

УДК 536.711:544.454

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗРЫВЧАТЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСА БЕНЗОТРИФУРОКСАН — АНТРАЦЕН

В. А. Вирченко, В. В. Анискевич, А. И. Ахметзянов, А. П. Егоров,
В. Г. Куликов

СКТБ «Технолог», 192076 Санкт-Петербург, lpfv45@bk.ru

Проведено исследование взрывчатых свойств смеси бензотрифуроксана и антрацена в виде молекулярного комплекса (смешение компонентов на молекулярном уровне) и в виде механической смеси с тем же молярным соотношением компонентов. Показано, что молекулярный комплекс является индивидуальным взрывчатым веществом с модифицированными свойствами.

Ключевые слова: молекулярный комплекс, механическая смесь, детонационные характеристики.

Вопрос о поведении добавок невзрывчатых органических веществ в зоне химических реакций мощных взрывчатых веществ (ВВ) пока остается открытым, хотя большинство взрывчатых составов — это смеси, содержащие ВВ и полимерные или другие органические добавки в пределах до 15 % (масс.). Следует отметить, что такие органические вещества, как оргстекло, полиизобутилен, полиэтилен, полиуретан, бензол и др., полностью разлагаются до равновесных продуктов (СО, СО₂, Н₂, Н₂О, С_{тв} и др.) при давлении ударного сжатия более 20 ГПа, хотя скорость этого процесса не определена [1]. Известно, что полное взаимодействие добавки соли неорганического окислителя (NH₄NO₃) с продуктами детонации в зоне химических реакций мощного ВВ (тротила) возможно только при характерном размере частиц смеси меньше 0.6 мкм, т. е. при смешении компонентов почти на молекулярном уровне [2]. В противном случае взаимодействие между продуктами детонации и добавкой в зоне реакций происходит не полностью.

В данной статье приведены результаты исследования взрывчатых свойств смеси бензотрифуроксана (БТФ) [3] и антрацена с эквимольным соотношением компонентов (63 % БТФ и 37 % антрацена (по массе)) как в виде молекулярного комплекса (смешение компонентов на молекулярном уровне [4]), так и в виде механической смеси с тем же молярным соотношением компонентов.

БТФ — типичное бризантное ВВ, а ан-

трацен является органическим веществом, содержащим только атомы углерода и водорода (C₁₄H₁₀). Свойства этих веществ хорошо изучены [5, 6].

Молекулярный комплекс БТФ — антрацен готовился по известной методике. Строение и свойства молекулярного комплекса (МК), кристаллическая плотность которого составляет $\rho_0 = 1.54 \text{ г/см}^3$, хорошо изучены, в том числе рентгеноструктурным методом [4].

Подготовка механической смеси (МС) проводилась путем смешения компонентов в воде при комнатной температуре. Размер частиц 50 ÷ 100 мкм, расчетная максимальная плотность смеси 1.56 г/см³.

Заряды для исследования взрывчатых характеристик смесей БТФ — антрацен изготавливали методом прессования. МК после прессования не разрушался.

Зависимость скорости детонации от диаметра заряда для смесей БТФ — антрацен определяли как с использованием электроконтактных (ионизационных) датчиков [7], так и электромагнитным методом [8, 9]. База измерения при использовании электроконтактных датчиков составляла 20 ÷ 30 мм, проводилось не менее 5–6 измерений для каждого диаметра заряда. Результаты измерений приведены в табл. 1.

Электромагнитный метод измерения скорости детонации предполагает наличие в экспериментальных сборках одновременно двух регистрирующих датчиков. Первый из них, расположенный ближе к генератору плоской волны, находился внутри заряда ВВ, а второй — на границе раздела ВВ/оргстекло. Об-

Таблица 1
Зависимость скорости детонации от диаметра заряда

Диаметр заряда d , мм	D , км/с	
	молекулярный комплекс, $\rho_0 = 1.51$ г/см ³	механическая смесь, $\rho_0 = 1.55$ г/см ³
∞	5.48*	7.24*
40	$5.45 \pm 0.15^{**}$	$7.20 \pm 0.15^{**}$
30	5.20 ± 0.10	—
20	5.09 ± 0.06	7.01 ± 0.04
15	$4.99 \pm 0.04^{***}$	—
10	Отказ	6.99 ± 0.08
6	—	7.04 ± 0.08

Примечание. *Экстраполяция к бесконечному диаметру заряда, **по данным электромагнитной методики, ***детонация затухает.

щая высота заряда больше 35 мм (без генератора плоской волны), расстояние между датчиками 20 мм. Профили массовых скоростей для зарядов из МС и МК приведены на рис. 1.

При анализе данных, представленных в табл. 1, обращает на себя внимание существенное различие критических диаметров детонации d . Если для МК это около 15 мм, то МС устойчиво детонирует при $d = 6$ мм (минимальный из исследованных диаметров) со скоростью, близкой к предельной.

Другой немаловажный факт — значительная разница в скоростях детонации при предельных размерах заряда. Если предположить, что при $\rho_0 = 1.55$ г/см³ предельная скорость

детонации МК на $0.2 \div 0.3$ км/с выше, чем измеренная в опыте, то разница между скоростями детонации МС и МК составит около 1.5 км/с. Этот результат дает основание предполагать существование различных механизмов детонации этих составов.

Как видно из табл. 1, скорость детонации МС в изученном диапазоне диаметров заряда практически не менялась. Некоторое превышение скорости относительно других данных выявлено при диаметре 40 мм. Однако следует учитывать, что использованный регистрирующий прибор при электромагнитном методе измерения имел дискретность единицы времени 50 нс, что дает ошибку на базе измерения 20 мм в пределах ± 0.15 км/с.

Вид осциллограмм (см. рис. 1) также показывает существенное различие механизмов детонации МК и МС. При детонации заряда МК наблюдается характерный для бризантных ВВ треугольный профиль массовой скорости. Массовая скорость в плоскости Жуге ($1.31 \div 1.33$ км/с) соответствует давлению 11 ГПа и значению показателя политропы около 3, типичному для ВВ.

Заряды МС показали необычный для ВВ столбовидный профиль массовой скорости с небольшим горбом через 0.35 мкс от начала процесса. Массовая скорость в области «полки» $1.15 \div 1.16$ км/с соответствует давлению 13 ГПа. При этом значение показателя политропы близко к 5, что, вероятно, обусловлено высокой концентрацией твердой фазы в продуктах детонации смеси: антрацена или продукта его деструкции — углерода. Для объяснения механизма детонации МС можно пред-

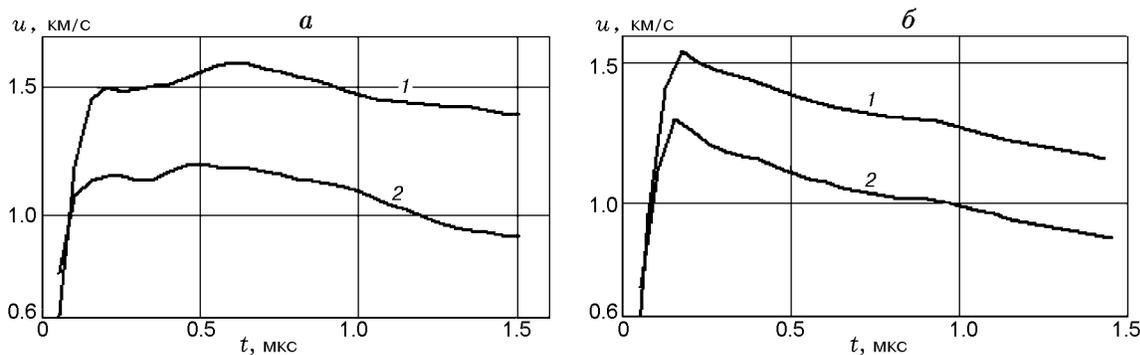


Рис. 1. Осциллограммы массовой скорости, зарегистрированные датчиками, расположенными внутри ВВ (1) и на границе ВВ с оргстеклом (2):

а — механическая смесь, *б* — молекулярный комплекс

Таблица 2

Параметры детонации молекулярного комплекса БТФ — антрацен при $\rho_0 = 1.51 \text{ г/см}^3$

Источник данных	D , км/с	p_J , ГПа	u_J , км/с	w , км/с, при ΔR , мм				
				2	4	6	10	15
Эксперимент	5.48	11.0	1.32	0.756	0.877	0.951	1.035	1.084
Расчет, PAN	5.70	11.2	1.30	0.860	0.972	1.02	1.065	1.094
Расчет, ВКВ	5.76	11.6	1.33	0.812	1.03	1.09	1.14	1.16

Примечание. w — скорость медной оболочки в методике Т-20, $\Delta R = R - R_0$ — приращение радиуса оболочки.

положить, что процесс детонации в смеси ведет БТФ, а появление «полки» постоянной массовой скорости обусловлено режимом детонации, впервые описанным Г. С. Дорониным [10]. В этом случае скорость детонации определяется касанием к кривой максимального тепловыделения, а давление Жуге — пересечением линии Рэлея с равновесной изоэнтропой. Горб массовой скорости объясняется по этой модели формированием устойчивого профиля массовой скорости в режиме переиницирования. Аналогичные профили массовой скорости наблюдали в экспериментах с мощными, флегматизированными парафинами ВВ — гексогеном, тэном, октогеном. Отметим, что содержание флегматизатора в этих ВВ было меньше, чем в наших опытах, — около 5 % (по объему). Значительно короче были и «полки» — $0.1 \div 0.25$ мкс.

Таким образом, логично предположить, что МК детонирует по обычному для индивидуальных ВВ механизму, а МС имеет сложный и, возможно, многостадийный механизм детонации, где ведущую роль играет ВВ. Различие по скорости детонации зарядов МС и МК объясняется тем, что инертная добавка в механической смеси не может существенно влиять на скорость детонации, которая определяется в этом случае лишь типом и количеством основного ВВ.

Исходя из предположения, что молекулярный комплекс БТФ — антрацен представляет собой индивидуальное ВВ, был проведен термодинамический расчет параметров детонации и метательного действия смеси по программе PAN [11], в которой используется уравнение состояния Ree — WCA для молекулярных жидкостей [12, 13], и по методу ВКВ [14]. Результаты расчета в сравнении с экспериментальными данными, определенными по методике Т-20 [15, 16], приведены в табл. 2.

Термодинамический расчет по программам PAN и ВКВ прогнозирует практически совпадающие между собой значения параметров детонации, которые на $4 \div 5$ % превышают экспериментальные данные по скорости и на $2 \div 3$ % по давлению детонации. Учитывая, что экспериментальные значения получены для зарядов диаметром 20 и 40 мм, совпадение можно считать удовлетворительным.

Скорость детонации МК 5.48 км/с близка к рассчитанной по программе ВКВ идеальной скорости 5.76 км/с. Заметим, что при таких расчетах предполагается смешение компонентов в составе на молекулярном уровне и полное их взаимодействие до плоскости Жуге. Следовательно, на основании данных по зависимости $D = f(1/d)$ и газодинамических характеристик можно предположить, что МК — это ВВ со своими характерными свойствами, существенно отличными от свойств БТФ — основного ВВ этого комплекса.

Анализируя результаты расчета скорости

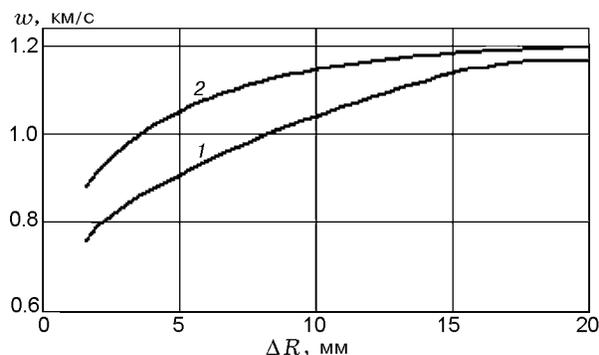


Рис. 2. Скорость медной цилиндрической оболочки в зависимости от приращения радиуса: 1 — молекулярный комплекс, $\rho_0 = 1.54 \text{ г/см}^3$, 2 — механическая смесь, $\rho_0 = 1.55 \text{ г/см}^3$

Таблица 3

Ударно-волновая чувствительность смесей БТФ — антрацен

Взрывчатое вещество	Плотность заряда, г/см ³	Толщина преграды из оргстекла, мм	Давление на выходе из оргстекла, ГПа	Результат
Молекулярный комплекс	1.525	8.5	3.0	Отказ
	1.536	3.56	4.5	—//—
	1.527	1.85	5.2	Детонация
Механическая смесь	1.551	24.6	1.2	—//—
	1.553	32.3	<1.0	—//—

медной цилиндрической оболочки (см. табл. 2), полученные по программе PAN, можно отметить удовлетворительное совпадение с экспериментом (рис. 2) при $\Delta R > 10$ мм, тогда как начальные значения скоростей превышают экспериментальные на $8 \div 10$ % из-за завышенных параметров Жуге. Таким образом, термодинамические расчеты подтверждают предположение о том, что в МК смешение компонентов обеспечивает практически полное их взаимодействие уже в зоне реакции ВВ, т. е. МК можно рассматривать как индивидуальное ВВ с аддитивным брутто-составом и энтальпией.

Последним аргументом, подтверждающим обоснованность подхода к рассмотрению МК как индивидуального ВВ, являются результаты определения ударно-волновой чувствительности МС и МК, проведенного по одному из вариантов gap-test [17] при диаметре и высоте исследуемых зарядов 40 мм. Представленные в табл. 3 данные наглядно демонстрируют различие между МС и МК по чувствительности к ударной волне.

Проведенное сравнительное исследование взрывчатых характеристик молекулярного комплекса БТФ — антрацен и механической смеси тех же веществ показывает, что молекулярный комплекс, по сути, является индивидуальным ВВ, взрывчатые свойства которого могут быть рассчитаны по стандартным программам термодинамического расчета.

Смешение на молекулярном уровне компонентов состава, содержащего ВВ и инертную органическую добавку, не только обеспечивает их полное взаимодействие в зоне химических реакций, но и сильно модифицирует некоторые свойства исходного мощного ВВ, напри-

мер критический диаметр и чувствительность к ударной волне.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kerley G. I. Theoretical model of explosive detonation products: tests and sensitivity studies // Ninth Symp. (Intern.) on Detonation. — Portland, 1989. — P. 443–451.
2. McGuire R. R., Ornellas D. L., Akst I. Detonation chemistry: diffusion control in non-ideal explosives // Symp. on High Dynamic Pressures. — Paris, 1978. — P. 240–247.
3. Фингер М., Ли Е., Хелм Ф. и др. Влияние элементарного состава на детонационные свойства ВВ // Детонация и взрывчатые вещества. — М., 1981. — С. 52–76.
4. Boeyens J. C. A., Herbstein F. H. Molecular compounds and complexes. II. Exploratory crystallographic study of some donor-acceptor molecular compounds // J. Phys. Chem. — 1965. — V. 69, N 7. — P. 2153–2159.
5. Гороновский И. Т., Назаренко Ю. П., Некряч Е. Ф. Краткий справочник по химии. — Киев: Наук. думка, 1987.
6. Van Thiel M., Shaner J., Salinas E. Compendium of shock wave data. Introduction. Section A1. Elements // Lawrence Livermore National Laboratory. Rep. UCRL-50108. — Livermore, 1977.
7. Urizar M. J., James E., Jr., Smith L. C. Detonation velocity of pressed TNT // Phys. Fluids. — 1961. — V. 4, N 2. — P. 262–274.
8. Edwards D. J., Erkman J. O. The measurement of particle velocity in pressed TNT // Naval Ordnance Laboratory. Rep. NOLTR 72-82. — White Oak, 1972.
9. Erickson L. M., Johnson C. B., Parker N. L., et al. The electromagnetic velocity gauge: use of multiple gauges, time response, and flow perturbations // Seventh Intern. Symp. on Detonation. — Annapolis, 1981. — P. 1062–1071.

10. **Альтшулер Л. В., Ашаев В. К., Балалаев В. В., Доронин Г. С., Жученко В. С.** Параметры и режимы детонации конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 4. — С. 153–159.
11. **Вирченко В. А., Слуцкий Д. А., Егоров А. П.** Расчет параметров детонации ВВ термодинамическим методом // Химическая физика процессов горения и взрыва. Детонация. — Черноголовка, 1992. — С. 21–24.
12. **Kang H. S., Lee C. S., Ree T., et al.** A perturbation theory of classical equilibrium fluids // J. Chem. Phys. — 1985. — V. 82, N 1. — P. 414–423.
13. **Егоров А. П., Вирченко В. А., Ахметзянов А. И.** Теоретическое уравнение состояния продуктов детонации, построенное на теории молекулярных флюидов // Конференция «Неделя науки — 2012». — СПб., 2012. — С. 12.
14. **Mader C. L.** Numerical modeling of explosives and propellents. — Boca Raton: CRC Press, 2008.
15. **Бабадей С. М., Трунин Р. Ф., Зубарев В. Н. и др.** Методика определения скорости разлета трубки (Т-20). — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1981.
16. **Вирченко В. А., Егоров А. П., Ахметзянов А. И.** О подходе к моделированию детонационных процессов // Вопросы оборонной техники. — 2011. — Сер. 16, вып. 5-6. — С. 62–65.
17. **Johansson C. H., Lundborg N., Sjolín T.** The initiation of solid explosives by shock waves // Eighth Symp. (Intern.) on Combustion. — Baltimore, 1962. — P. 842.

Поступила в редакцию 26/II 2013 г.
