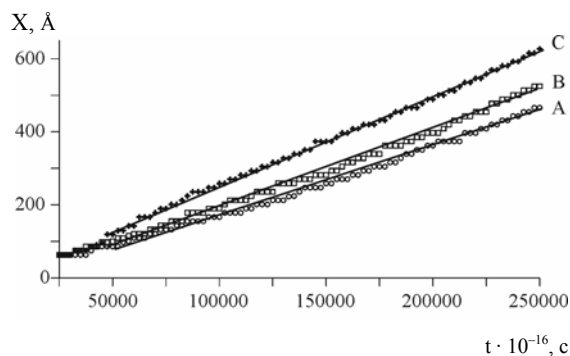


Рис. 5. Зависимость положения фронта детонационной волны от времени: А – тепловой эффект химической реакции $Q = 300 \cdot 10^{-21}$ Дж; В – $Q = 400 \cdot 10^{-21}$ Дж; С – $Q = 680,5 \cdot 10^{-21}$ Дж

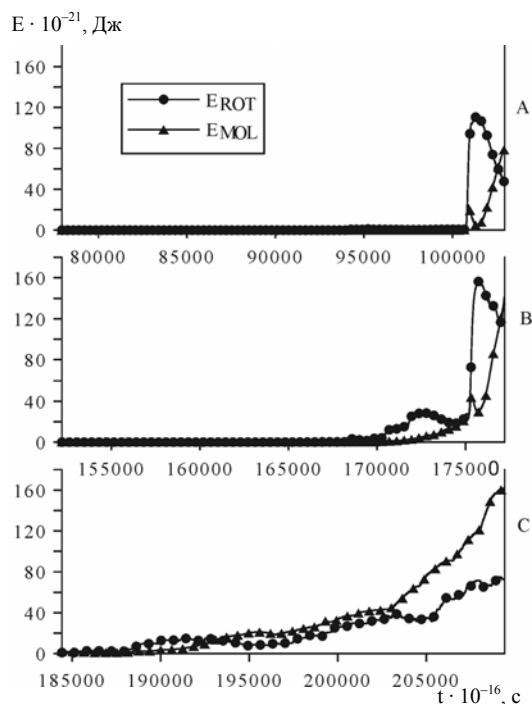


Рис. 6. Зависимость энергетических макропараметров контрольной мезоячейки от времени: А – тепловой эффект химической реакции $Q = 1602,19 \cdot 10^{-21}$ Дж; В – $Q = 680,5 \cdot 10^{-21}$ Дж; С – $Q = 400 \cdot 10^{-21}$ Дж. Прямая вертикальная линия обозначает начало химической реакции (А – $t = 102,939 \cdot 10^{-13}$ с; В – $t = 177,209 \cdot 10^{-13}$ с; С – $t = 209,428 \cdot 10^{-13}$ с). Все зависимости приводятся в одинаковом временном масштабе

Профили давления, трех компонент кинетической температуры, а также распределение числа непрореагировавших молекул по пространству в фиксированный момент времени приводятся на рис. 8. Представленные зависимости также подтверждают факт сильной неравновесности во фронте детонационной волны. Подобные закономерности были получены ранее при исследовании

распространения ударных волн в жидких и конденсированных средах [4].

Из представленных на рис. 7, 8 зависимостей также видно, что максимальные значения характеристик детонационной волны достигаются в области с высоким содержанием прореагировавших молекул.

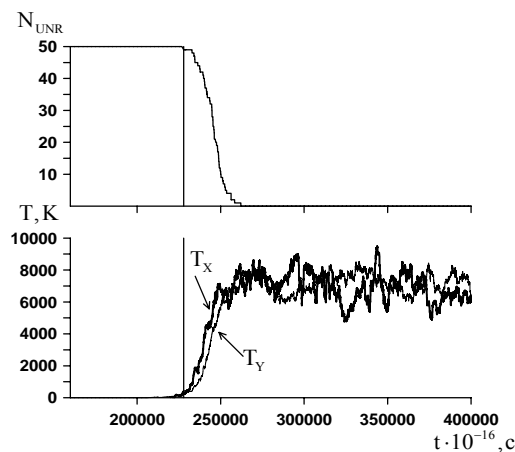


Рис. 7. Изменение химического состава (числа непрореагировавших молекул) и температуры с течением времени в контрольной мезоячейке. Прямая вертикальная линия соответствует началу химической реакции. Тепловой эффект химической реакции $Q = 300 \cdot 10^{-21}$ Дж

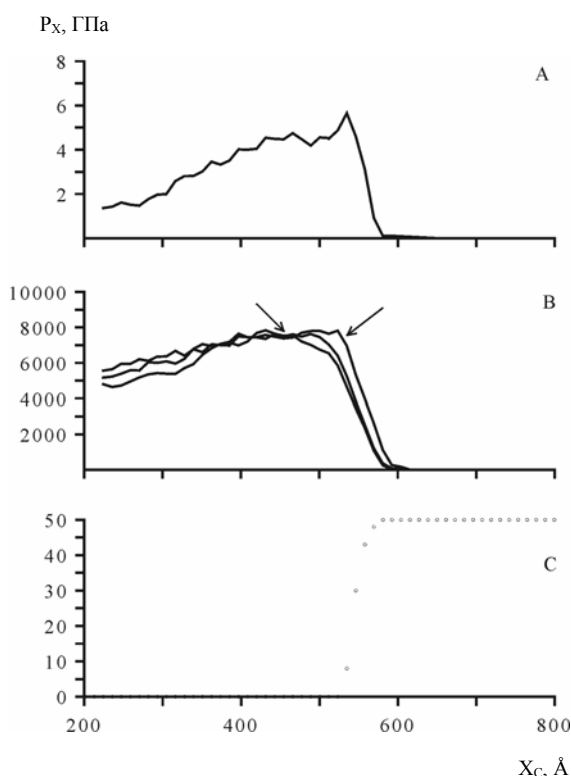


Рис. 8. Распределение давления (А), температуры (В) и числа непрореагировавших молекул (С) в кристалле (x_c – координаты центров масс мезоячеек) для момента времени $t = 300 \cdot 10^{-13}$ с. Тепловой эффект химической реакции $Q = 300 \cdot 10^{-21}$ Дж

Проверка основных соотношений континуальной теории детонации

Как известно, уравнения сохранения массы, импульса и энергии в стационарной одномерной форме записи (соотношений Гюгонно) не являются достаточными для однозначного определения скорости детонационной волны.

В рамках континуальной механики требуется привлечение дополнительного условия отбора скоростей (условие Чепмена–Жуге), суть которого состоит в том, что из набора возможных скоростей детонации только минимальная скорость (условие касания прямой Рэля–Михельсона детонационной адиабаты) соответствует нормальному режиму [4; 5]. В связи с этим значительный интерес представляет получение на основе молекулярно-динамического моделирования условия Чепмена–Жуге как следствия законов динамики движения частиц.

Первоначально для определения параметров Чепмена–Жуге использовались основные положения континуальной теории детонации. Уравнение состояния продуктов реакции в настоящей работе определялось по методике, аналогичной описанной в [6]. Так как в рассматриваемом численном эксперименте продуктом детонации является одноатомный газ, для построения уравнения состояния была предложена следующая физическая система. Система атомов помещалась в кубический резервуар, стенки которого моделировались при помощи отталкивательной ветви потенциала Леннарда–Джонса. В начальный момент времени задание импульсов всех атомов осуществлялось при помощи метода Монте–Карло при определенной температуре, а затем система свободно релаксировала к положению равновесия в течение интервала времени 10^{-11} с. Изменяя размер резервуара и начальную температуру системы в широком диапазоне значений, можно получить термодинамические характеристики продуктов реакции (набор давлений P и удельных внутренних энергий ϵ).

На рис. 9 и 10 приводятся зависимости удельной внутренней энергии ϵ и, соответственно, давления от температуры для различных удельных объемов (на примере кристалла с массой атома $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг и тепловым эффектом химической реакции $Q = 400 \cdot 10^{-21}$ Дж). Представленные наборы точечных зависимостей интерполируются полиномами первой степени.

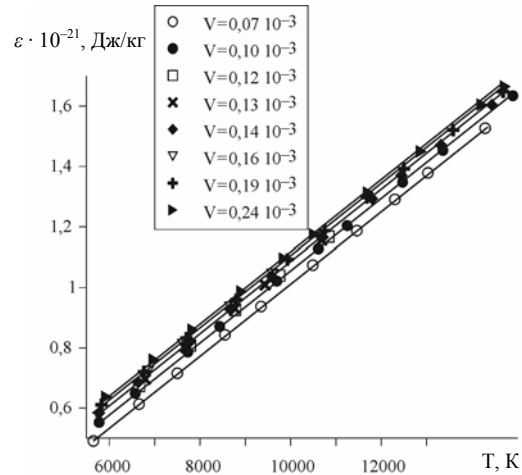


Рис. 9. Зависимость удельной внутренней энергии от температуры для различных значений удельного объема (\tilde{V} , м³/кг)

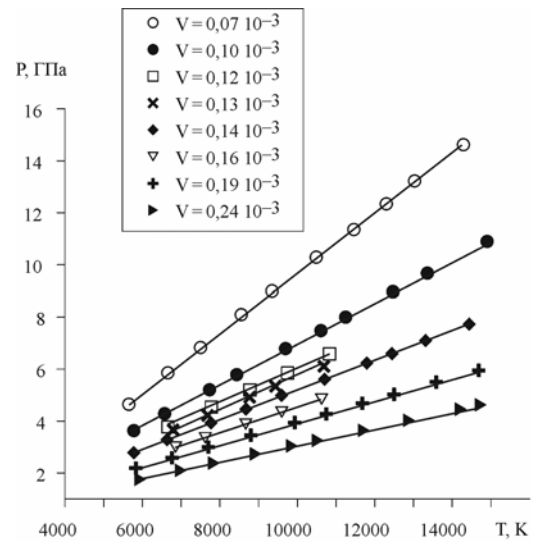


Рис. 10. Зависимость давления от температуры для различных значений удельного объема (\tilde{V} , м³/кг)

Используя выражение для функции Гюгонно $h(T, \tilde{V}) = \epsilon - \epsilon_0 - 1/2(P + P_0)(\tilde{V}_0 - \tilde{V})$, на основе набора давлений и удельных внутренних энергий можем также построить зависимости $h(T, \tilde{V})$ от температуры для различных значений удельного объема (рис. 11). Температуры Гюгонно T_H – это температуры, при которых функция Гюгонно $h(T, \tilde{V})$ обращается в ноль для различных значений удельных объемов. Используя уравнения интерполирующих прямых, определяем температуры T_H , как пересечение соответствующих прямых с горизонтальной линией, которая соответствует $h(T, \tilde{V}) = 0$ (см. рис. 11). Соответствующие каждому T_H значение давления Гюгонно P_H определяется для каждого удельного объема, используя линейные зависимости дав-

ления от температуры (см. рис. 10), что позволяет построить детонационную адиабату (рис. 12). Точечная зависимость полученных давлений P_H от \tilde{V} (кружки на рис. 12) интерполируется полиномом пятой степени (сплошная линия на рис. 12).

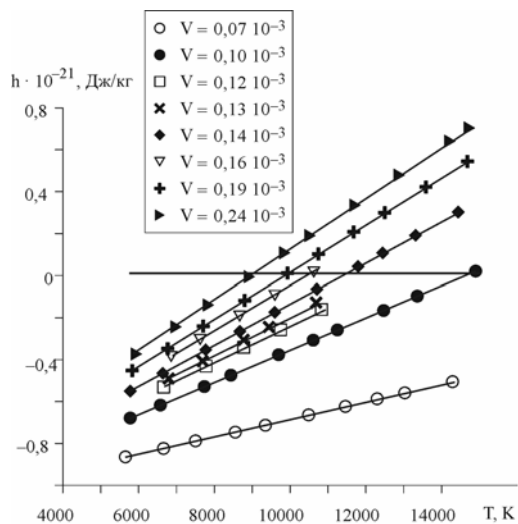


Рис. 11. Зависимость функции Гюгонио от температуры для различных значений удельного объема (\tilde{V} , м³/кг)

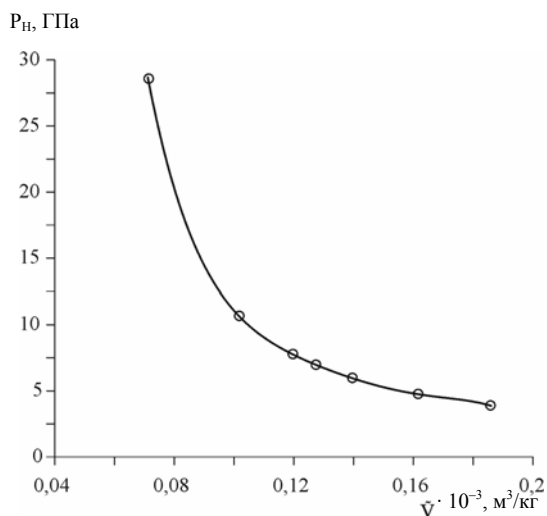


Рис. 12. Зависимость давления Гюгонио от удельного объема

При помощи уравнения прямой Рэля–Михельсона $\rho_0^2 D^2 = (P - P_0) / (\tilde{V}_0 - \tilde{V})$ можно определить скорости детонации как функции от удельных объемов. На рис. 13 кружками обозначены соответствующие скорости детонации, а сплошная линия является интерполирующим полиномом четвертой степени.

Скорость Чепмена–Жуге – это минимальная скорость детонации, соответствующая набору давлений и удельных объе-

мов Гюгонио. Анализ полинома дает следующее значение скорости детонации $D_{ЧЖ} = 1,94$ км/с. Соответствующее данному удельному объему, давление в точке Чепмена–Жуге $P_{ЧЖ} = 6,75$ ГПа определяется при помощи детонационной адиабаты (см. рис. 12).

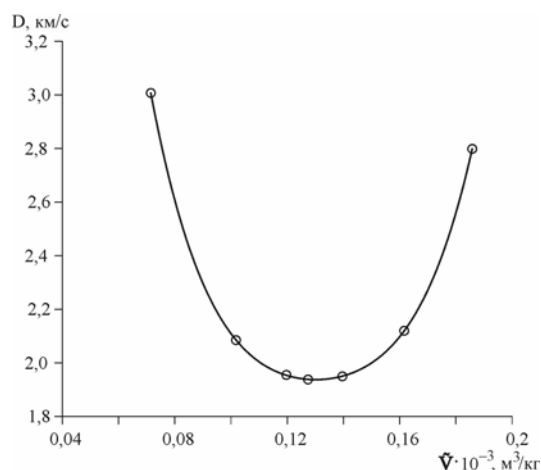


Рис. 13. Зависимость скорости детонации от удельного объема

Результаты применения описанной выше методологии определения термодинамических параметров продуктов детонации и параметров Чепмена–Жуге к кристаллам с различными массами атомов приводятся в табл. 1, а к кристаллам с различными значениями теплового эффекта – в табл. 2.

Полученные выше результаты были определены в рамках континуальной теории детонации. Второй этап сравнения состоял в определении всех этих параметров при помощи прямых численных расчетов, основанных на полной информации о системе на микроуровне. Согласно определению механики сплошных сред, в точке Чепмена–Жуге все химические реакции должны полностью закончиться и должно наступить локальное термодинамическое равновесие [4; 5]. Для определения положения этой точки в кристалле была использована методика, описанная в работе [3]. Через каждые 50 временных шагов проводился мезоанализ во всей расчетной области и по полученному химическому составу определялась первая ячейка за зоной химической реакции, где молекулы полностью прореагировали. В этой мезоячейке определялись такие параметры, как массовая скорость, давление, энтропия и плотность, которые

сравнивались с предсказанными континуальной теорией детонации величинами. В качестве примера на рис. 14 приводятся результаты моделирования для массы атома $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг. Из представленных зависимостей следует, что через определенное время после начала химической реакции термодинамические характеристики выходят на асимптотику, а затем флуктуируют около своих средних значений. Средние значения давления, плотности в точке Чепмена-Жуге, а также скорости детонации для всех рассматриваемых значений атомной массы и теплового эффекта приводятся в табл. 1 и 2 соответственно.

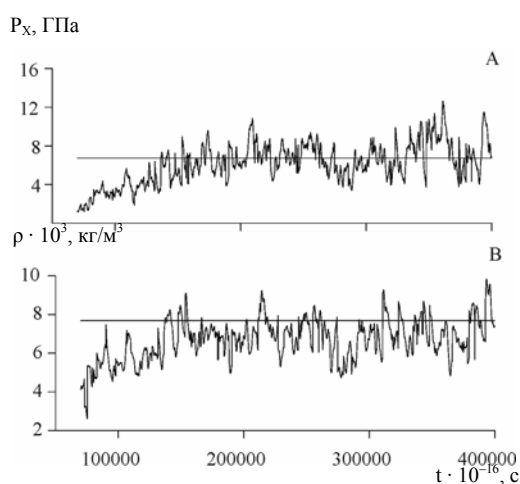


Рис. 14. Зависимость давления (А) и плотности (В) от времени в точке Чепмена-Жуге. Прямая горизонтальная линия соответствует теоретически найденным параметрам Чепмена-Жуге. Атомная масса $m_{at} = 180 \cdot 10^{-27}$ кг

Заключение

Основные выводы представленной работы можно сформулировать следующим образом.

Увеличение массы атомов при постоянной величине теплового эффекта химической реакции приводит к уменьшению чувствительности вещества и увеличению времени первоначального зарождения химической реакции, однако при этом сохраняется качественная картина зарождения химиче-

ской реакции. Увеличение массы молекулярных продуктов также приводит к уменьшению амплитуды энергетических характеристик возмущенной области и скорости детонации.

Уменьшение величины теплового эффекта химической реакции при постоянной массе атомов приводит к уменьшению амплитуды энергетических характеристик возмущенной области и скорости детонации, однако никак не сказывается на чувствительности вещества и на картине первоначального зарождения детонации.

Сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования с предсказаниями континуальной теории детонации дает хорошие результаты, как по скорости детонации, так и по термодинамическим параметрам в точке Чепмена-Жуге.

Список литературы

1. Fomin V. M., Golovnev I. F., Utkin A. V. Relation between the atomistic picture and continuum mechanics description of detonating solid-state explosives // *Shock Waves*. 2003. Vol. 13. No. 2. P. 155–165.
2. Utkin A. V., Golovnev I. F., Fomin V. M. Molecular-dynamics simulation of processes in 3-D solid explosives // *Materials Physics and Mechanics*. 2004. Vol. 7. P. 54–60.
3. Utkin A. V., Golovnev I. F., Fomin V. M. Molecular-dynamic study of detonation in a diatomic molecular crystal // *Computational Materials Science*. 2006. Vol. 36. P. 234–237.
4. Зельдович Я. Б., Компанеев А. С. Теория детонации. М.: Наука, 1955. 268 с.
5. Станюкович К. П. Физика взрыва. М.: Наука, 1975. 703 с.
6. Rice B. M., Mattson W., Grosh J. et al. Molecular-dynamics study of detonation. I. A comparison with hydrodynamic predictions // *Phys. Rev. E*. 1996. Vol. 53. P. 611–622.

Материал поступил в редколлегию 16.04.2007