

О ЗАЖИГАНИИ КРИСТАЛЛОВ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

А. Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск
anna@ispms.tsc.ru

С целью изучения характера взаимовлияния реакции в твердой фазе и механических процессов при зажигании кристаллов взрывчатых веществ в работе предложена физико-математическая модель процесса зажигания, основанная на модели анизотропной среды с повреждениями. В случае гексагонального кристалла модель сводится к связанной одномерной модели зажигания с более широкой областью изменения параметров, чем это было в модели зажигания изотропного вещества. Например, коэффициент связности полей деформации и температуры теперь может принимать отрицательные значения. Приведены примеры численного решения задачи о зажигании в различных частных случаях.

ВВЕДЕНИЕ

Характер влияния механических процессов на параметры зажигания и горения твердых топлив имеет значение в связи с проблемой перехода конвективного горения трещиноватых и пористых систем во взрыв [1, 2]; при изучении горения смесевых топлив под действием статических нагрузок [3, 4] и при исследовании влияния технологических микроразрушений на характеристики горения [3, 5, 6]; при выяснении механизма и роли диспергирования в процессе горения [7–9] и т. п. К сожалению, связанные процессы рассматривались лишь в работах Куо [6]; изменение характеристик реакционной зоны в [8] при диспергировании явно не связывается с механическими процессами, а при изучении воздействия механической нагрузки на реакцию в [4] не учитываются все внутренние связи, характерные для твердофазных процессов. Тем не менее именно деформирование системы приводят к затруднению образования активированного комплекса в твердой фазе по сравнению с газом и жидкостью [10]; образование продукта реакции, а не только тепловыделение в ходе процесса или внешний нагрев приводят к появлению внутренних напряжений и деформаций, способствующих размножению и продвижению дислокаций, играющих особую роль в кинетике твердофазных реакций [10–13], в частности реакций разложения взрывчатых веществ и составляющих смесевых топлив.

Одиночные кристаллы взрывчатых веществ удобны как объект исследования по разным причинам. Так, существует ряд экспе-

риментальных данных, согласно которым горение одиночных кристаллов взрывчатых веществ протекает в две стадии [13–15]: разложение в твердой фазе и механический разлет продуктов реакции. Такому разделению на стадии способствует, в частности, разрушение кристаллов в реакционной зоне, что позволяет газообразному продукту реакции удерживаться в твердой фазе в растворенном или адсорбированном состоянии. Разрушение кристаллов возможно еще на стадии зажигания вследствие теплового удара (быстрого нагревания поверхности). Например (см. [1, 14–16]), разрушение кристаллов тэна и гексогена наблюдается уже при небольшом перепаде температуры — $\Delta T \approx 15 \div 20$ К, пикриновой кислоты и тротила — при $\Delta T \approx 40 \div 50$ К. Физические механизмы зарождения трещин в зоне реакции и характер их влияния на проникновение реакции вглубь вещества и распространение фронта в твердой фазе не очевидны, хотя известно, что существование напряженно-деформированного состояния в реакционной зоне обязательно приводит к химическим изменениям [16, 17], а механическое разрушение в зоне градиентов температуры и концентраций непосредственно связано с деформацией и разрывом химических связей [10, 12, 17]. Экспериментальные данные в этой области весьма скудны и не дают всей необходимой информации для однозначного суждения о механизме процессов.

Четкое разделение на стадии позволяет анализировать их отдельно, в том числе стадию возбуждения реакции в прогретом слое, когда роль газовой фазы несущественна.

Цель настоящей работы — построение модели зажигания кристалла взрывчатого вещества с учетом анизотропии его свойств и связности тепловых, химических и механических процессов. В поликристаллических взрывчатых веществах влияние механических напряжений может быть сглажено за счет взаимодействия кристаллов друг с другом, дополнительных эффектов, связанных с наличием границ раздела, а также в связи с плавлением веществ или иных фазовых переходов, наблюдающихся в окрестности температуры возбуждения реакции [14, 15]. Тем не менее результаты исследования могут быть весьма полезны при выяснении механизма быстрого разложения в твердой фазе (твердофазной детонации), для которого характерно аналогичное разделение на химическую и механическую стадии (см., например, [18–22]).

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ

Модель анизотропной среды с реагирующими компонентами и повреждениями можно построить простым обобщением модели, использованной в [23].

Свободная энергия f локального объема анизотропной среды с точностью до слагаемых второго порядка малости по деформациям может быть представлена в виде

$$f(\varepsilon_{ij}, T, N_q, v_p) = C_{ijkl} \left[\frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - \frac{w_{kl}}{3} \varepsilon_{ij} \right] + f_0(T, N_q, v_p), \quad (1)$$

где ε_{ij} — компоненты тензора деформаций, определенные в смысле Коши,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right];$$

u_i — компоненты вектора перемещений; T — температура; N_q — концентрации компонентов реакционной смеси; v_p — удельный объем повреждений (трещин, пор, полостей), $\text{м}^3/\text{г}$; w_{kl} — компоненты тензора, имеющего следующую структуру:

$$w_{kl} = 3 \left[\alpha_{kl}^{(T)} (T - T_0) + \sum_{(q)} \alpha_{kl}^{(q)} (N_q - N_{q0}) + \alpha_{kl}^{(s)} (v_p - v_{p0}) \right]; \quad (2)$$

$\alpha_{kl}^{(T)}$ — компоненты тензора коэффициентов теплового расширения, $\alpha_{kl}^{(q)}$ ($q = 1, 2, 3$) — «концентрационный» расширения, $\alpha_{kl}^{(s)}$ — «структурного» расширения; индекс 0 относится к недеформированному состоянию; C_{ijkl} — компоненты тензора изотермических модулей упругости, т. е., в отличие от модели термоупругой среды [24], кроме тензора тепловых напряжений $\beta_{ij}^{(T)} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^{(T)}$ здесь введены тензоры концентрационных ($\beta_{ij}^{(q)}$) и структурных ($\beta_{ij}^{(s)}$) напряжений: $\beta_{ij}^{(q)} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^{(q)}$, $\beta_{ij}^{(s)} = C_{ijkl} \alpha_{kl}^{(s)}$.

Физический смысл таких тензоров легко понять, если вспомнить, что причиной внутренних напряжений в кристалле могут быть примеси любой природы (в том числе, продукта реакции) и повреждения в его структуре; вследствие наличия у кристалла собственной структуры примеси и повреждения вызывают различные напряжения (и деформации) в разных направлениях. Компоненты тензоров $\alpha_{kl}^{(q)}$ и $\alpha_{kl}^{(s)}$ считаем связанными с характером химических связей в кристаллической решетке.

Если в качестве основных термодинамических параметров выбраны температура и деформации, то уравнение Гиббса записывается в форме

$$df = -s dT + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + \sum_{(q)} g_q dN_q + \rho_0 \chi dv_p, \quad (3)$$

где s — энтропия локального объема; σ_{ij} — компоненты тензора напряжений; g_q — химические потенциалы компонентов реакционной смеси с концентрациями N_q ; χ — структурный потенциал, Дж/м³; ρ_0 — плотность недеформированной среды. Следовательно, с учетом (3) и (1) имеем

$$\sigma_{ij} = \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_{T, N_q, v_p} = C_{ijkl} \left[\varepsilon_{kl} - \frac{w_{kl}}{3} \right], \quad (4)$$

$$s = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{ij}, N_q, v_p} = \frac{\varepsilon_{ij}}{3} \frac{\partial}{\partial T} (C_{ijkl} w_{kl}) - \frac{\partial f_0}{\partial T}. \quad (5)$$

Соотношения между напряжениями и деформациями (4) можно представить в форме

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} + w_{ij}/3 \quad (6)$$

где S_{ijkl} — компоненты тензора коэффициентов податливости изотермического состояния. В частном случае, когда коэффициенты не зависят от температуры, определение энтропии (5) аналогично модели термоупругой среды:

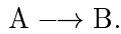
$$s = \beta_{ij}^{(T)} \varepsilon_{ij} - \frac{\partial f_0}{\partial T} \equiv \beta_{ij}^{(T)} \varepsilon_{ij} + s_0. \quad (7)$$

Изменение энтропии всего рассматриваемого объема находится из соотношения

$$S - S_0 = \int_{(V)} \beta_{ij}^{(T)} \varepsilon_{ij} dV. \quad (8)$$

Аналогично (4), (5) определяются химические потенциалы компонентов и структурный потенциал.

Пусть в рассматриваемой среде протекает реакция, которую можно формально описать простейшей схемой



Тогда N_A, N_B — концентрации реагента и продукта; $\alpha_{kl}^{(A)}, \alpha_{kl}^{(B)}$ — соответствующие коэффициенты концентрационного расширения. Следовательно,

$$g_A = \left(\frac{\partial f}{\partial N_A} \right)_{N_B, T, \varepsilon_{ij}, v_p} = \frac{\partial f_0}{\partial N_A} - \frac{\varepsilon_{ij}}{3} \frac{\partial (C_{ijkl} w_{kl})}{\partial N_A},$$

$$g_B = \left(\frac{\partial f}{\partial N_B} \right)_{N_A, T, \varepsilon_{ij}, v_p} = \frac{\partial f_0}{\partial N_B} - \frac{\varepsilon_{ij}}{3} \frac{\partial (C_{ijkl} w_{kl})}{\partial N_B}.$$

В случае явной независимости модулей и компонентов тензоров расширения от концентраций

$$g_A = \frac{\partial f_0}{\partial N_A} - \varepsilon_{ij} \beta_{ij}^{(A)} = g_{A0} - \varepsilon_{ij} \beta_{ij}^{(A)}, \quad (9)$$

$$g_B = \frac{\partial f_0}{\partial N_B} - \varepsilon_{ij} \beta_{ij}^{(B)} = g_{B0} - \varepsilon_{ij} \beta_{ij}^{(B)},$$

где g_{A0}, g_{B0} — химические потенциалы компонентов смеси без учета влияния на них деформаций,

$$g_{A0} = g_A^{st} + RT \ln(N_A \gamma_A), \quad (10)$$

$$g_{B0} = g_B^{st} + RT \ln(N_B \gamma_B);$$

g_A^{st}, g_B^{st} — стандартные химические потенциалы в расчете на один моль; γ_A, γ_B — термодинамические множители, отражающие характер образующегося раствора или химического соединения; R — универсальная газовая постоянная.

Структурный потенциал определим следующим образом:

$$\chi = \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial f}{\partial v_p} \right)_{T, \varepsilon_{ij}, N_A, N_B} = \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial f_0}{\partial v_p} \right) - \varepsilon_{ij} \beta_{ij}^{(s)}. \quad (11)$$

Так как $e = f + Ts$, где e — удельная внутренняя энергия, то вдоль траектории движения центра масс (с учетом (3)) справедливо соотношение

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\rho}{T} \frac{de}{dt} - \frac{\sigma_{ij}}{T} \frac{d\varepsilon_{ij}}{dt} - \frac{1}{T} \sum_{(q)} g_q \frac{dN_q}{dt} - \frac{\rho_0}{T} \chi \frac{dv_p}{dt}, \quad (12)$$

которое с помощью балансных соотношений для всех величин может быть представлено в виде [25]

$$\frac{ds}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{J}_s + \sigma_s,$$

где \mathbf{J}_s — плотность потока энтропии (его кондуктивная или диффузионная часть), σ_s — локальная скорость возникновения энтропии (ее производство в единице объема).

В простейшей модели, не учитывающей диффузионный перенос компонентов и повреждений, и в случае единственной реакции с реагентом А и продуктом В имеем

$$\mathbf{J}_s = \mathbf{J}_T / T, \quad (13)$$

$$\sigma_s = \frac{1}{T^2} (\mathbf{J}_T, -\nabla T) - \frac{\rho_0 \chi}{T} \sigma_f + \frac{g_A - g_B}{T} \sigma_r,$$

где \mathbf{J}_T — поток тепла (вследствие теплопроводности), σ_f — локальная скорость накопления повреждений, σ_r — локальная скорость химической реакции $A \rightarrow B$ (круглыми скобками в (13) обозначено скалярное произведение векторов). Очевидно, что $\sigma_s \geq 0$. Это означает, что производство энтропии, обусловленное физическими процессами различной тензорной размерности, также неотрицательно [25, 26], т. е.

$$\sigma_{s1} = \frac{1}{T^2} (\mathbf{J}_T, -\nabla T) \geq 0,$$

$$\sigma_{s2} = -\frac{\rho_0 \chi}{T} \sigma_f + \frac{g_A - g_B}{T} \sigma_r \geq 0.$$

Одновременной неотрицательности производств энтропии, связанных с реакцией и образованием повреждений, здесь не требуется.

Естественно, что производство энтропии для всего объема есть

$$\Sigma_s = \int_{(V)} \sigma_s dV. \quad (14)$$

Введем обозначения:

$$y = \frac{N_B}{N_*}, \quad N_* = N_{A0} + N_{B0}, \quad \eta = \frac{v_p}{v},$$

где v — удельный объем среды, и учтем, что в закрытой системе

$$N_A + N_B = N_{A0} + N_{B0} = N_* = \text{const.}$$

Величину y в дальнейшем называем степенью превращения или выгоранием, а η — поврежденностью среды.

Для наших целей потребуются:

— уравнение энергии в форме уравнения теплопроводности, которое также следует из (12) и с учетом введенных обозначений имеет вид

$$\rho c_\varepsilon \frac{\partial T}{\partial t} = -\text{div}(\mathbf{J}_T) - T \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\varepsilon_{ij}}{3} \frac{\partial}{\partial T} (C_{ijkl} w_{kl}) \right] + Q_r \frac{\partial y}{\partial t} - Q_f \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (15)$$

где c_ε — теплоемкость при постоянной деформации, $Q_r = (g_A - g_B)N_*$ — тепловыделение (телопоглощение) в реакции, $Q_f \equiv \chi$ — тепло, которое тратится на разрыв связей в процессе разрушения;

— уравнение движения (уравнение сохранения импульса) без учета массовых сил

$$\sigma_{ij,j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}; \quad (16)$$

— уравнение кинетики для химической реакции и накопления повреждений

$$\frac{\partial y}{\partial t} = \sigma_r = \varphi_1(y, \eta) \psi_1(T), \quad (17)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \sigma_f. \quad (18)$$

Для каждого конкретного типа кристаллической решетки новые тензоры, введенные в модели, имеют свою структуру, аналогично $\beta_{ij}^{(T)}$. В общем случае компоненты этих

тензоров требуют специального определения, как и тензоры коэффициентов теплопроводности $\lambda_{ij}^{(T)}$ и теплового расширения $\alpha_{ij}^{(T)}$ в обычной модели анизотропного упругого тела.

В случае малых деформаций явного учета уравнения неразрывности не требуется. Действительно, для малых значений ε_{ij} имеем

$$\frac{d\rho}{dt} \approx \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \text{div } \mathbf{v},$$

где \mathbf{v} — вектор скорости точек среды с компонентами $v_i = \partial u_i / \partial t$, что позволяет записать

$$\ln(\rho/\rho_0) \approx -\text{div } \mathbf{u} \approx -\varepsilon_{kk},$$

т. е. изменение плотности полностью определяется объемной деформацией, а следовательно, тепловым, концентрационным и структурным расширениями.

Вообще говоря, под величиной η можно понимать любой внутренний параметр, необходимый для описания кинетики реакции, изменения структуры вещества и т. п. Построение кинетического уравнения для η может быть основано на общей идее для внутренних переменных и параметров, изложенной в [26].

В общем случае может быть несколько внутренних параметров, определяющих кинетику реакции на микроуровне.

ГЕКСАГОНАЛЬНЫЙ КРИСТАЛЛ

В случае трансверсально-изотропной среды или гексагональной системы, свойственной, например, кристаллам гексогена, как известно [27, 28], независимы всего пять модулей и по две константы для каждого из тензоров

$$\lambda_{ij}^{(T)}, \alpha_{kl}^{(T)}, \alpha_{kl}^{(B)}, \alpha_{kl}^{(A)}, \alpha_{kl}^{(s)},$$

которые имеют вид

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 \end{bmatrix}.$$

В этом случае соотношения между компонентами тензоров напряжений и деформаций представимы следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{1}{E_1}(\sigma_{11} - \nu_1 \sigma_{22}) - \frac{\nu_2}{E_2} \sigma_{33} + \frac{w_1}{3}, \\ \varepsilon_{22} &= \frac{1}{E_1}(\sigma_{22} - \nu_1 \sigma_{11}) - \frac{\nu_2}{E_2} \sigma_{33} + \frac{w_1}{3}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\varepsilon_{33} = -\frac{\nu_2}{E_2}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) + \frac{1}{E_2}\sigma_{33} + \frac{w_{21}}{3},$$

$$\varepsilon_{23} = \frac{\sigma_{23}}{\mu_2}, \quad \varepsilon_{13} = \frac{\sigma_{13}}{\mu_2}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{\sigma_{12}}{\mu_1},$$

где

$$E_1 = 2\mu_1(1 + \nu_1),$$

$$w_1 = 3[\alpha_1^{(T)}(T - T_0) + (\alpha^{(B)} - \alpha^{(A)})_1 N_* y + \alpha_1^{(s)} \rho^{-1}(\eta - \eta_0)], \quad (20)$$

$$w_2 = 3[\alpha_2^{(T)}(T - T_0) + (\alpha^{(B)} - \alpha^{(A)})_2 N_* y + \alpha_2^{(s)} \rho^{-1}(\eta - \eta_0)],$$

что, естественно, аналогично модели анизотропного термоупругого тела. Здесь E_1, E_2 — модули Юнга; μ_1, μ_2 — модули сдвига; ν_1, ν_2 — коэффициенты Пуассона.

Плоскость (xy) — плоскость симметрии, где гексагональный кристалл изотропен по свойствам среды, так что если фронт химической реакции направлен вдоль оси Oz или в этом направлении с поверхности действует внешний источник, то задачу снова можно считать одномерной и принять следующие условия:

$$z = 0: \quad -\lambda_2^{(T)} \frac{\partial T}{\partial z} = q_e, \quad \sigma_{33} = 0, \quad (21)$$

$$z \rightarrow \infty: \quad T = T_0, \quad u_3 = 0$$

$$(\text{все возмущения затухают}); \quad (22)$$

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} \neq 0, \quad \sigma_{13} = \sigma_{12} = \sigma_{23} = 0,$$

$$\varepsilon_{33} \neq 0, \quad \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0.$$

Если к тому же учесть, что скорость распространения обычной (медленной) реакции в твердой фазе много меньше скорости распространения механических возмущений, то аналогично модели зажигания изотропного материала [29, 30] уравнение теплопроводности (15) можно записать в виде

$$c'_\varepsilon \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_2^{(T)} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q'_r \frac{\partial y}{\partial t} - Q'_f \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (23)$$

где $c'_\varepsilon = c_\varepsilon[1 + (T/(\Delta T)_*)\omega]$ — эффективная теплоемкость, $Q'_r = Q_r[1 - (T/(\Delta T)_*)\omega g_1]$ — суммарное тепловыделение в результате реакции с учетом концентрационного расширения, $Q'_f = Q_f[1 + (T/(\Delta T)_*)\omega g_2]$ — суммарный тепловой эффект, связанный с разрушением в зоне реакции в результате разрыва межмолекулярных связей и структурного расширения (образования трещин, пор, полостей).

Здесь опущены промежуточные выкладки, связанные с вычислением первых интегралов и приведением уравнения типа (15) к виду (23), так как они подробно изложены в [29–31]. Параметры ω, g_1, g_2 имеют тот же физический смысл (коэффициенты связности и коэффициенты концентрационного и структурного расширений), что и в простейших моделях, но включают характеристики анизотропной среды, что приводит к более широкой области изменения этих безразмерных комплексов по сравнению с изотропной средой:

$$\omega = \omega_0 \frac{1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(T)}}{1 - 2h_3},$$

$$g_1 = g_{10} \frac{1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(BA)}}{1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(T)}}, \quad g_2 = g_{20} \frac{1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(s)}}{1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(T)}},$$

где

$$\omega_0 = \frac{(\alpha_2^{(T)})^2 E_2 (\Delta T)_*}{1 - h_3},$$

$$g_{10} = \frac{\alpha_2^{(BA)} c_\varepsilon \rho N_*}{|Q_r| \alpha_2^{(T)}}, \quad g_{20} = \frac{\alpha_2^{(s)} c_\varepsilon \rho v}{|Q_f| \alpha_2^{(T)}},$$

$$\alpha_{12}^{(T)} = \frac{\alpha_1^{(T)}}{\alpha_2^{(T)}}, \quad \alpha_{12}^{(s)} = \frac{\alpha_1^{(s)}}{\alpha_2^{(s)}},$$

$$\alpha_{12}^{(BA)} = \frac{\alpha_1^{(B)} - \alpha_1^{(A)}}{\alpha_2^{(B)} - \alpha_2^{(A)}},$$

$$h_1 = \frac{E_1}{E_2} \frac{\nu_2}{1 - \nu_1}, \quad h_3 = \frac{E_1}{E_2} \frac{\nu_2^2}{1 - \nu_1} = \nu_2 h_1.$$

Так, если кристалл характеризуется модулем упругости E_1 , на порядок превышающим E_2 (при относительно близких значениях $\alpha_2^{(T)}, \alpha_1^{(T)}$), то эффективный коэффициент связности

может быть весьма велик. То же самое можно сказать и об иных параметрах модели. Дополнительно отметим, что коэффициент связности может быть и отрицательным, если $h_3 > 1/2$.

Отличные от нуля компоненты тензоров напряжений и деформаций связаны с температурой, степенью превращения и поврежденностью среды соотношениями

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = -\frac{E_1}{1-\nu_1} \frac{w_1}{3}, \quad \varepsilon_{33} = \frac{w_2}{3} + \frac{2}{3} h_1 w_1. \quad (24)$$

КИНЕТИКА РЕАКЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ

Кинетические функции $\varphi_1(y, \eta)$, $\varphi_2(y, \eta)$, входящие в уравнения кинетики (19), (20), отражают на макроуровне различные микропроцессы, которые сопровождают реакцию и разрушение и влияют на ход реакции. Так, кинетическая функция $\varphi_1(y, \eta)$ может зависеть от степени превращения известным образом: $\varphi_1 \sim (1-y)^{n_1} y^{m_1}$, $\varphi_1 \sim \exp(-s_1 y)$ и т. д., где показатели n_1 , m_1 , могут быть дробными величинами, а постоянная s_1 отражает степень замедления реакции с накоплением слоя продукта. Так как в разрушающемся веществе реакция ускоряется на свежесформированных поверхностях, а площадь этих поверхностей пропорциональна удельному объему повреждений, можно предположить, что $\varphi_1 \sim \eta^{p_1}$. Примем, что от температуры скорость реакции зависит согласно закону Аррениуса: $\psi_1 = \exp(-E_a/RT)$, где E_a — энергия активации химической реакции.

Уравнение (18) отражает кинетический характер процесса разрушения на микроуровне и возможность зарождения микротрещин как за счет тепловых флуктуаций (через изменение температуры), так и в результате воздействия механических сил, так что

$$\sigma_f \sim \exp\left(-\frac{U_a - \Delta U}{RT}\right),$$

где U_a — энергия активации разрыва связей в процессе разрушения, а ΔU — ее изменение в результате совершения работы, $\Delta U = r_f p \varepsilon_{kk}$, $p = -\sigma_{kk}/3 \equiv -(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$. Величину ΔU можно трактовать как работу сил давления при зарождении единичной трещины с эффективным объемом $r_f \varepsilon_{kk}$, а r_f — структурно-чувствительный коэффициент, зависящий от природы вещества и типа связей, которые участвуют в процессе разрушения. Уравнение (18) может отличаться от известного кинетического закона [32] не только явным введением работы механических сил

(в известной формуле вместо $r_f \varepsilon_{kk}$ фигурирует структурно-чувствительный коэффициент, равный по смыслу активационному объему, необходимому для разрыва связей в процессе разрушения; с активационным объемом может быть отождествлено и произведение $r_f \varepsilon_{kk}$), но и наличием кинетической функции φ_2 . Последняя должна учитывать изменение поврежденности в конечных пределах и ускорение процесса разрушения с накоплением повреждений. Следовательно, аналогично кинетическому закону для химических реакций «автокаталитического» типа можно записать

$$\varphi_2 \sim (1-\eta)^{n_2} \eta^{m_2},$$

где, как и для химической реакции, n_2 и m_2 определяются процессами, протекающими на микроуровне.

Энергия активации процесса разрушения U_a согласно различным данным может быть сравнима с энергией E_a , а может и существенно отличаться от нее [33]. Это зависит от типа связей, задействованных в разных процессах.

Таким образом, предложенную модель зажигания с разрушением во фронте реакции можно рассматривать как обычную модель теории зажигания с параллельными реакциями, одна из которых может быть активирована за счет воздействия механических сил на химические и молекулярные связи. Заметим еще раз, что об аналогии процессов разрушения и химического превращения говорится в работах [10, 12, 16, 17].

Влияние концентрационного и структурного расширений на характеристики зажигания можно трактовать как изменение энергии активации химической реакции под действием механических процессов. Характер такого влияния проанализирован в [29, 31, 34]. Механические процессы могут приводить как к увеличению, так и к уменьшению E_a . Действительно, из (10) с учетом (2), (3) следует приближенное соотношение (с той же точностью, с какой получается в модели среды и само уравнение теплопроводности [23])

$$Q'_r \frac{\partial y}{\partial t} - Q'_f \frac{\partial \eta}{\partial t} \approx \exp\left(-\frac{E_a + \Delta E_a}{RT}\right),$$

если $|\omega g_1| \ll 1$ и $|Q_f k_f / Q_r k_r| \ll 1$.

Изменение энергии активации может быть оценено по формуле

$$\Delta E_a \approx RT \left[\frac{T}{(\Delta T)_*} \omega g_1 + \frac{Q_f k_f}{Q_r k_r} \left(1 + \frac{T}{(\Delta T)_*} \omega g_2 e^{\Delta U/RT} \right) \right]$$

и может менять знак в зависимости от параметров модели.

Если $\chi \rightarrow 0$ или $\omega_1 g_2 \approx 1$, приходим к известному из [30] решению, позволяющему оценить на основе анализа обратной задачи формально-кинетические параметры химической реакции с учетом связности тепловых и механических процессов. Если же $\omega_1 g_1 \approx 1$, то аналогичное решение дает характеристики возбуждения иной реакции, которую в предложенной модели мы «отождествляем» с разрушением.

Далее исследуем частный случай — зажигание кристалла без учета разрушения, полагая, что его влияние учтено в формально-кинетических параметрах реакции. Будем считать, что скорость химической реакции зависит от температуры по закону Аррениуса, а ее механизм соответствует простейшей кинетической функции:

$$\sigma_r = k_r (1 - y)^n \exp(-E_a/RT). \quad (25)$$

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ В БЕЗРАЗМЕРНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

В переменных, характерных для задач зажигания,

$$y, \quad \eta, \quad \theta = \frac{T - T_*}{RT_*^2} E_a, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad (26)$$

$$\xi = \frac{z}{\sqrt{\kappa t_*}}, \quad s_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_*}, \quad e_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_*},$$

где

$$\kappa = \frac{\lambda_2}{c_\varepsilon \rho}, \quad t_* = \frac{c_\varepsilon \rho RT_*^2}{E_a |Q_r| k_r} \exp \frac{E_a}{RT_*},$$

$$\sigma_* = \frac{E_2}{1 - \nu_2} \frac{\alpha_2^{(T)} RT_*^2}{E_a}, \quad \varepsilon_* = \alpha_2^{(T)} \frac{RT_*^2}{E_a},$$

(т. е. $(\Delta T)_* = RT_*^2/E_a$), система уравнений (17), (23) (без учета разрушения) с граничными и начальными условиями (21), (22) имеет вид

$$\begin{aligned} [1 + \omega_1(1 + \beta\theta)] \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1 - \omega_1 g_1 (1 + \beta\theta)}{\gamma_1} \frac{\partial y}{\partial \tau}, \\ \frac{\partial y}{\partial \tau} &= \gamma_1 \varphi_1(y, \eta) \exp \frac{\theta}{1 + \beta\theta}, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\xi = 0: -\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = Q_e, \quad \xi \rightarrow \infty: \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0,$$

$$\tau = 0: \theta = -\theta_0, \quad y = 0,$$

где

$$\begin{aligned} e_{kk} &= e_{11} + e_{22} + e_{33} = \\ &= (1 + 2h_1 \alpha_{12}^{(T)}) [(\theta + \theta_0) + g_1 \gamma_1^{-1} y], \end{aligned} \quad (28)$$

$$s = -\frac{s_{kk}}{3} = s_{11} + s_{22} + s_{33} =$$

$$= \frac{2h_2}{3} \left[\alpha_{12}^{(T)} (\theta + \theta_0) + \frac{g_{10} \alpha_{12}^{(BA)}}{\gamma_1} y \right].$$

В модели, кроме описанных выше, присутствует еще несколько безразмерных параметров:

$$\theta_0 = \frac{T_* - T_0}{RT_*^2} E_a, \quad \gamma_1 = \frac{c_\varepsilon \rho RT_*^2}{E_a |Q_r|}, \quad \beta = \frac{RT_*}{E_a},$$

$$Q_e = \frac{q_e E_a}{RT_*^2} \sqrt{\frac{t_*}{c_\varepsilon \rho_0 \lambda_2}}, \quad \omega_1 = \frac{\omega}{\beta}, \quad h_2 = \frac{1 - \nu_2}{1 - \nu_1} \frac{E_1}{E_2}.$$

Для анализа представляют интерес независимые параметры θ_0 , γ_1 , β , Q_e , g_{10} , ω_0 , $\alpha_{12}^{(T)}$, $\alpha_{12}^{(BA)}$.

В модели зажигания изотропного тела [29]

$$\alpha_{12}^{(T)} = \alpha_{12}^{(BA)} = 1, \quad \nu_1 = \nu_2, \quad E_1 = E_2,$$

$$\sigma_* = 3K_2 \alpha_2^{(T)} (T_* - T_0) \equiv \frac{E_2}{1 - 2\nu_2} \alpha_2^{(T)} (T_* - T_0),$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_* &= \frac{3K_2}{\lambda_2 + 2\mu_2} \alpha_2^{(T)} (T_* - T_0) \equiv \\ &\equiv \frac{1 + \nu_2}{1 - \nu_2} \alpha_2^{(T)} (T_* - T_0). \end{aligned}$$

В классических тепловых моделях [35] для режимов зажигания характерно $\theta_0 \gg 1$, $\gamma_1 \ll 1$, $\beta \ll 1$, причем параметры γ_1 и β слабо влияют на характеристики процесса. Здесь появляются дополнительные условия, необходимые для реализации подобных режимов.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Масштабную температуру T_* выберем, используя аналитическое решение задачи о зажигании тепловым потоком без учета механических процессов, найденное с помощью адиабатического критерия зажигания [35]. Это решение дает связь между параметрами Q_e и θ_0 (что позволяет исключить из рассмотрения один из них):

$$Q_e^2/\pi = \theta_0/2,$$

а T_* , рассчитанная с помощью этой формулы, есть температура подключения химической реакции (для задачи без механических процессов).

В качестве модельного вещества выбран гексоген. Его физические характеристики и формально-кинетические параметры брутто-реакции в к-фазе (для поликристалла) известны [1, 36]: $E_a = 1,99 \cdot 10^5$ Дж/моль, $Q_r = 9,15 \cdot 10^7$ Дж/м³, $m_A = 0,222$ кг/моль, $c_e = 0,98 \cdot 10^3$ Дж/(кг·К), $\lambda_T = 0,16$ Вт/(м·К), $\rho_0 = 1,65 \cdot 10^3$ кг/м³, $\alpha_T = 1,7 \cdot 10^{-4}$ 1/К, $E = 1,99 \cdot 10^9$ Н/м², $\nu = 0,46$. Воспользуемся этими данными для качественного анализа модели. Полагая $T_0 = 300$ К и $q_e = 2 \cdot 10^5$ Вт/м², найдем $T_* = 527$ К, $t_* = 0,077$ с, $x_* = 8,8 \cdot 10^{-3}$ см, $\sigma_* = 0,201 \cdot 10^8$ Н/м², $\varepsilon_* = 0,452 \cdot 10^{-2} \ll 1$; $\sigma = 0,431$, $\theta_0 = 14,42$, $\beta = 0,0299$, $Q_e = 4,76$. Если образец изотропный по свойствам среды, то $\omega = \omega_0 = 0,0013$ ($\omega_1 = 0,043$), $h_1 = 0,855$, $h_2 = 1$, $h_3 = 0,394$. Принимая $\alpha^{(BA)} = 0,1$, найдем в этом случае $g_1 = g_{10} = 0,424$. Пусть теперь $\alpha_1^{(T)} = 10\alpha_2^{(T)} = 2,87 \cdot 10^{-3}$, тогда $g_1 = 0,063 \neq g_{10}$, $\omega = 0,114 \neq \omega_0$. Если $\alpha_{12}^{(T)} = 1$, но $\alpha_1^{(BA)} = 2\alpha_2^{(BA)} = 0,2$, то $g_1 = 0,691$, $\omega = 0,017$. Существенно влияет на безразмерные параметры различие механических свойств. Так, если $E_2 = 1,99 \cdot 10^9$ Н/м², то в достаточно узкой области изменения E_1 параметр ω меняется от $-0,23$ до $0,55$.

Из сказанного следует, что при параметрическом анализе величины h_1, h_2, h_3 (последний входит лишь в ω или в ω_1), β, γ_1 (как малые параметры), $\alpha_{12}^{(T)}, \alpha_{12}^{(BA)}$ вполне могут быть зафиксированы, так что для численного анализа модели останется лишь исследовать влияние параметров θ_0 (или Q_e), ω_1 (самостоятельно не встречаются ни ω_0 , ни ω) и g_{10} на характеристики зажигания.

Численное решение задачи (27) проведено по неявной разностной схеме методом прогонки с использованием линеаризации нелинейных слагаемых по Ньютону на каждом временном слое относительно предыдущего. Так как обычно используемая для подобных задач разностная схема имеет первый порядок аппроксимации по временному шагу, а линеаризация по Ньютону — второй, то такой метод решения представляется корректным.

В расчетах определяли время и температуру зажигания, ширину реакционной зоны, тепловыделение реакции, поля температуры, степени превращения, напряжений и деформаций. О зажигании судили по условию

$$Q_s \geq Q_e,$$

где Q_s — суммарное тепловыделение в зоне реакции, $Q_s = \int_0^{\xi_r} Q_{ch} d\xi$, $Q_{ch} = [1 - \omega_1 g_1 (1 + \beta\theta)] (1 - y)^n \exp(\theta/(1 + \beta\theta))$; ξ_r — точка, где степень превращения уменьшается по сравнению с y в точке $\xi = 0$ в e раз.

Анализ результатов численного счета задачи для $n = 1$ показывает, что при учете связности тепловых и механических процессов время зажигания резко возрастает (в силу зависимости эффективной теплоемкости от температуры), если вещество изотропно.

При $\omega = 0$ температура зажигания θ_i (температура поверхности реагента к моменту зажигания τ_i) и степень превращения y_i в точке $\xi = 0$ к моменту зажигания увеличиваются соответственно от 2,91 до 5,83 и от 0,11 до 0,373 при $\theta_0 = 7 \div 50$. Ширина реакционной зоны ξ_r уменьшается с увеличением θ_0 . Во всей этой области изменения температурного напора можно говорить о нормальных режимах зажигания, как это понимается в тепловой теории [35]: зависимость максимальной температуры в реагенте от времени имеет характерный перегиб, соответствующий моменту инициирования (подключения) химической реакции. Время зажигания τ_i при больших значениях θ_0 , определенное в соответствии с описанным выше критерием, составляет приблизительно $\theta_0/2$ (кривая 3 на рис. 1).

При $\omega_0 = 0,0013$ и $g_{10} = 0$ роль выгорания возрастает при $\theta_0 > 40$, что приводит к вырождению режима зажигания, т. е. к монотонному (без перегиба) поведению температуры в зоне реакции во времени. Это отличает предложенную модель от тепловой теории, где роль

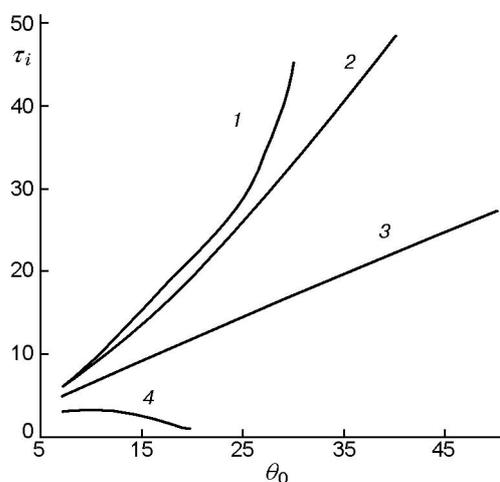


Рис. 1. Зависимость времени зажигания от температурного напора:

1–3 — изотропное вещество: 1 — $\omega_0 = 0,0013$, $g_{10} = 0,424$, 2 — $\omega_0 = 0,0013$, $g_{10} = 0$, 3 — $\omega_0 = 0$, 4 — гексагональный кристалл, $E_1/E_2 = 1,5$ ($\omega = -0,0026$), $\omega_0 = 0,0013$, $g_{10} = 0,424$

выгорания на стадии зажигания, особенно при больших значениях θ_0 , незначительна.

При учете концентрационного расширения ($g_{10} = 0,424$) время зажигания при $\theta_0 = 7 \div 30$ еще более возрастает по сравнению с тепловой теорией. Увеличиваются также значения y_i и θ_i . При $\theta_0 \rightarrow 30$ имеем $y_i \rightarrow 1$, $\theta_i \rightarrow 17,96$. Для $\omega_0 \neq 0$, $g_{10} \neq 0$ ширина реакционной зоны при увеличении θ_0 сначала немного уменьшается, а затем вновь возрастает, стремясь к постоянному значению $\xi_r \approx 0,35$. Область существования

нормальных режимов зажигания сужается при увеличении ω_0 и g_{10} .

Зависимости степени превращения и температуры на границе ($\xi = 0$), а также суммарного тепловыделения в реакционной зоне от времени представлены на рис. 2 при различных значениях θ_0 , откуда хорошо видно изменение качественного хода кривых при смене режима химического превращения в прогретом слое. Если при $\theta_0 = 14,42$ наблюдается нормальный режим зажигания (кривым 1 на рис. 2 соответствуют пространственные распределения величин, представленные на рис. 3) с максимумом тепловыделения в точке $\xi = 0$, то при $\theta_0 = 25$ максимум тепловыделения в момент зажигания наблюдается на некотором расстоянии от поверхности. Кривые 3 на рис. 2 более соответствуют превращению в вынужденном режиме (рис. 4).

Если вещество анизотропное (различны, например, упругие модули E_1 и E_2), появляются дополнительные особенности. Так, при $E_1/E_2 = 1,5$ имеем $\omega = -0,0026$; зависимость времени зажигания от температурного напора в этом случае качественно меняется (кривая 4 на рис. 1) по сравнению с тепловой теорией. При $\theta_0 > 19$ вследствие резкого уменьшения эффективной теплоемкости в прогретом слое происходит «взрыв» в адиабатических условиях за время $\tau_i \sim 1$, причем степень превращения ничтожна. Область нормальных режимов зажигания в этом случае очень узкая. В области параметров, где $\omega > 0$, а следовательно, эффективная теплоемкость может только возра-

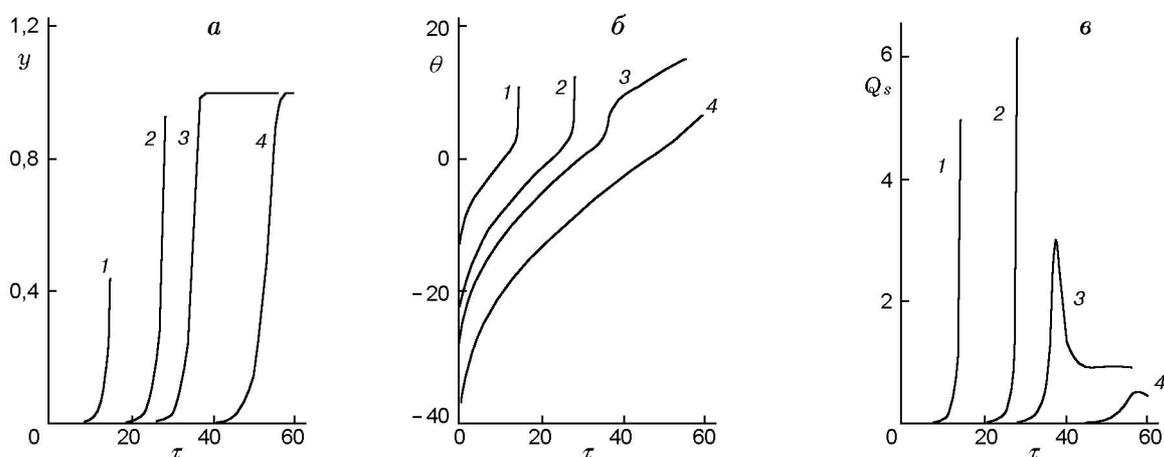


Рис. 2. Зависимость глубины превращения в точке $\xi = 0$ (а), температуры поверхности (б) и суммарного тепловыделения в реакционной зоне (в) от времени:

$\theta_0 = 14,42$ (1), 25 (2), 30 (3), 40 (4)

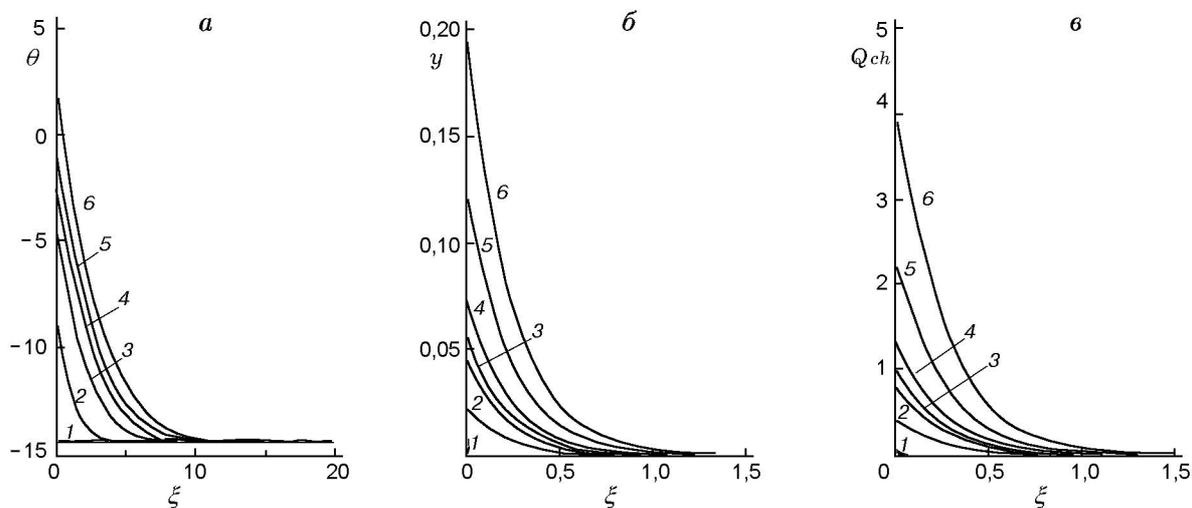


Рис. 3. Распределение температуры (а), глубины превращения (б) и тепловыделения в прогретом слое (в) в различные моменты времени (нормальный режим зажигания):

$\omega_0 = 0,0013, g_{10} = 0,424, \theta_0 = 14,42$; а — $\tau = 0,01$ (1), 2,0 (2), 6,0 (3), 10,0 (4), 13,4 (5), 14,6 (6), б, в — $\tau = 13,4$ (1), 13,7 (2), 14,0 (3), 14,3 (4), 14,5 (5), 14,6 (6)

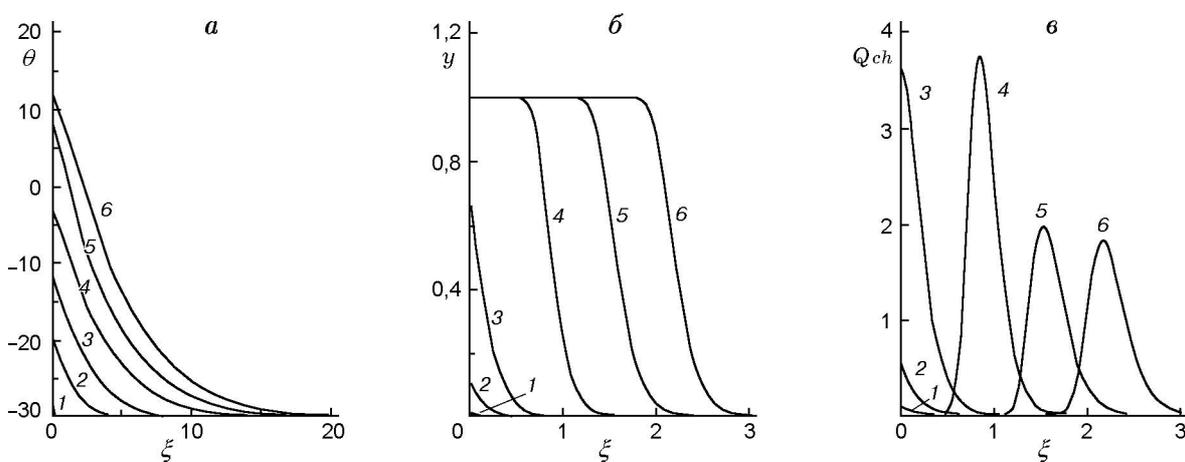


Рис. 4. Распределение температуры (а), глубины превращения (б) и тепловыделения в прогретом слое (в) в различные моменты времени (вырожденный режим зажигания):

$\omega_0 = 0,0013, g_{10} = 0,424, \theta_0 = 30$; а — $\tau = 0,01$ (1), 4,0 (2), 12,0 (3), 26,8 (4), 40,0 (5), 52,0 (6), б, в — $\tau = 26,8$ (1), 28,0 (2), 32,0 (3), 40,0 (4), 48,0 (5), 56,0 (6)

стать, качественные закономерности процесса зажигания аналогичны описанным выше для изотропного вещества.

В силу значительной роли выгорания и качественного отличия характеристики зоны реакции в этой модели от таковых для тепловой теории в дальнейшем наибольший интерес будет представлять расчет не характеристик зажигания, а, например, зависимости времени полупревращения образца конечных раз-

меров от типа кинетической функции, отражающей механизм реакции на микроуровне для конкретных систем, а также расчет изменения структуры образца для реакций, сопровождающихся значительными объемными изменениями и накоплением повреждений или разрушением. Особенности процесса возбуждения реакции, вносимые этими факторами, отмечены в [37, 38].

ВЫВОДЫ

- Предложена модель зажигания одиночных кристаллов взрывчатых веществ.
- Показано, что учет анизотропии свойств приводит к расширению области изменения параметров модели, характеризующих связность тепловых и механических процессов.
- Продемонстрирована значительная роль выгорания вещества в макрокинетике возбуждения реакции в прогретом слое, что приводит к сужению области нормальных режимов зажигания.
- Обнаружено, что в некоторой области параметров вещества зависимость времени зажигания от температурного напора качественно изменяется по сравнению с тепловой теорией.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Беляев А. Ф., Боболев В. К., Коротков А. И. и др.** Переход горения конденсированных систем во взрыв. М.: Наука, 1973.
2. **Heister S.** Landsbaum analysis of ballistic anomalies in solid rocket motors // AIAA Papers. N 85-1303. 1985.
3. **Либрович В. Б., Ярин А. Л.** О влиянии механических напряжений на скорость горения смесевых твердых топлив // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21, № 5. С. 58–63.
4. **Ковалев О. Б., Петров А. П., Фомин В. М.** Горение смесового твердого топлива в условиях статических механических растягивающих напряжений // Физика горения и взрыва. 1993. Т. 29, № 4. С. 21–28.
5. **Kohn M. A.** A study of mechanical failure properties and their effects on combustion characteristics of AP-composite propellants // Tokyo, The Inst. of Space and Astronautical Science. Report N 598. 1981.
6. **Kuo K. K., Kooker D. E.** Coupling between nonsteady burning and structure mechanics of solid propellant grains // Nonsteady Burning and Combustion Stability of Solid Propellants / L. De Luca, M. Summerfield (Eds). Washington, DC: AIAA, 1992. SH-13. P. 465–517. (Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 143).
7. **Максимов Э. И., Мержанов А. Г.** Об одной модели горения нелетучих взрывчатых веществ // Докл. АН СССР. 1964. Т. 157, № 2. С. 412–415.
8. **Хайкин Б. И., Мержанов А. Г.** О горении веществ с твердым реакционным слоем // Докл. АН СССР. 1967. Т. 173, № 6. С. 1382–1385.
9. **Абруков С. А., Марченко Г. Н., Масимов Н. Н. и др.** К вопросу о роли диспергирования при горении конденсированных систем смесового типа // Физика горения и взрыва. 1976. Т. 12, № 1. С. 26–31.
10. **Манелис Г. Б.** Современные проблемы кинетики химических реакций в твердой фазе // Проблемы химической кинетики. М.: Наука, 1979. С. 226–231.
11. **Браун Р., Доллимор Д., Галвей А.** Реакции твердых тел. М.: Мир, 1983.
12. **Манелис Г. Б., Раевский А. В., Щербakov Л. Г. и др.** Дислокационный механизм химических превращений в твердой фазе // Научные основы материаловедения. М.: Наука, 1981. С. 178–192.
13. **Янг Д.** Кинетика разложения твердых веществ. М.: Мир, 1969.
14. **Бодэн Ф. П., Иоффе А.** Быстрые реакции в твердых веществах. М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
15. **Андреев К. К.** Термическое разложение и горение взрывчатых веществ. М.: Наука, 1966.
16. **Андреев К. К., Горбунов В. В.** О термостабильности кристаллов взрывчатых веществ // Теория взрывчатых веществ. М.: ГНТИ, Оборонгиз, 1963. С. 20–33.
17. **Андреев К. К.** К вопросу о факторах, обуславливающих возникновение взрыва при ударе и трении, и методах оценки чувствительности ВВ к механическим воздействиям. М.: ГНТИ, Оборонгиз, 1963. С. 37–53.
18. **Барелко В. В., Рябых С. М., Карабукаев К. Ш.** О безгазовой детонации в процессах взрывного разложения азидов тяжелых металлов // Хим. физика. 1993. Т. 12, № 2. С. 274–282.
19. **Рябых С. М., Бугаенко Л. Т., Барелко В. В.** Детонация инициирующих взрывчатых веществ как топохимическая реакция // Химическая физика процессов горения и взрыва. Черноголовка, 1996. Т. 2. С. 75–77.
20. **Chaudhry M. M.** Photographic evidence for ignition by friction in a deflagrating explosive single crystal / J. Phys. D: Appl. Phys. 1992. V. 25. P. 552–557.
21. **Pereira C. M., Chaudhry M. M.** Optical and raman studies of explosives under varying pressure and temperature // Shock waves in condensed matter. Amsterdam: Elsevier Sci. Publ. B.V., 1988. P. 481–484.
22. **Jyoyhi Bhasu V. C., Chaudhry M. M., Housden J.** Rapid mass spectrometric analysis of fragments of trinitrotoluence, picric acid and tetryl generated by laser irradiation // J. Mater. Sci. 1991. V. 26. P. 2199–2207.
23. **Князева А. Г.** Введение в локально-равновесную термодинамику физико-химических превращений в деформируемых средах. Томск, 1996.
24. **Новацкий В.** Теория упругости. М.: Мир, 1975.
25. **Дьярмати И.** Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974.
26. **Де Гроот С., Мазур П.** Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.

27. **Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.** Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979.
28. **Шермергор Т. Д.** Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977.
29. **Knyazeva A. G., Zarko V. E.** Modeling of combustion of energetic materials with chemically induced mechanical processes // *J. Propulsion and Power*. 1995. N 4. P. 791–803.
30. **Knyazeva A. G., Zarko V. E.** The effect of chemically induced stresses and deformations in the ignition of solid propellants // *Challenges in Propellants and Combustion. 100 years after Nobel* / K. K. Kuo (Ed.). New York, Wallingford (U.K.): Begell House, Inc., 1997. P. 762–773.
31. **Князева А. Г.** Связные модели физико-химических превращений в твердых средах с учетом деформирования и разрушения: Дис. д-ра физ.-мат. наук. Томск: ИФПМ СО РАН, 1996.
32. **Регель В. Р., Слущкер А. И., Томашевский Э. З.** Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука, 1974.
33. **Чупахин А. П., Сидельников А. А., Болдырев В. В.** Влияние возникающих при твердофазных химических превращениях механических напряжений на кинетику. Общий подход // *Изв. СО РАН. Сер. хим. науки*. 1985. Вып. 6. С. 31–38.
34. **Князева А. Г.** Зажигание конденсированного вещества горячей пластиной с учетом термонапряжений // *Физика горения и взрыва*. 1992. Т. 28, № 1. С. 13–18.
35. **Vilyunov V. N. and Zarko V. E.** Ignition of solids. Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo: Elsevier Sci. Publ. B.V., 1989.
36. **Физика взрыва** / Ф. А. Баум, Л. П. Орленко, К. П. Станюкович, Р. П. Чельшев, Б. И. Шехтер. М.: Наука, 1975.
37. **Князева А. Г., Кузнецов В. Т.** Разрушение поверхности нитроглицеринового пороха в процессе его зажигания при различных начальных температурах // *Физика горения и взрыва*. 1995. Т. 31, № 4. С. 10–19.
38. **Князева А. Г.** О зажигании тел конечных размеров // *Математические модели и методы их исследования: Междунар. конф., 18–24 августа 1999 г: Тез. докл. Красноярск, 1999. С. 121.*

Поступила в редакцию 25/1 2000 г.