

ЛИТЕРАТУРА

1. W. E. Baker. Proc. of the Third U. S. National Congress of Applied Mechanics. ASTM, 1958.
2. А. Ф. Демчук.— В кн.: Второй международный симпозиум. Обработка металлов взрывом. Т. 2. Прага, 1974.
3. В. В. Адичев, В. М. Корнев. ФГВ, 1979, 15, 6.
4. В. М. Корнев, В. В. Адичев, А. Н. Митрофанов и др. ФГВ, 1979, 15, 6.
5. W. E. Baker. J. of Acoust. Soc. of America. 1964, 33, 12.
6. В. Е. Бейкер, В. Ху, Т. Джексон. Тр. амер. об-ва инж.-мех. Сер. Е. Прикл. мех., 1966, 34, 4.
7. А. П. Филлипов, С. С. Кохманюк, Е. Г. Янютин. Деформирование элементов конструкций под действием ударных и импульсных нагрузок. Киев: Наукова думка, 1978.
8. В. В. Адичев, В. М. Корнев.— В кн.: Пятый всесоюзный съезд по теоретической и прикладной механике. Алма-Ата, 1981.
9. П. В. Дубнов, Н. С. Бахаревич, А. И. Романов. Промышленные взрывчатые вещества. М.: Недра, 1973.
10. Тензометрия в машиностроении. Справочное пособие/Под ред. Р. А. Макарова. М.: Машиностроение, 1975.
11. Г. С. Писаренко, В. А. Агарев и др. Сопротивление материалов. Киев: Техника, 1967.
12. Р. Мэнли. Анализ и обработка записей колебаний. М.: Машиностроение, 1972.
13. Прочность, устойчивость, колебания. Справочник в 3-х томах/Под ред. А. И. Биргера. М.: Машиностроение, 1968.
14. В. В. Болотин. ПММ, 1960, 24, 5.
15. Н. П. Мельников, В. И. Малый, С. В. Базилевский. Тр. ЦНИИПроектстальконструкция. М., 1980.

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ УДАРНОГО СЖАТИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВВ

Ю. М. Ковалев

(Томск)

В настоящее время в литературе имеются экспериментальные данные по ударным адиабатам ряда ВВ [1, 2], получен вид универсальной ударной адиабаты [3], предложено несколько уравнений состояния для конкретных ВВ [4, 5]. Теоретическое определение зависимостей, характеризующих поведение твердых ВВ, осложняется тем, что они относятся к молекулярным кристаллам и обладают большим числом внутренних степеней свободы. При построении уравнений состояния и расчете температур ударного сжатия ВВ в [3] использована модель молекулярного кристалла, подробно описанная в [6], где выделяется три степени свободы на молекулу, зависящие от объема. Оправданность такого расщепления сомнительна, так как для описания поведения молекулы требуются три координаты центра тяжести и три угла Эйлера. Все эти координаты существенно зависят от пространственного расположения окружающих молекул в кристалле, т. е. от объема.

В [7] уравнения состояния строятся на основе модели молекулярного кристалла с выделением шести степеней свободы на молекулу, зависящих от объема, и указывается на возможность деформации молекулы при наличии кристаллического поля. Следовательно, необходимо учитывать зависимость не только частот нормальных колебаний молекулы как целого от объема, но и изменение частот «деформационных» колебаний, например колебания нитрогрупп.

В данной работе предложен метод построения уравнений состояния, учитывающий сложную внутреннюю структуру ВВ. Термодинамические свойства вещества полностью определяются, если известен один из термодинамических потенциалов. Удобно исходить из определения свободной энергии Гельмгольца $F(v, T)$, которая наиболее простым образом связана с моделью строения вещества

$$F = u + kT \sum_{\alpha} \ln [1 - \exp(-h\omega_{\alpha}/kT)]. \quad (1)$$

Здесь u — энергия взаимодействия между атомами; v — удельный объем; T — температура тела; k — постоянная Больцмана; h — постоянная Планка; ω_{α} — частоты нормальных колебаний, причем суммирование производится по всем частотам.

Известно, что энергия взаимодействия между атомами внутри молекулы u_m существенно больше энергии взаимодействия между атомами разных молекул, поэтому имеет смысл разделить энергию на молекулярную u_m и кристаллическую u_k . Учитывая, что частоты нормальных колебаний внутри молекулы на порядок больше частот нормальных колебаний молекулы как целого и «деформационных», необходимо ввести две характеристические температуры и разделить колебательную составляющую свободной энергии на низкочастотную и высокочастотную.

Предполагая возможность использования для низкочастотной составляющей свободной энергии приближения Дебая, а для высокочастотной приближения Эйнштейна, перепишем выражение (1) в виде

$$F = u_k + u_m + 3MRT \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \xi^2 \ln [1 - \exp(-\xi)] d\xi + \\ + (3N - M) RT \ln \left[1 - \exp\left(-\frac{\Theta_E}{T}\right)\right], \quad (2)$$

где R — газовая постоянная; M — число низкочастотных колебаний; N — число атомов в молекуле ВВ; $3N - M$ — число высокочастотных колебаний; $\Theta_D = h\omega_D/k$ — характеристическая температура Дебая; $\Theta_E = h\omega_E/k$ — характеристическая температура Эйнштейна.

Используя (2), легко получить выражение для внутренней энергии E , теплоемкости при постоянном объеме c_v и давления p

$$E = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = u_m + u_k + MRTD(x_D) + (3N - M) RT \frac{x_E}{\exp(x_E) - 1}, \quad (3)$$

$$x_D = \Theta_D/T, \quad x_E = \Theta_E/T, \quad (4)$$

$$c_v = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_V = MR \left(4D(x_D) - \frac{x_D}{3(\exp(x_D) - 1)}\right) + \\ + (3N - M) R x_E^2 \frac{\exp(x_E)}{\exp(x_E) - 1}, \quad (5)$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial v}\right)_T = -\frac{du_m}{dv} - \frac{du_k}{dv} - MRT \frac{D(x_D)}{v} \frac{d \ln \Theta_D}{d \ln v} - \\ - (3N - M) RT \frac{x_E}{v(\exp(x_E) - 1)} \frac{d \ln \Theta_E}{d \ln v}. \quad (6)$$

Для функции Дебая можно использовать высокотемпературное приближение

$$D(x_D) = 1 - \frac{3}{8} x_D + \frac{1}{20} x_D^2, \quad (7)$$

так как характеристическая температура Θ_D для молекулярных кристаллов менее 300 К.

Следуя определению коэффициента Грюнайзена, выражение (6) перепишем в виде

$$p = -\frac{du_m}{dv} - \frac{du_k}{dv} + \bar{M} \bar{R} \bar{T} \gamma_D(v) \frac{D(x_D)}{v}; \quad \gamma_D(v) = -\frac{d \ln \Theta_D}{d \ln v}. \quad (8)$$

Последний член в выражении (6) равен нулю, так как при разделении частот сделано предположение о независимости высоких частот от объема.

Чтобы воспользоваться уравнениями состояния (3) и (8), необходимо определить вид зависимостей $u_k(v)$, $u_m(v)$, $\gamma_D(v)$, $\Theta_D(v)$. В полуэмпирических моделях для описания энергии взаимодействия двух атомов часто используют потенциал Леннарда — Джонса

$$\varphi(r) = -A/r^6 + B/r^{12}, \quad (9)$$

где r — расстояние между атомами. Параметры A и B не имеют определенного физического смысла, но могут быть выражены через равновесное расстояние r_0 и глубину потенциальной ямы ϵ_0 . Следовательно, выражение (9) может быть переписано в виде

$$\varphi(r) = \epsilon_0 [(r_0/r)^{12} - 2(r_0/r)^6].$$

В дальнейшем это выражение будет использоваться для описания упругих свойств кристаллов ВВ. Полагая величину ϵ_0 равной теплоте сублимации u_0 , а $r/r_0 = (\rho_0^0/\rho^0)^{1/3}$, получим

$$u_k = u_0 (x^{-4} - 2x^{-2}), \quad x = \rho_0^0/\rho^0, \quad (10)$$

где ρ^0 — плотность ВВ. В силу того, что упругие составляющие внутренней энергии и давления связаны соотношением

$$p_y = p_{y.k} + p_{y.m} = -du_k/dv - du_m/dv,$$

из (10) получим выражение для кристаллической составляющей давления

$$p_{y.k} = u_0 \rho_0^0 (4x^{-5} - 4x^{-3}). \quad (11)$$

Величина u_0 может быть вычислена [8] или взята из эксперимента. Составляющую давления, связанную с изменением u_m , полагаем равной постоянной величине p_0 , которая вычисляется из условия равенства нулю давления при нормальных условиях. Предположение о постоянстве величины p_0 дает возможность представить энергию в виде

$$u_m = u_m^0 - p_0 (v_0 - v), \quad (12)$$

где v_0 — начальный удельный объем ВВ; u_m^0 — величина начальной внутримолекулярной энергии, которая определяется из условия равенства нулю внутренней энергии при нормальных условиях.

С уменьшением удельного объема v значение коэффициента Грюнайзена уменьшается. Согласно [9], закон изменения коэффициента Грюнайзена имеет вид

$$\gamma_D(v) v^{-1} = \gamma_D(v_0) v_0^{-1}. \quad (13)$$

Из соотношений (8) и (13) следует зависимость характеристической температуры Дебая от удельного объема

$$\Theta_D = \Theta_D^0 \exp \left[\gamma_D(v_0) \left(1 - \frac{v}{v_0} \right) \right], \quad (14)$$

где Θ_D^0 — характеристическая температура Дебая при нормальных условиях. Получим далее аналог уравнения Грюнайзена для молекулярных кристаллов. Для этого перепишем соотношение (2), используя функцию Дебая

$$F = u_k - u_m + MRT \left\{ \ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_D}{T} \right) \right] - \frac{1}{3} D \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \right\} + \\ + (3N - M) RT \ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_E}{T} \right) \right], \quad (15)$$

и раскроем выражение для отношения коэффициента теплового расширения α к модулю объемного сжатия κ [10]

$$\frac{\alpha}{\kappa} = - \left[\frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) \right]_T.$$

Подставляя в это равенство выражение (15) и дифференцируя последовательно по T и v , получим

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{\kappa} &= -\frac{\partial}{\partial v} \left\{ MR \left(\ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\Theta_D}{T} \right) \right] - \frac{1}{3} D \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \right) \right\} + \\ &+ MRT \left[\frac{1}{\exp \left(-\frac{\Theta_D}{T} \right) - 1} - \frac{1}{3} D' \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \right] \cdot \frac{\partial \frac{\Theta_D}{T}}{\partial T} = \\ &= \gamma_D(v) \frac{MR}{v} \left[4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь использовано свойство функции Дебая

$$D(x) = \frac{x}{\exp(x) - 1} - \frac{x}{3} D'(x),$$

где штрих обозначает дифференцирование по x .

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} c_{VD} &= MR \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right), \\ c_{VM} &= (3N - M) R x_E^2 \frac{\exp(x_E)}{\exp(x_E) - 1}. \end{aligned}$$

Тогда выражение (16) запишется в виде

$$\alpha/\kappa = \gamma_D(v_0) \cdot c_{VD}/v. \quad (17)$$

В дальнейшем необходимо определить величины Θ_D , Θ_E , M , $\gamma_D(v_0)$. Покажем, что для этого достаточно знать экспериментальные скорости звука c_0 , коэффициент объемного расширения α , теплоемкость c_V и энергию решетки u_0 при нормальных условиях. По определению

$$c_0^2 = \left(\frac{dp}{d\rho^0} \right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho^0} \right)_E + \left(\frac{\partial p}{\partial E} \right) \frac{p}{\rho^0} = \gamma_D^2(v_0) MRT_0 D(x_D) + \frac{dp_{y.k.}}{d\rho^0}, \quad (18)$$

$$\frac{1}{\kappa} = -v \left(\frac{dp}{dv} \right)_T = \rho_0^0 \frac{dp_{y.k.}}{d\rho^0} + \gamma_D^2(v_0) \rho_0^0 T_0 MR x_D D'(x_D) = \rho_0^0 (c_0^2 - \gamma_D^2(v_0) T_0 c_{VD}).$$

Подставляя эти выражения в (17), получим

$$c_{VD} = \frac{\alpha c_0^2}{\gamma_D(v_0) (1 - \alpha \gamma_D(v_0) T_0)}. \quad (19)$$

В силу того, что величина x_D изменяется от 0 до 1, а функция теплоемкости Дебая от 0,951732 до 0,999875, количество «деформационных» колебаний M определяется из (19) следующим образом:

$$M = \left[\frac{\alpha c_0^2}{R \gamma_D(v_0) [1 - \alpha \gamma_D(v_0) T_0]} \right] + 1. \quad (20)$$

Здесь квадратные скобки обозначают целую часть числа, величина Θ_D^0 вычисляется из уравнения

$$4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} = \frac{\alpha c_0^2}{\gamma_D(v_0) MR (1 + \alpha \gamma_D(v_0) T_0)}, \quad (21)$$

а Θ_E — из уравнения

$$(3N - M) R x_E^2 \frac{\exp(x_E)}{\exp(x_E) - 1} = c_V - c_{VD}. \quad (22)$$

Из (20)–(22) видно, что величины M , Θ_D^0 , Θ_E определяются, если дополнительно задано значение коэффициента Грюнайзена $\gamma_D(v_0)$. Следовательно, для нахождения начальных параметров уравнений состояния

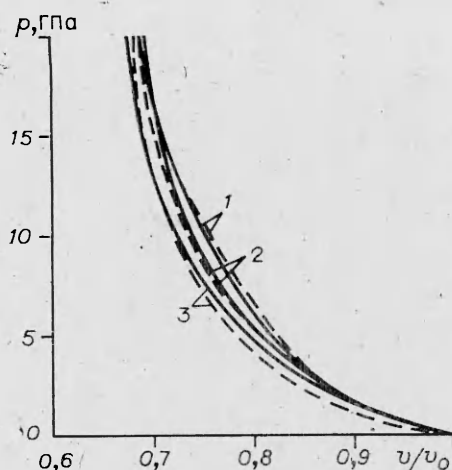


Рис. 1. Ударные адиабаты кристаллических ВВ (штриховой линией изображены экспериментальные данные, экстраполированные до нуля вдоль кривой $D = a + bu$).

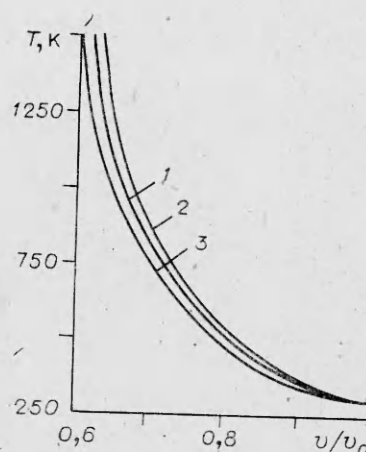


Рис. 2. Зависимость температуры ударного сжатия ВВ от удельного объема.

необходимо, используя (20)–(22), решить (18), которое при нормальных условиях принимает вид

$$c_0^2 = \gamma_D^2(v_0) MRT_0 D(x_D) + 8u_0.$$

Если же нет возможности вычислить энергию решетки, то $\gamma_D(v_0)$ выбирается из условия совпадения теоретической и экспериментальной ударной адиабат в интервале давлений от 1 до 10 ГПа. Этот уровень давлений ниже критического, способного вызвать детонацию гомогенного ВВ. Для давления и внутренней энергии получаем окончательные выражения

$$p = \gamma_D(v_0) \rho_0^0 MRT D(x_D) + p_{y.k} - p_0,$$

$$E = u_{y.k} + u_m + MRT D(x_D) + (3N - M) RT \frac{x_E}{\exp(x_E) - 1}.$$

В таблице приведены параметры уравнений состояния некоторых кристаллических ВВ. Параметры для тэна и тетрила подбирались из условия совпадения теоретической

$$p = \frac{p_{y.k} - p_0}{\gamma(v_0) \rho_0^0} - (u_{y.k} - E_T - u_m) \frac{1}{\gamma(v_0) \rho_0^0 - 0,5(v_0 - v)},$$

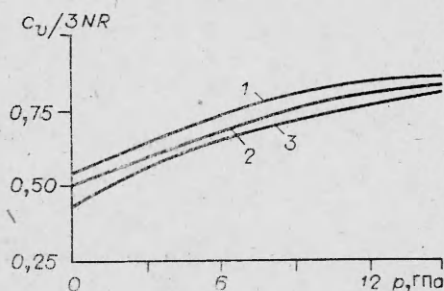
$$E_T = MRT D(x_D) + (3N - M) RT \frac{x_E}{\exp(x_E) - 1},$$

$$u_m = u_m^0 - p_0(v_0 - v)$$

и экспериментальной [1, 2] ударных адиабат в диапазоне от нуля до 8 ГПа. Значения теплоемкостей взяты из работ [12, 13]. На рис. 1–3 приведены теоретические ударные адиабаты, зависимости температуры от удельного объема и теплоемкости от давления (1 — гексоген, 2 — тэн, 3 — тетрил).

ВВ	$u \cdot 10^{-5}$, Дж/кг	$\gamma(v_0)$	M	θ_D , К	θ_E , К	c_0 , м/с
Гексоген	6,6917	2,85	24	207	1283	2650
Тэн	6,3017	2,3	40	199	1800	2520
Тетрил	5,8258	1,55	33	189	1800	2280

Рис. 3. Зависимость теплоемкости $c_v/3NR$ от давления.



Из анализа полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1) экспериментальные и теоретические ударные адиабаты хорошо согласуются вплоть до давлений, инициирующих детонацию;

2) температура ударного сжатия с точностью до 5% совпадает с величиной температуры, вычисленной по задержке адиабатического взрыва [11].

В заключение автор выражает благодарность А. М. Гришину за полезные обсуждения работы.

Поступила в редакцию 18/XII 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Илюхин, П. Ф. Похил, О. К. Розанов и др. Докл. АН СССР, 1960, 131, 4.
2. А. Н. Дремин, К. К. Шведов, О. С. Авдонин. ФГВ, 1970, 6, 4.
3. И. М. Воскобойников, А. Н. Афанасенков, В. М. Богомолов. ФГВ, 1967, 3, 4.
4. Т. Н. Фортова, К. Г. Шкадинский, А. Н. Дремин и др. ФГВ, 1977, 13, 1.
5. Н. Х. Ахмадеев. ФГВ, 1981, 17, 1.
6. Цянь Сюэ-сен. Физическая механика. М.: Мир, 1965.
7. А. И. Китайгородский. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1974.
8. Ю. М. Ковалев, В. А. Шляпочников. Изв. АН СССР. Сер. хим., 1979, 11.
9. J. M. Walsh, R. H. Christian. Phys. Rev., 1955, 97, 6.
10. Л. Жирифалько. Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1975.
11. А. Ф. Баум, Л. П. Орленко и др. Физика взрыва /Под ред. К. П. Станюковича. М.: Наука, 1975.
12. Е. Ю. Орлова. Химия и технология бризантных взрывчатых веществ. М.: Оборонгиз, 1960.
13. Ф. Боуден, И. Иоффе. Быстрые реакции в твердых взрывчатых веществах. М.: ИЛ, 1962.

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ПЕРЕДАЧИ ГАЗОВОЙ ДЕТОНАЦИИ ЧЕРЕЗ ПЛЕНКИ ЖИДКОСТИ

В. А. Субботин, С. П. Усольцев
(Новосибирск)

Детонационные процессы в водных пенах, образованных взрывчатыми газовыми смесями, исследовались в работах [1, 2], где установлено, что в пене при относительно высоких концентрациях жидкости наблюдаются стационарные детонационные волны, скорость которых близка к скорости газовой детонации.

В [1] опыты проводили в трубе диаметром 28 мм с пеной, пузырьки которой содержали стехиометрическую пропан-кислородную смесь. Детонационный процесс наблюдался в том случае, когда диаметр большинства пузырьков был больше 3—4 мм, при этом массовая концентрация жидкой фазы доходила до 17 кг/м³.

В [2] исследовали параметры детонационных волн в водных пенах, образованных пропан- и метан-кислородными смесями стехиометрического состава. Применяли трубы диаметром 50 и 80 мм, детонацию инициировали электродетонатором. Детонация возникала в пенах с размером пузырьков от 1—2 до 5—6 мм и концентрацией жидкости от 1 до 8 кг/м³.

Незначительное снижение скорости детонации в двухфазной среде, в которой массовая концентрация жидкой фазы на порядок больше