

## РАСЧЕТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРЕВА ТАТБ

К. Ф. Гребенкин, А. Л. Жеребцов

ВНИИ технической физики, 456770 Снежинск

Представлена модель ударно-волнового нагрева конденсированных взрывчатых веществ (ВВ), в которой используется уточненная зависимость теплоемкости ВВ от температуры и учитывается влияние начальной плотности ВВ. Проведены расчеты зависимости нагрева ВВ — тротила, тэна, ТАТБ — от давления на фронте ударной волны. Моделирование нагрева ТАТБ представляет интерес для понимания процесса ударно-волнового инициирования детонации, в том числе зависимости ударно-волновой чувствительности от начальной плотности и температуры ВВ.

### ВВЕДЕНИЕ

Триаминотринитробензол (ТАТБ) обладает исключительно низкой чувствительностью к тепловым и ударно-волновым воздействиям. Процессы, протекающие при действии ударных волн на ТАТБ, представляют большой практический и теоретический интерес и служат объектом интенсивных исследований (см., например, [1]). Одной из актуальных проблем является определение температуры ударно-волнового разогрева ТАТБ. Можно ожидать, что кинетика ударно-волнового инициирования детонации конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) в значительной мере определяется температурой, возникающей после прохождения ударной волны. Поэтому для разработки физических моделей ударно-волнового возбуждения детонации необходим корректный расчет температуры.

Расчетное моделирование нагрева конденсированных ВВ в ударных волнах является нетривиальной задачей. Например, даже для простейшего ВВ — нитрометана — расчетные значения приращения температуры при давлении  $p \approx 15$  ГПа, получаемые в разных моделях, отличаются в 1,5 раза [2].

Помимо нитрометана, расчеты были проведены и для некоторых других конденсированных ВВ — тротила, гексогена, октогена и др. (см. монографию [3] и библиографию в ней). Для ТАТБ подобные расчеты не проводились, и это является основной целью данной работы. Кроме того, в работе рассматривается существенный эффект, который не учитывался ранее, — влияние начальной пористости ВВ на температуру разогрева, что может иметь важное значение для объяснения наблюдаемой

в экспериментах сильной зависимости ударно-волновой чувствительности конденсированных ВВ от их начальной плотности.

### МЕТОД РАСЧЕТА

Пусть начальное состояние вещества характеризуется параметрами  $p_0, v_0, T_0, E_0$ , а  $(p_1, v_1, T_1, E_1)$  — точка на ударной адиабате. Здесь  $v, T, E$  — удельный объем, температура и удельная внутренняя энергия соответственно. Дифференциальное уравнение, связывающее температуру ударного сжатия с удельным объемом с учетом зависимости теплоемкости от температуры, имеет вид [4]

$$\frac{dT_1}{dv_1} = F(v_1, T_1), \quad (1)$$

где

$$F(v_1, T_1) = \frac{1}{c_v(T_1)} \left[ f(v_1) - \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v T_1 \right],$$

$$f(v_1) = \frac{1}{2} \frac{dp_1}{dv_1} (v_0 - v_1) + \frac{1}{2} p_1,$$

$c_v$  — удельная теплоемкость при постоянном объеме. Функция  $f(v_1)$  определяется по экспериментальной ударной адиабате  $p_1(v_1)$ , а температура ударного сжатия находится путем численного решения дифференциального уравнения (1) с начальными условиями  $T_1(v_0) = T_0$ .

Конденсированные ВВ — это молекулярные среды, и внутримолекулярные степени свободы вносят определяющий вклад в их теплоемкость. Действительно, если молекула ВВ состоит из  $S$  атомов, то на поступательное и вращательное движения приходится по 3 степени свободы, а на внутримолекулярные колебания —  $(3S - 6)$  степеней свободы. Это означает,

что, например, для ТАТБ ( $S = 24$ ) вклад внутримолекулярных колебаний в теплоемкость будет на порядок больше, чем сумма вращательной и поступательной составляющих теплоемкости. Известно, что при  $p = 10 \div 20$  ГПа, характерном для ударно-волнового инициирования однородных конденсированных ВВ, значение  $p$  не влияет на частоты колебаний молекул ВВ [5]. Исходя из этого можно считать, что приращение теплоемкости ВВ с увеличением температуры определяется возрастанием колебательной теплоемкости, причем последнюю можно взять такой же, как для изолированной молекулы:

$$c_v(T) = c_v^0 + \Delta c(T). \quad (2)$$

Здесь  $c_v^0$  — теплоемкость вещества при нормальных условиях ( $T_0, p_0$ ), а  $\Delta c(T)$  — приращение колебательной теплоемкости изолированной молекулы при повышении температуры на  $\Delta T = T - T_0$ .

Для малых молекул зависимость колебательной теплоемкости от температуры можно рассчитать с использованием известных частот нормальных колебаний [6]. Однако для более сложных молекул ВВ такой подход неприменим, поскольку их полные колебательные спектры неизвестны.

На практике широкое распространение получил приближенный метод расчета колебательной теплоемкости, основанный на характеристических частотах химических связей [7]. Согласно нашим оценкам использование этого

Таблица 1

ВВ	A	B	C
Тротил	-1,0718	$-1,4707 \cdot 10^{-3}$	0,13188
ТЭН	-1,0014	$-1,3960 \cdot 10^{-3}$	0,12815
ТАТБ	-0,75954	$-1,2538 \cdot 10^{-3}$	0,11591

метода приводит к погрешности, особенно при  $T < 1000$  К.

В данной работе уточнение зависимости теплоемкости от температуры достигнуто за счет двух факторов. Во-первых, теплоемкость при начальных условиях взята из эксперимента, а изменение теплоемкости при изменении температуры получено расчетным путем. Во-вторых, зависимость  $\Delta c(T)$  получена из полуэмпирических квантово-химических расчетов по стандартному методу MNDO, реализованному в программе MORAC [8], что обеспечило более высокую точность по сравнению с моделью [7]. Расчетная зависимость  $c(T)$  в диапазоне  $T = 300 \div 1500$  К для каждого ВВ была аппроксимирована формулой  $c(T) = A + BT + CT^{1/2}$  (размерность  $c$  — Дж/(г · К)). Полученные таким образом наборы коэффициентов представлены в табл. 1.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ СПЛОШНЫХ СРЕД

Для проверки изложенной выше модели были рассчитаны температуры ударного сжа-

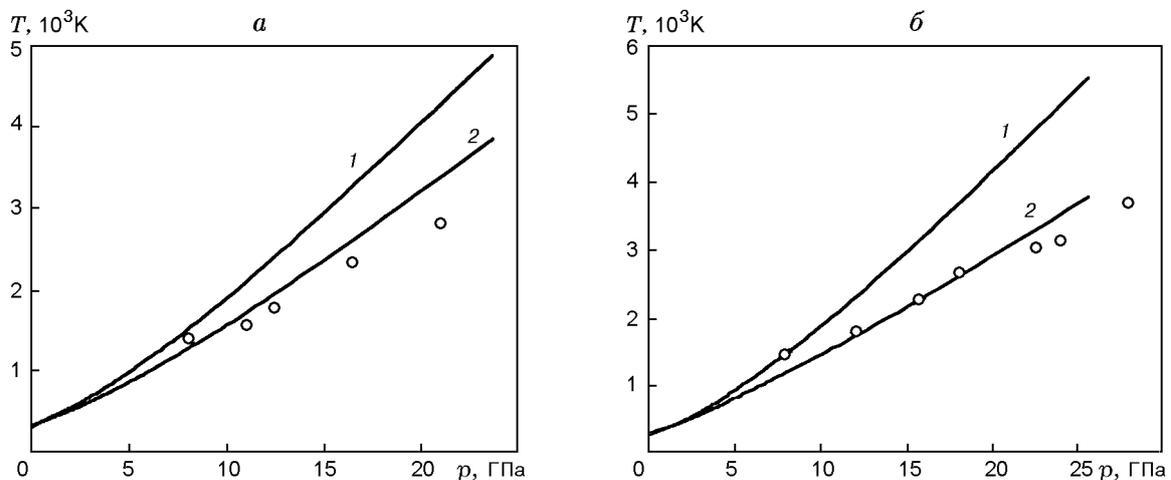


Рис. 1. Зависимость температуры ударного сжатия четыреххлористого углерода (а) и хлороформа (б) от давления:

1 —  $c_v = c_v^0 = \text{const}$ , 2 —  $c_v = c_v(T)$ ; точки: а — эксперимент [9], б — [10]

Таблица 2

ВВ	$T_0$ , К	$v_0$ , см <sup>3</sup> /г	$c_0$ , км/с	$\alpha$ , $10^{-4}$ К <sup>-1</sup>	$c_p$ , Дж/(г·К)	$\Gamma$	$c_v$ , Дж/(г·К)	$(\partial p/\partial T)_v$ , $10^{-3}$ ГПа/К
Тротил (C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub> )	358	0,690	1,55 [12]	7,00 [12]	1,604 [13]	1,05	1,270	1,933
ТЭН (C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>12</sub> )	293	0,564	2,32 [11]	2,32 [11]	1,08 [11]	1,16	1,00	2,057
ТАТБ (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub> )	293	0,516	1,43 [11]	0,995 [11]	1,00 [11]	0,3	0,99	0,576

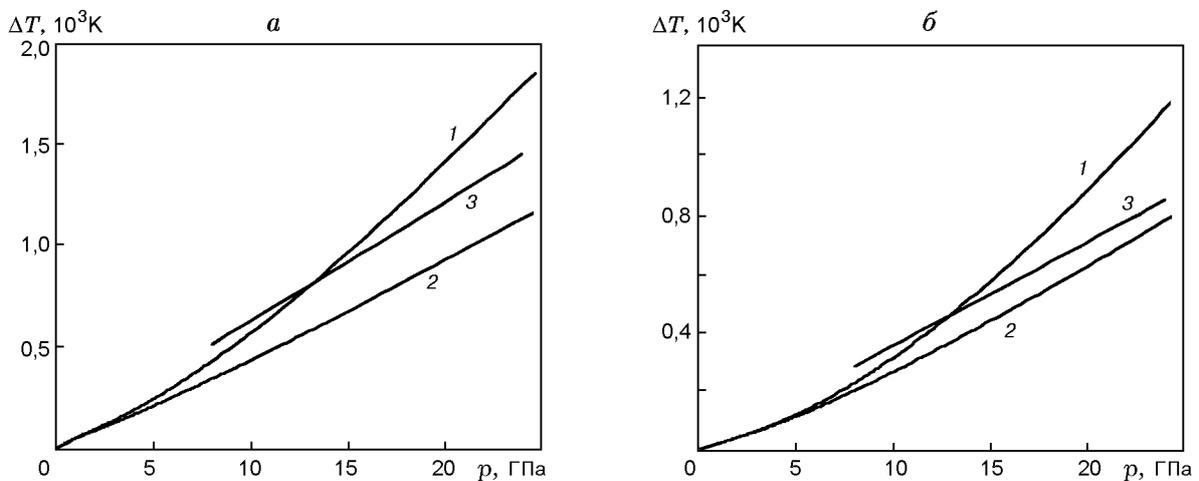


Рис. 2. Расчетная температура ударно-сжатого жидкого тротила (а) и ударно-сжатого монокристаллического тэна (б):

1 —  $c_v = c_v^0 = \text{const}$ , 2 —  $c_v = c_v(T)$ , 3 — [14]

тия простейших молекулярных сред — четыреххлористого углерода и хлороформа, и проведено сравнение с экспериментальными данными (рис. 1). Температурная зависимость теплоемкости этих веществ была рассчитана на основе их колебательных спектров [6], термодинамические параметры начального состояния взяты из [7], а уравнения ударных адиабат — из работы [4].

Результаты расчетов с учетом зависимости теплоемкости от температуры хорошо согласуются с экспериментальными данными всюду, за исключением области температур  $T \geq 2500 \div 3000$  К, где расхождение связано, вероятно, с процессом диссоциации молекул, который в расчетах не учитывался. Для ВВ влиянием диссоциации можно пренебречь, поскольку при рассматриваемых давлениях ( $p \leq 20$  ГПа) температура ударного сжатия не превышает 1500 К.

Расчеты температур ударного сжатия ВВ (жидкого тротила, а также тэна и ТАТБ кри-

сталлической плотности) проводили с использованием исходных данных, приведенных в табл. 2, где значения  $\Gamma$ ,  $c_v$  и  $(\frac{\partial p}{\partial T})_v$  при начальных условиях рассчитаны по формулам

$$\Gamma = \frac{\alpha c_0^2}{c_p}, \quad c_v = \frac{c_p}{1 + \alpha \Gamma T}, \quad \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = \Gamma \frac{c_v}{v}.$$

Здесь  $c_0$  — скорость звука,  $\alpha$  — коэффициент объемного термического расширения,  $c_p$  — удельная энергия при постоянном давлении,  $\Gamma$  — коэффициент Грюнаузена; использовалось соотношение  $\Gamma/v = \Gamma_0/v_0$ .

При проведении расчетов зависимости  $p_1(v_1)$  определялись с помощью следующих экспериментальных соотношений на ударной адиабате:

$$\begin{aligned} \text{жидкий тротил} & D = 2,0 + 1,65u \text{ [13]}, \\ \text{тэн} & D = 2,81 + 1,73u \text{ [11]}, \\ \text{ТАТБ} & D = 2,9 + 1,68u \text{ [11]}. \end{aligned}$$

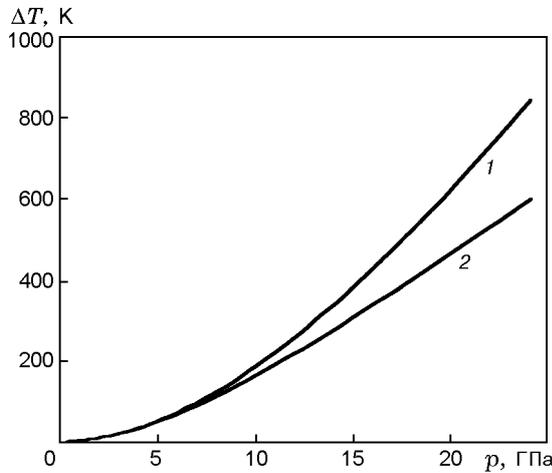


Рис. 3. Расчетная температура ударно-сжатого монокристаллического ТАТБ:

1 —  $c_v = c_v^0 = \text{const}$ , 2 —  $c_v = c_v(T)$

Здесь  $D$  — скорость ударной волны,  $u$  — массовая скорость.

Расчеты ударного нагрева взрывчатых веществ были проведены как с учетом зависимости  $c_v(T)$ , так и с использованием постоянно значения теплоемкости, соответствующего начальным условиям. Результаты вычислений представлены на рис. 2, 3.

Учет температурной зависимости теплоемкости ВВ приводит к существенному снижению температуры ударного сжатия. Для сравнения на рис. 2 представлены также результаты расчетов [14]. Наблюдается систематическое расхождение между данными [14] и результатами настоящей работы: в [14] значение приращения температуры выше на  $\approx 30\%$ . Наиболее вероятные причины этого различия состоят в том, что в [14] для расчета колебательной теплоемкости использована приближенная модель [7], а начальное значение коэффициента Грюнайзена  $\Gamma = 3$  не согласовано с другими параметрами ( $\alpha$ ,  $c_0$ ,  $c_p$ ) и, по видимому, завышено.

Таким образом, уточнение значения удельной теплоемкости и коэффициента Грюнайзена приводит к существенному снижению температуры ударного сжатия по сравнению с [14]. Для проверки модели ударно-волнового нагрева сплошных конденсированных ВВ было бы полезно провести измерения температуры жидких и кристаллических ВВ и на этой основе — верификацию расчетных моделей.

Результаты расчетов ударно-волнового нагрева ТАТБ представлены на рис. 3. Расчетную зависимость температуры ударного нагрева ТАТБ кристаллической плотности от давления на фронте ударной волны можно аппроксимировать линейной функцией:

$$T(p) = A + B_0 p, \quad (3)$$

где  $A = 187$  К,  $B_0 = 29$  К/ГПа. Эта формула применима при  $5 \leq p \leq 25$  ГПа.

Вообще говоря, учет зависимости теплоемкости от температуры приводит к тому, что приращение температуры при определенном давлении ударного сжатия нелинейно зависит от начальной температуры ВВ. Однако расчеты показали, что при изменении начальной температуры ТАТБ в пределах  $0 \div 200$  К нелинейный эффект незначителен, и расчетную температуру ударного сжатия ТАТБ кристаллической плотности в зависимости от давления и начальной температуры с точностью  $\approx 5\%$  можно представить в виде

$$T(p, T_0) \approx (T_0 - 293) + A + B_0 p. \quad (4)$$

## ВЛИЯНИЕ ПОРИСТОСТИ

Многие промышленные ВВ получают путем прессования исходных мелкокристаллических материалов, и, как правило, плотность прессованных ВВ оказывается несколько меньше, чем у кристалла. Известно, что наличие даже малой пористости может существенно влиять на нагревание вещества под действием ударных волн [15].

Для оценки этого эффекта воспользуемся уравнением состояния пористой среды в форме Грюнайзена [15]:

$$p = \rho_0 c_0^2 \pi(\sigma) + \Gamma \rho (\varepsilon - \varepsilon_x),$$

где  $\rho_0$  — кристаллическая плотность вещества,  $\rho_0 = k \rho_{00}$ ,  $\rho_{00}$  — начальная плотность вещества,  $k$  — коэффициент пористости,  $c_0$  — скорость звука в несжатом сплошном веществе,  $\sigma = \rho/\rho_0$  — сжатие среды,  $\pi(\sigma)$  — зависимость безразмерного холодного давления от сжатия,  $\Gamma$  — коэффициент Грюнайзена,  $\varepsilon_x$  — холодная составляющая внутренней энергии среды,

$$\varepsilon_x(\sigma) = c_0^2 i(\sigma), \quad \text{где } i(\sigma) = \int_1^\sigma \frac{\pi(\sigma)}{\sigma^2} d\sigma.$$

Увеличение температуры пористого вещества под действием ударной волны можно представить в виде [15]:

$$\Delta T = c_0^2 \left[ \pi(\sigma) \left( k - \frac{1}{\sigma} \right) - 2i(\sigma) \right] / \left[ 2c_{\text{ВВ}} \left[ 1 - \frac{\Gamma}{2}(k\sigma - 1) \right] \right], \quad (5)$$

где  $c_{\text{ВВ}}$  — эффективная теплоемкость взрывчатого вещества.

Рассмотрим случай малой пористости:  $k = 1 + \xi$ ,  $\xi \ll 1$ . Тогда

$$\Delta T \approx \Delta T_0 + \frac{d\Delta T}{d\xi} \xi,$$

где  $\Delta T_0(p)$  — нагрев сплошного вещества в ударной волне с давлением на фронте, равным  $p$ .

Из формулы (5) нетрудно получить, что

$$\frac{d\Delta T}{d\xi} \approx \frac{p_x}{2\rho_0 c_{\text{ВВ}}} \approx \frac{p}{2\rho_0 c_{\text{ВВ}}}.$$

Здесь использовано то обстоятельство, что в интересующей нас области давлений  $p \leq 20$  ГПа сжатие ВВ мало по сравнению с предельным значением и  $p \approx p_x$ , где  $p_x = \rho_0 c_0^2 \pi(\sigma)$ .

Таким образом, влияние пористости сводится к тому, что вместо  $B_0$  в формуле (4) следует взять  $B(\xi) = B_0 + \xi/2\rho_0 c_{\text{ВВ}}$ , т. е. зависимость температуры ударного сжатия слабопористого ТАТБ от давления имеет вид

$$T(p, T_0, \xi) \approx (T_0 - 293) + A + \left( B_0 + \frac{\xi}{2\rho_0 c_{\text{ВВ}}} \right) p. \quad (6)$$

При проведении вычислений по формуле (6) было принято, что  $c_{\text{ВВ}} \approx 1,3$  Дж/(г·К) — эффективное значение теплоемкости, приблизительно воспроизводящее нагрев ТАТБ с учетом зависимости  $c_v(T)$ . Для нормальных начальных условий формула (6) принимает вид

$$T(p, \xi) \approx A + [B_0 + 1,99\xi]p. \quad (7)$$

Здесь  $\xi$  выражено в процентах.

Результаты расчетов нагрева в ударной волне пористого ТАТБ по формуле (7) при  $\rho_{00} = 1,905$  г/см<sup>3</sup> ( $\xi = 1,68\%$ ) и нормальных начальных условиях приведены на рис. 4. На этом же рисунке для сравнения приведены аналогичные результаты, полученные с использованием уравнения состояния JWL для взрывчатого вещества LX-17 (92,5% ТАТБ,  $\rho_{00} = 1,905$  г/см<sup>3</sup>) [16]. Наблюдаемое расхождение, вероятно, объясняется тем, что в [16] в уравнении состояния JWL не учитывается зависимость теплоемкости ТАТБ от температуры и используется завышенное значение коэффициента Грюнайзена, которое противоречит экспериментальным данным [11].

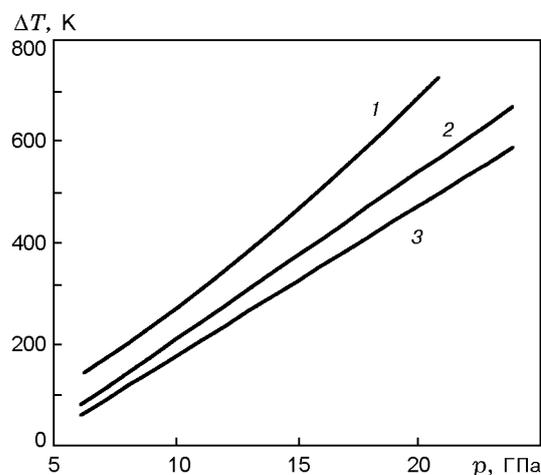


Рис. 4. Расчетная температура ударно-сжатого ТАТБ:

1 — расчет по уравнению состояния JWL для состава LX-17 ( $\rho_{00} = 1,905$  г/см<sup>3</sup>) [16], 2 — пористый ТАТБ ( $\rho_{00} = 1,905$  г/см<sup>3</sup>), 3 — ТАТБ кристаллической плотности

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании результатов расчетов можно сделать некоторые выводы о процессе ударно-волнового инициирования детонации и возможных причинах наблюдаемой в экспериментах сильной зависимости ударно-волновой чувствительности ТАТБ от его начальной температуры и плотности [1]. При проведении оценок предполагалось, что инициирование ВВ под действием ударной волны происходит при ударном нагреве ВВ до некоторого критического значения температуры (известно, что это значение меньше температуры теплового инициирования ВВ [3]). В таком случае критическое давление инициирования представляет собой давление на фронте ударной волны, при котором происходит нагрев ВВ до критической температуры ударного сжатия. На основании полученных в данной работе результатов сделаны простые оценки влияния начальной температуры и плотности на критическое давление инициирования детонации ТАТБ, которое при нормальных условиях составляет  $\approx 15$  ГПа в условиях воздействия ступенчатым импульсом [1].

Начальный нагрев ВВ приводит к тому, что достижение критической температуры происходит при меньших давлениях. Согласно уравнению (4)  $\Delta p \approx \Delta T_0/B$ , где  $\Delta T_0$  — начальный нагрев ВВ,  $\Delta p$  — снижение критического давления за счет начального нагрева.

Отсюда следует, что значительное снижение критического давления, например в 1,5 раза, происходит при начальном нагреве ТАТБ всего лишь на  $\approx 150$  К. Качественно это согласуется с экспериментальными данными [1].

Из (7) следует аналогичная оценка влияния начальной плотности ВВ на критическое давление:

$$B_0 p_0 \approx [B_0 + 1,99\xi] p_\xi,$$

где  $p_0$  и  $p_\xi$  — критическое давление инициирования соответственно сплошного и пористого ВВ. Отсюда следует, что снижение критического давления в 1,5 раза происходит при пористости 7%, что соответствует начальной плотности  $1,8 \text{ г/см}^3$ . И эта оценка согласуется с экспериментальными данными [1].

Изложенные выше качественные соображения подтверждают предположение о том, что кинетика ударно-волнового инициирования детонации конденсированных ВВ определяется температурой ударного нагрева. На этом пути открывается возможность прийти к пониманию причин сильной зависимости ударно-волновой чувствительности от начальной плотности и температуры ВВ и разработать физическую модель кинетики инициирования детонации под действием ударных волн.

Авторы признательны М. А. Воробьевой и С. В. Кольчугину за помощь при выполнении работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Джексон Р., Грин Л., Барлетт Р. и др. Закономерности инициирования и распространения детонации во взрывчатом веществе ТАТБ // Детонация и взрывчатые вещества. М.: Мир, 1981. С. 323–342.
2. Чайкен Р. Связь между давлением, температурой ударного сжатия и временем задержки детонации в нитрометане // Там же. С. 220–235.
3. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортов. М.: Янус-К, 1996.
4. Cowperthwaite M., Shaw R.  $C_V(T)$  equation of state for liquids. Calculation of the shock temperature of carbon tetrachloride, nitromethane, and water in 100-kbar region // J. Chem. Phys. 1970. V. 53, N 4. P. 555–560.
5. Miller P. J., Block S., Piermarini G. J. Effect of pressure on the vibration spectra of liquid Nitromethane // J. Phys. Chem. 1989. V. 93. P. 462–466.
6. Волькенштейн М. В. Строение и физические свойства молекул. М.: Изд-во АН СССР, 1955.
7. Цянь Сюэ-сень. Физическая механика. М.: Мир, 1965.
8. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990.
9. Воскобойников И. М., Богомолов В. М. Измерение температур ударносжатых  $\text{CCl}_4$  и раствора  $\text{CCl}_4\text{-C}_6\text{H}_6$  // Письма в ЖЭТФ. 1968. Т. 7, вып.9. С. 338–341.
10. Гоголя М. Ф., Долгобородов А. Ю. Индикаторный метод исследования ударных и детонационных волн // Хим. физика. 1994. Т. 13, № 12. С. 118–127.
11. Олинджер Б., Кейди Г. Ударная сжимаемость гэна, ТАТБ,  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$  при давлениях до 10 ГПа // Детонация и взрывчатые вещества. М.: Мир, 1981. С. 203–219.
12. Воскобойников И. И., Богомолов В. М., Апин А. Я. Расчет давления инициирования взрыва гомогенных взрывчатых веществ ударной волной // Физика горения и взрыва. 1968. Т. 4, № 1. С. 45–49.
13. Мейдер Ч. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
14. Воскобойников И. М., Воскобойникова Н. Ф. Измерение времен превращения конденсированных взрывчатых веществ в детонационной волне // Хим. физика. 1988. Т. 7, № 3. С. 406–411.
15. Забабахин Е. И. Некоторые вопросы газодинамики взрыва. Снежинск, 1997.
16. Tarver C. M., Urtiev P. A., Tao W. C. Effect of tandem and colliding shock waves on the initiation of triaminotrinitrobenzene // J. Appl. Phys. 1995. V. 78, N 5. P. 3089–3095.

Поступила в редакцию 2/IV 1998 г.,  
в окончательном варианте — 8/VI 1999 г.