

УДК 534.222.2

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ
ПРОДУКТОВ ДЕТОНАЦИИ ГЕКСОГЕНА

Н. М. Кузнецов, К. К. Шведов
(Москва)

Уравнение состояния продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ исследовалось в ряде работ [1—3, 4—6], в каждой из которых в той или иной мере использовались как теоретические представления о термодинамических свойствах вещества, так и экспериментальные данные. Достаточно точный прямой теоретический расчет термодинамических функций даже при известных потенциалах парного взаимодействия молекул в общем случае невозможен вследствие трудностей вычисления статистических сумм и неаддитивности потенциалов взаимодействия. По этой причине наиболее надежным путем вычисления термодинамических функций продуктов детонации конденсированных взрывчатых веществ следует считать путь максимального использования данных эксперимента.

В работе [4] исследовалось уравнение состояния продуктов детонации на основе данных о зависимости скорости распространения детонационной волны D , массовой скорости U в точке Жуге и теплоты взрыва Q от начальной плотности заряда ρ_1 . Одновременное использование всех этих данных вместе с условием Жуге позволяет найти связь между давлением p , энергией E и плотностью ρ , если на линии точек Жуге¹ тепловые составляющие давления и энергии линейно зависят от температуры:

$$p = p_0 + \rho f(\rho) RT/\mu, \quad (1)$$

$$E = E_0 + \Delta + c_v T/\mu. \quad (2)$$

Здесь: T — температура; R — газовая постоянная; μ — молекулярный вес; p_0 и $E_0 \equiv \int_0^{\rho} (p_0/\rho^2) d\rho$ — зависящие только от плотности «упругие» составляющие давления и энергии; c_v — молярная теплоемкость при постоянном объеме; $\Delta \equiv \int_0^T (c_v/\mu) dT - c_v T/\mu \approx \text{const.}$ (Постоянство Δ в некотором интервале температур означает, что в этом интервале температур c_v не изменяется. Если c_v постоянно при температурах от 0 до T , то $\Delta=0$.)

¹ Каждая точка отвечает определенной плотности заряда.

В уравнении

$$p - p_0 = (E - E_0 - \Delta) \gamma \rho; \quad \gamma = Rf/C_v, \quad (3)$$

полученном из (1) и (2) после исключения T , неизвестные функции плотности p_0 и γ могут быть вычислены по экспериментальным зависимостям D , U и Q от ρ_1 .

Численные расчеты в работе [4] были выполнены по данным [7, 8] для гексогена. Однако диапазон и точность имеющихся экспериментальных данных о D и U были недостаточными и не позволяли провести надежную экстраполяцию уравнения состояния в интересную для газодинамических приложений область малых плотностей. В связи с этим в настоящей работе были измерены параметры детонационной волны в опытах с зарядами малой плотности ($\rho_1 < 1$)¹. Кроме того, удалось значительно уточнить D и U при больших ρ_1 . Часть новых данных получена в [9].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ ГЕКСОГЕНА

В работе определялись два параметра — D и U , зная которые, легко получить остальные кинематические параметры Жуге. Для определения U использовался предложенный Завойским электромагнитный метод [10, 11]. Этот метод позволяет значительно расширить диапазон экспериментальных исследований в сторону малых плотностей заряжания, где

на результат определения параметров откольным методом может оказывать существенное влияние отраженная от пластины ударная волна [12]. В большинстве экспериментов, особенно при малых плотностях заряжания, D и U определялись одновременно в одном опыте, что дает возможность избежать ошибок за счет разброса в значениях плотности от опыта к опыту (см. таблицу). Эксперименты проводились на зарядах диаметром

ρ , $\text{г}/\text{см}^3$	D , $\text{км}/\text{сек}$	U_2 , $\text{км}/\text{сек}$	p_2 , тыс. атм	ρ_2 , $\text{г}/\text{см}^3$
1,72	8,46	2,12	308,5	2,29
1,60	8,13	2,00	260,0	2,12
1,46	7,60	1,88	208,0	1,92
1,29	7,00	1,82	164,0	1,74
1,10	6,18	1,76	120,0	1,54
1,07	6,26	1,73	116,0	1,48
0,95	5,80	1,72	94,6	1,35
0,70	4,65	1,45	47,2	1,02
0,56	4,05	1,39	31,6	0,85

Примечание. Индекс 2 относится к значениям параметров в точке Жуге.

40 мм, длиной не менее трех диаметров. Заряды малой плотности готовились в тонких картонных оболочках. Во всех опытах применялся мощный инициатор. В таблице приведены средние значения величин из трех-четырех опытов. Разброс в значениях U_2 не превосходил 3% при $\rho_1 > 1,1$ и составлял 3—4% при меньших плотностях заряжания. Точность определения D составляет 1% при $\rho_1 > 1,1$ и 2% — при $\rho_1 < 1,1$. По этим данным и зависимости $Q = Q(\rho_1)$ из [8] были построены зависимости $p_2(\rho_2)$ и $E_2(\rho_2) = 0,5 U^2 + Q$.

¹ Здесь и в дальнейшем во всех численных соотношениях плотность выражена в $\text{г}/\text{см}^3$ и температура в $^\circ\text{К}$.

ФУНКЦИИ ρ_0 И γ ПРИ БОЛЬШИХ СЖАТИЯХ

При известной для точек Жуге зависимости давления p_2 , энергии E_2 и γ от плотности «упругая» составляющая давления определяется интегралом

$$p_0 = p_2 - \rho \gamma \exp \left(\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{\gamma}{\rho} d\rho \right) \left[\int_{\rho_0}^{\rho} \exp \left(- \int_{\rho_0}^{\rho'} \frac{\gamma}{\rho} d\rho' \right) \left(\frac{dE_2}{d\rho} - \frac{p_2}{\rho^2} \right) d\rho' + c_1 \right]. \quad (4)$$

В качестве нижнего предела интегрирования в (4) выбрана плотность ρ_0 в точке минимума потенциала межмолекулярного взаимодействия, где $p_0=0$. Постоянная интегрирования c_1 , следовательно, равна значению $p_2/(\rho\gamma)$ в точке ρ_0 . Плотность ρ_0 продуктов детонации гексогена вычислена в [4] и равна 0,82.

Функция γ (коэффициент Грюнайзена) при линейной зависимости p и E от T следующим образом [4] связана с давлением, скоростью звука c и производными давления и энергии по плотности вдоль линии точек Жуге:

$$\gamma = \frac{(dp_2/d\rho) - c^2}{\rho (dE_2/d\rho) - p_2/\rho}. \quad (5)$$

Однако при $\rho_2 < 1,7$ вычисление γ по формуле (5) не приводит к надежным результатам, так как при таких плотностях разности в числителе и знаменателе (5) много меньше каждого из слагаемых. Поэтому небольшая погрешность в измерении скоростей D и U приводит к значительному изменению γ .

При $\rho_2 < 1$ коэффициент γ можно вычислить иным путем, используя данные эксперимента и теории реальных газов. Лишь после определения γ при $\rho_2 > 1,7$ по формуле (5), и уравнения состояния при $\rho < 1$ оказывается возможным найти γ с удовлетворительной точностью во всем необходимом для интегрирования (4) диапазоне плотностей.

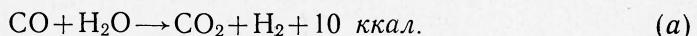
УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТ γ В ОБЛАСТИ $\rho < 1$

Анализ $p = p(T)$ -данных, относящихся к плотным газам при высоких температурах, при которых энергия теплового движения молекул E_T больше энергии сублимации ϵ , показывает, что в формуле (1) функция f , являющаяся в случае реального газа функцией двух переменных, зависит от температуры значительно слабее, чем от плотности. Это объясняется тем, что при $E_T > \epsilon$ межмолекулярное взаимодействие практически сводится к короткодействующим силам отталкивания, для которых и характерна слабая температурная зависимость f . (В предельном случае короткодействующих сил, описываемом моделью твердых сфер, c_v зависит только от плотности.) По этим же причинам в силу термодинамического соотношения

$$c_v = c_v^* + T \int \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_p \frac{d\rho}{\rho^2}. \quad (6)$$

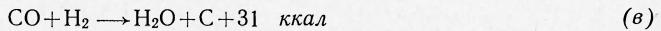
Теплоемкость c_v близка к теплоемкости идеального газа c_v^* . Эти качественные соображения о функциях f и c_v относятся к газу с постоянным составом. Таким газом в достаточно хорошем приближении являются и продукты детонации гексогена в области термодинамических парамет-

ров, соответствующих изэнтропическому расширению из точек Жуге. В этой области температуры еще недостаточно велики (или плотности недостаточно малы) для того, чтобы в газообразных продуктах взрыва происходили энергоемкие и заметно меняющие молекулярный вес процессы диссоциации. В охлаждающихся продуктах детонации идет реакция



Теплота полного сгорания окиси углерода по этой реакции равна 2 ккал/моль газовой смеси. (Согласно [8], в точке Жуге при плотности заряда 1,1 содержание окиси углерода составляет около 22,6% по объему. Предполагается [8], что газ в калориметрической бомбе мало отличается по химическому составу от газа в точке Жуге.) Учет этой величины, не превышающей 4% от $0,5 U_2^2 + Q$ не может привести к существенному изменению уравнения состояния.

Окись углерода может вступать еще в реакции:



с образованием конденсированного углерода [13]. В случае термодинамически равновесного состава расширяющихся продуктов взрыва реакция (б) приводит к тепловому эффекту, который вдвое больше, чем в реакции (в). Однако в расширяющихся продуктах взрыва равновесие процессов (в) и (б) обычно нарушено, вследствие чего тепловой эффект оказывается намного меньшим. Дело в том, что реакции (б) и (в) протекают в газовой фазе с образованием газообразного атомарного углерода в качестве промежуточного продукта и имеют большие энергии активации, равные соответственно для (б) и (в) 130 и 140 ккал. Конденсированный углерод, которого в точке Жуге при плотности 1,4, по-видимому, практически нет [8], может образоваться в процессе адиабатического охлаждения расширяющегося газа. Но скорости реакций с активацационным барьером ~ 130 ккал/моль уже при температурах 4000–3000°К очень малы. Например, при температуре 3000°К и плотности 0,1 г/см³ характерное время реакции $\text{CO} + \text{CO} + 130 \text{ ккал} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{C}$ (газ) по порядку величины составляет $10^{-8} \exp(130000/RT)$ сек $\sim 0,1$ сек. Обычно расширяющиеся продукты взрыва производят основную работу за меньшее время, поэтому тепловыделением за счет реакций (б) и (в) можно пренебречь.

Слабую температурную зависимость функции f и $c_v - c_v^*$ учтем приближенно, предполагая $V \sim r^{-n}$, где V — потенциал сил отталкивания; r — расстояние между молекулами, $n \sim 9 \div 12$. (Такой вид имеет, например, потенциал сил отталкивания в модели Леннарда — Джонса.) В этом приближении [14]

$$f(\rho/\mu, T) = f(\tau), \quad (7)$$

где

$$\tau \sim (\rho/\mu) (T_1/T)^{3/n}.$$

Неизвестную пока функцию $f(\tau)$ определим по имеющимся высокотемпературным экспериментальным $\rho - \rho - T$ -данным. В качестве T_1 можно взять любую достаточно высокую температуру¹, к которой относятся $\rho - \rho - T$ -измерения, причем вследствие слабой зависимости f от T для определения $f\left(\frac{\rho}{\mu}, T_1\right)$ можно использовать данные, относящиеся не только к изотерме $T = T_1$, но и к другим изотермам, с температурами, от-

¹ Функция f определяется в основном силами отталкивания при достаточно высоких температурах, в несколько раз превышающих критическую температуру газа.

личающимися от T_1 , например, на множитель 1,3 (рис. 1). Как видно из рис. 1, функция f при $T \approx 1000^\circ\text{K}$ с погрешностью $\sim 10\%$ может быть представлена как общая для всех рассмотренных газов, исключая водород¹, функция ρ/μ . Этот результат является следствием короткодействия сил отталкивания и того, что все сравнительно простые молекулы имеют близкие по величине эффективные диаметры столкновения. Газы H_2O , N_2 , CO_2 и H_2 составляют $\sim 78\%$ по объему всех продуктов детонации гексогена. Остальная доля приходится на окись углерода. Высокотемпературных $\rho - \rho - T$ -данных для нее найти не удалось. Однако вследствие сходства молекул CO и N_2 (двухатомные молекулы с одинаковым числом электронов, составленные из элементов с соседними атомными номерами) есть все основания полагать, что значения f окиси углерода и молекулярного азота при одинаковых τ близки. Таким образом, для вычисления функции f продуктов детонации гексогена достаточно использовать данные, относящиеся к любой из компонент. Воспользуемся для этой цели функцией f водяного пара, найденной ранее [14] путем обработки экспериментальных данных [15] и имеющей при $\tau^2 \ll 1$ вид

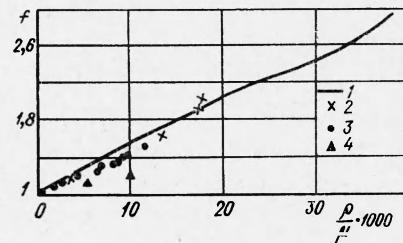


Рис. 1. Температурная зависимость f в окрестности изотермы $T_1 = 1000^\circ\text{K}$ для:

1 — H_2O [15]; 2 — N_2 [16]; 3 — CO_2 [17];
4 — H_2 [18] при температурах $500\text{--}700^\circ\text{K}$.

Учитывая (7) и пренебрегая при $\rho < 1$ относительно слабыми силами притяжения, уравнение состояния продуктов детонации гексогена можно представить в виде.

$$f = 1 + 3,5 \tau, \\ \tau = (18 \rho/\mu) (T^*)^{-3/n}; \quad T^* \equiv T/1000. \quad (8)$$

Учитывая (7) и пренебрегая при $\rho < 1$ относительно слабыми силами притяжения, уравнение состояния продуктов детонации гексогена можно представить в виде.

$$p = (R/\mu) f(\tau) \rho T, \quad (9)$$

где f определено формулами (8). Значение n , находящееся обычно в интервале 9—12, примем, как и в случае водяного пара [14], равным 10. В практически интересной области изменения температур погрешность $\Delta n \sim 1\text{--}2$ не приводит к существенному изменению f . Молекулярный вес продуктов детонации гексогена, состоящих при плотности заряда 1,1, согласно [8], из 33,78% N_2 , 23,97% H_2O , 22,64% CO , 10,47% CO_2 , 8,46% H_2 и 0,68% CH_4 по объему, равен 25. Пренебрегая слабой зависимостью молекулярного веса от термодинамического состояния адиабатически расширяющихся продуктов детонации зарядов различной плотности, можно с хорошей точностью принять $\mu = \text{const} = 25$.

Подставляя в (9) численные значения μ и n , получим

$$p = 3,33 \rho T^* (1 + 3,5 \tau) \text{ кбар}, \\ \tau = 0,72 \rho (T^*)^{-0,3}, \quad \tau^2 \ll 1. \quad (10)$$

¹ Соответствующая погрешность в случае H_2 примерно вдвое больше. Однако это не существенно, так как содержание H_2 в продуктах взрыва составляет по объему менее 10%.

Найдем с помощью (10) значения температуры и f в точке Жуге при плотности ρ_0 . Трансцендентное уравнение (10) при заданных ρ и ρ можно разрешать относительно T итерациями, которые быстро сходятся. Задаваясь значением $T=5000^\circ\text{K}$ при $\rho=\rho_0=0,82$, найдем

$$\tau=0,364$$

и далее из (8)

$$f=2,27.$$

Согласно экспериментальным данным, при $\rho_2=\rho_0$ в точке Жуге $p_2 \approx 30 \text{ кбар}$. Подставляя значения p_2 , f и ρ в уравнение (10), найдем $T=4900^\circ\text{K}$.

Вычислим далее теплоемкость c_v продуктов взрыва при $\rho < 1$. Связь между энергией и давлением в случае степенного потенциала взаимодействия имеет вид [19]:

$$E - \frac{3\rho}{n\rho} = \frac{3R T}{\mu} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n} \right) + \chi(T), \quad (11)$$

здесь $\chi(T)$ — энергия, приходящаяся на колебательные и вращательные степени свободы, $n \approx 10$.

Из (11) следует, что «избыточная» по отношению к энергии идеального газа того же состава энергия δE равна $0,3RT(f-1)$, соответственно избыточная теплоемкость [14] на 1 моль

$$\delta c_v \approx 0,3R(f-1)$$

(производной $\partial f / \partial T$ можно пренебречь), что в точке ρ_0 при $T \approx 5000^\circ\text{K}$ дает

$$\delta c_v = 0,38R.$$

Энергия и теплоемкость, приходящиеся на поступательные, вращательные и колебательные степени свободы идеальной газовой смеси, вычисляются по известным формулам статистической физики. Результат вычисления энергии и теплоемкости по этим формулам, имеющим весьма громоздкий вид, удобно представить интерполяционными выражениями:

$$\frac{3}{2}RT + \chi(T) \equiv \int_0^T c_v^* dT = \frac{1,76RT^\theta}{\exp \theta - 1} + 2,624RT, \quad (12)$$

$$c_v^* = \frac{1,76R\theta^2 \exp \theta}{(\exp \theta - 1)^2} + 2,624R, \quad (13)$$

где $\theta = 3200/T$.

Величины колебательных квантов молекул N_2 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 и CH_4 , использованные при вычислении теплоемкости и энергии колебаний, приведены в [20].

Используя найденные значения тепловой энергии и теплоемкости в точке Жуге при плотности ρ_0 , приведем нужное в дальнейшем соотношение

$$\Delta \approx \int_0^T (c_v^*/\mu) dT - c_v^* T/\mu = -0,74 \text{ кДж/г}. \quad (14)$$

Величины δE и δc_v при $f \leq 2$ составляют менее 0,1 от энергии и теплоемкости газа. При уменьшении τ избыточная теплоемкость вместе с $(f - 1)$ стремится к нулю.

С помощью вычисленных величин f и c_v находим в точке Жуге при плотности ρ_0

$$\gamma = \frac{f}{4,38 + 0,3(f - 1)} = 0,47. \quad (15)$$

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ γ, p_0 И E_0 ПРИ БОЛЬШИХ ρ

«Упругое» давление p_0 при плотности, большей ρ_0 , может быть найдено путем интегрирования (4), если известна зависимость $\gamma(\rho_2)$. Как уже отмечалось, по экспериментальным данным $p_2(\rho_2)$ и $E_2(\rho_2)$ и по формуле (4) достаточно надежные значения γ можно вычислить только при $\rho_2 > 1,7$. Для интегрирования (4) в этой области плотностей экспериментальные результаты удобно представить интерполяционными формулами:

$$p_2 = 13,9\rho_2 + \frac{35\rho_2^3 + 1,5\rho_2^2}{1 + 0,1\rho_2^2}, \quad (16)$$

$$E_2 = 5,54 + 0,8\rho_2 + 0,24\rho_2^2 \text{ кдж/г.} \quad (17)$$

Они воспроизводят экспериментальные данные с погрешностью менее 3%.

Результаты вычисления γ по формулам (5) и экспериментальным данным таблицы вместе с найденным в предыдущем параграфе значением $\gamma = 0,47$ изображены на рис. 2, 1. Интересно, что в пределах разброса результатов измерений коэффициент γ при больших плотностях в точках Жуге слабо зависит от плотности и близок к единице.

Область неизвестных значений γ можно несколько уменьшить, используя результат (15), данные таблицы и учитывая, что в окрестности точки ρ_0 , например, при $\rho_0 < \rho_2 < 1,2$, «упругая» составляющая давления мала, так как $p_0(\rho_0) = 0$. Для определения γ в окрестности точки ρ_0 вычислим входящую в (2) составляющую энергии $E_0(\rho_0)$. Подстановка в (3) численных значений $p/\rho = 3,7 \text{ кдж/г}$, $E = -6,4 \text{ кдж/г}$ и $\gamma = 0,47$ в точке Жуге при $\rho = \rho_0$ дает $\Delta + E_0 \approx 1,4 \text{ кдж/г}$. Согласно (14), $\Delta = -0,74 \text{ кдж/г}$ и, следовательно,

$$E_0(\rho_0) = -0,66 \text{ кдж/г.} \quad (18)$$

Используя этот результат вместе с данными таблицы 1 и полагая $\rho_0 = 0$, $E_0 = E_0(\rho_0)$, находим из (3) в первом приближении функцию γ в интервале плотностей $0,82 \div 1,2$ (см. рис. 2, 1). Истинные значения γ в этом интервале плотностей мало отличаются от результатов первого приближения в силу малости ρ_0 и $E_0 - E_0(\rho_0)$.

Для определения γ при $1,2 < \rho_2 < 1,8$, где γ меняется от 0,66 до 1, в первом приближении воспользуемся линейной интерполяцией (рис. 2, 2)

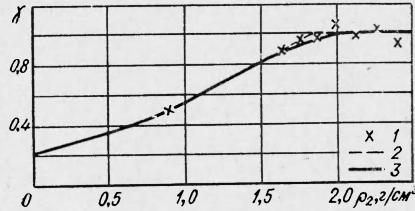


Рис. 2. Зависимость γ от плотности.

и вычислим $p_2 - p_0$, интегрируя (4). Относительная погрешность вычисления $p_2 - p_0$ одного порядка со средней относительной погрешностью γ в диапазоне интегрирования от ρ_0 до ρ . Такой же порядок величины имеет погрешность p_0 при больших плотностях $\rho > 1,8$, где ρ_0 составляет значительную часть полного давления. При меньших плотностях малая разность двух больших чисел p_2 и $(p_2 - p_0)$ очень чувствительна к погрешности γ и в первом приближении оказывается недостаточно гладкой функцией плотности. Точки ложатся с разбросом около плавной кривой, которую с точностью, достаточной для практических приложений, можно принять в качестве искомого второго приближения. Это приближение отличается от первого лишь при $\rho_0 \ll \rho$, т. е. там, где ρ_0 не играет существенной роли для практического использования искомого уравнения состояния. Кривая второго приближения описывается интерполяционной формулой

$$p_0 = 15,4 \rho^2 (\rho - \rho_0) \approx (15,4 \rho^3 - 12,6 \rho^2) \text{ кбар.} \quad (19)$$

Интегрируя p_0/ρ^2 , находим

$$E_0 \approx (0,77 \rho^2 - 1,26 \rho) \text{ кдж/г.} \quad (20)$$

Полученные для $\rho \geq \rho_0$ выражения (19), (20) в качественном отношении правильно описывают «упругие» составляющие давления и энергии и при $\rho < \rho_0$ (малые отрицательные p_0 и E_0 , отвечающие силам притяжения типа Ван-дер-Ваальса). В частности, из (20) следует $E_0 = -0,52 \text{ кдж/г}$, что удовлетворительно согласуется с (18). Возможная погрешность (19) и (20) несущественна, поскольку учет малых отрицательных p_0 практически не влияет на точность вычисления давления адиабатически расширяющихся продуктов взрыва. Существенно, однако, что (20) правильно описывает работу «упругих» сил $E_0(\rho_0)$ при расширении от ρ_0 до $\rho \ll \rho_0$. Поэтому будем формально считать, что самосогласованные выражения (19) и (20) представляют p_0 и E_0 не только при $\rho > \rho_0$, но и во всем диапазоне $\rho \ll 2,3$.

Согласованная с (19) и (20) функция γ второго приближения (рис. 2, 3) определяется формулами (3), (15) и экспериментальными данными. Эта функция правильно описывает результаты вычисления γ при $\rho < 1,2$ и при $\rho > 1,7$, а в оставшемся интервале плотностей с точностью до 5% совпадает с γ первого приближения.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

Для практических приложений результаты вычисления γ при больших и малых плотностях удобно представить единой интерполяционной формулой. Будем искать эту формулу аналогично (3) и (15) в виде

$$\gamma = \frac{R \varphi(\tau)}{c_v^* + 0,3 R [\varphi(\tau) - 1]} \quad (21)$$

(при температурах $\sim 5000^\circ \text{К}$ с хорошей точностью $c_v^*/R = 43,8$ (12)). Функцию φ определим так, чтобы $\varphi \approx \tilde{\varphi}$ при малых τ и чтобы (21) удовлетворяло зависимости γ от ρ (рис. 2) для точек Жуге, где приближенно

$$\tau = 0,44 \rho. \quad (22)$$

(Так связаны ρ и τ при $T=5000$.) Вследствие того, что изменение $(T)^{0.3}$ вдоль линии точек Жуге очень мало, при интерполяции $\gamma(\tau)$ достаточно приближения (22). Искусственная замена при $\rho > \rho_0$ переменных $\rho \rightarrow \tau$ не приводит к фактическому уменьшению точности вычисления γ адиабатически расширяющихся продуктов взрыва, поскольку: а) функция γ сравнительно слабо зависит от ρ или τ ; б) переменная τ слабо зависит от температуры $\{ \sim (T)^{0.3} \}$; в) при адиабатическом расширении газа из любой точки Жуге до точки с плотностью $\rho=1$ температура меняется не более, чем в 1,5 раза. Заметим, что в силу слабой зависимости γ от T переход от ρ к τ не противоречит приближенному представлению о том, что при больших плотностях γ является функцией только от плотности. (В случае степенного потенциала взаимодействия φ должно быть функцией от τ при всех плотностях, поэтому в качественном отношении представление φ как функции τ имеет не меньше оснований, чем предположение о зависимости φ только от плотности. В связи с тем, однако, что количественная сторона вопроса о точности модели степенного потенциала при $\rho > 1$ здесь не ясна, для обоснования перехода от ρ к τ использовались лишь изложенные формальные мотивы.)

Искомая интерполяционная формула имеет вид

$$\gamma = 1 + \frac{2.7\tau + 15\tau^4}{1 + 2.6\tau^4}. \quad (23)$$

Знаменатель в (21) при $\rho > 1$ является частью интерполяционной формулы и, вообще говоря, может быть не равен теплоемкости c_v , которая так же, как и температура, при $\rho > 1$ в точках Жуге неизвестна. Существенно, однако, что знаменатель (21) совпадает с c_v при малых плотностях и приближено удовлетворяет закону Дюлонга и Пти с учетом внутримолекулярных колебаний при больших плотностях ($\tau \approx 1$). Поэтому для приближенного вычисления температуры и при $\rho > 1$ можно принять

$$c_v = c_v^* + 0.3R(\varphi - 1)$$

и

$$T = (E - \Delta - E_0)\mu/c_v; \quad \mu = 25. \quad (24)$$

Погрешность приближения (24) не поддается точной оценке¹, но, по-видимому, заключена в пределах 20 %. В таком же приближении

$$p = p_0 + 3.33\rho\varphi(\tau)T^* \text{ кбар}$$

и температура может быть вычислена по формуле

$$T^* = 0.3 \frac{p - p_0}{\rho\varphi(\tau)}, \quad (25)$$

что, согласно (3) и (21), эквивалентно (24).

В связи с тем, что функции φ и Δ слабо зависят от температуры, при их вычислении достаточно воспользоваться приближенными выражениями для температуры (24) или (25).

На основе формул (3), (10), (12), (13), (19) — (21), (23) и (25)

¹ В случае степенного потенциала выражение (24) является точным, погрешность в c_v , связанная с пренебрежением членом $0.3RT\partial\varphi/\partial T$, компенсируется заменой c_v на c_v^* при вычислении Δ по (14).

запишем окончательно уравнение состояния продуктов детонации гексогена в виде

$$\left. \begin{aligned} p - p_0 &= \frac{R \rho \varphi (E - \Delta - E_0)}{c_v^* + 0,3 R (\varphi - 1)}; \\ \varphi &= 1 + \frac{2,7 \tau + 15 \tau^4}{1 + 2,6 \tau^4}; \quad \tau = 0,72 \rho (T^*)^{-0,3}; \\ p_0 &= 15,4 \rho^3 - 12,6 \rho^2 \text{ кбар}; \\ E_0 &= 0,77 \rho^2 - 1,26 \rho \text{ кдж/с}; \\ c_v^* &= \frac{1,76 R \theta^2 \exp \theta}{(\exp \theta - 1)^2} + 2,624 R; \quad \theta = \frac{3200}{T}; \\ \Delta &= \frac{1,76 R T \theta}{\mu (\exp \theta - 1)} \left[1 - \frac{\theta \exp \theta}{\exp \theta - 1} \right]; \quad \mu = 25; \\ T^* &= 0,3 \frac{(p - p_0)}{\rho \varphi (\tau)}; \quad T = 10^3 T^*, \text{ } ^\circ\text{К}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Этими формулами при заданных значениях ρ и E определяются: p_0 и E_0 (с погрешностью $\sim 10\%$ при $\rho > 1,7$ и по порядку величины при $\rho < 1,7$); p , φ и γ (с погрешностью $\sim 5-10\%$) и T (с погрешностью $5-10\%$ при $\rho < 1$ и, по-видимому, $\sim 20\%$ при $\rho > 1$).

Систему трансцендентных уравнений (26) при заданных ρ и E или ρ и p удобно решать методом итераций, задаваясь при нулевой итерации каким-либо правдоподобным значением T^* и уточняя его с помощью (25) после вычисления остальных величин по формулам, не включающим (25). Вследствие слабой зависимости φ и Δ от T^* итерационный процесс быстро сходится. График (рис. 3) иллюстрирует рост упругой части давления с ростом ρ_1 . При максимальной плотности гексогена 1,8 «упругое» давление составляет $\sim 41\%$ от общего. На рис. 4 приведены аналогичные графики для энергии. «Упругая» часть энергии составляет $\sim 16\%$ от общей при $\rho_1 = 1,8$ ($\rho_2 = 2,39$). В широкой окрестности точки ρ_0 «упругая» энергия меняется мало. Как уже отмечалось, ρ_0 , а следовательно, и $dE_0/d\rho$ при $\rho < \rho_0$ определены лишь по порядку вели-

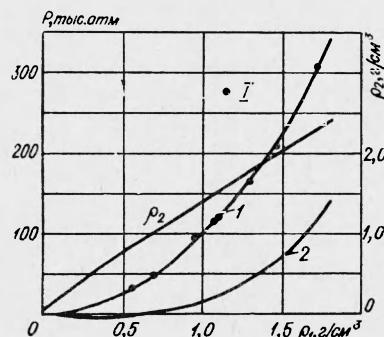


Рис. 3. Графики зависимости суммарного (1) (построен по формуле (16)) и упругого (2) давления детонационной волны от плотности заряжания.

1 — экспериментальные данные таблицы.

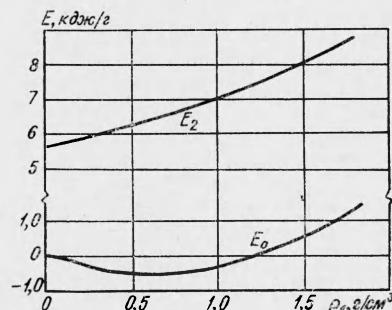


Рис. 4. Графики зависимости суммарной и упругой энергии от давления.

ции каким-либо правдоподобным значением T^* и уточняя его с помощью (25) после вычисления остальных величин по формулам, не включающим (25). Вследствие слабой зависимости φ и Δ от T^* итерационный процесс быстро сходится. График (рис. 3) иллюстрирует рост упругой части давления с ростом ρ_1 . При максимальной плотности гексогена 1,8 «упругое» давление составляет $\sim 41\%$ от общего. На рис. 4 приведены аналогичные графики для энергии. «Упругая» часть энергии составляет $\sim 16\%$ от общей при $\rho_1 = 1,8$ ($\rho_2 = 2,39$). В широкой окрестности точки ρ_0 «упругая» энергия меняется мало. Как уже отмечалось, ρ_0 , а следовательно, и $dE_0/d\rho$ при $\rho < \rho_0$ определены лишь по порядку вели-

чины, однако, найденная E_0 правильно учитывает работу упругих сил притяжения при расширении от ρ_0 до $\rho \ll 1$.

Наиболее чувствительным к уравнению состояния параметром является температура, зависимость которой от ρ_1 показана на рис. 5 (кривая и точки 1). Кривая на рис. 5 получена с помощью уравнения состояния (26) и уравнения (17). Расхождение значений T , вычисленных двумя способами, не превосходит погрешности уравнения состояния и связано с неточностью интерполяционного соотношения (16) (введенного для удобства, но определяющего систему уравнений) по сравнению с функцией ρ_2 , определенной в явном виде (17), и уравнением состояния (26). Из рис. 5 видно, что полученная в настоящей работе зависимость $T(\rho_1)$ хорошо согласуется с данными других работ, за исключением работы [22]. Температура продуктов в детонационной волне имеет максимум при плотности заряда $\sim 0,5-0,7$. Большая погрешность вычисления T не позволяет определить истинную величину и положение максимума достаточно точно. Однако в качественном отношении найденный максимум представляется естественным. Уменьшение T в области $\rho_1 < 0,5$ связано с уменьшением массовой скорости и теплоты взрыва, а в области $\rho_1 > 0,7$ — с быстрым увеличением φ и упругой составляющей энергии.

Уравнение состояния (26) с указанными оценками погрешностей получено для $0 < \rho < 2,3$ в области, занимаемой линиями постоянной энтропии, проходящими через точки Жуге. По-видимому, примерно такую же погрешность, как в этой области, найденное уравнение состояния имеет и при больших сжатиях, соответствующих отражению детонационной волны от жесткой преграды. Функции ρ , γ , φ и T могут быть вычислены с погрешностью, в 1,5—2 раза большей, при тех же плотностях, но в более широком диапазоне энергий, от границы конденсации до границы существенной диссоциации газа (расположенной в плотном газе ($\rho > \rho_0$) при температурах, во всяком случае, выше 10^4 К, а в газе с плотностью 0,01 — выше $3 \cdot 10^3$ К).

В дальнейшем предполагается вычислить в явном виде зависимости давления от плотности для адиабатического расширения продуктов взрыва гексогена из начальных состояний, соответствующих всему диапазону плотностей заряда.

ВЫВОДЫ

С помощью экспериментальных данных и теоретических представлений о детонационной адиабате и термодинамических свойствах реальных газов найдено уравнение состояния продуктов детонации гексогена в диапазоне плотностей 0—2,3 г/см³. Уравнение состояния относится в основном к области термодинамических параметров, соответствующих адиабатическому расширению продуктов взрыва зарядов любой возможной плотности и определяет давление при заданных в этой области значениях плотности и энергии с погрешностью 5—10%.

Поступила в редакцию
29/III 1966

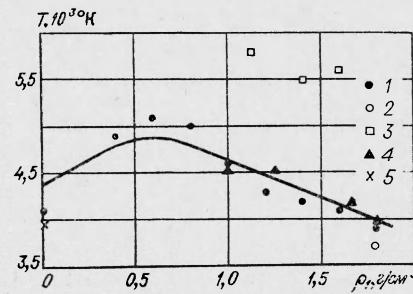


Рис. 5. Зависимость температуры от давления.

1 — расчет по уравнениям (26) и (16); 2 — эксперимент [21]; 3 — эксперимент [22]; 4 — расчет [6]; 5 — расчет [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, К. П. Станюкович. Докл. АН СССР, 1945, **46**, 9, 399.
2. Я. Б. Зельдович, А. С. Компанеец. Теория детонации. Гостехиздат, 1955.
3. S. I. Jacobs. J. Am. Rocet. Soc., 1960, **30**, 151.
4. Н. М. Кузнецов. Ж. физ. химии, 1961, **XXXV**, 7, 1430.
5. W. Fickett. J. Phys. of Fluids, 1963, **6**, 7.
6. В. Н. Зубарев, Г. С. Телегин. Докл. АН СССР, 1964, **153**, 2.
7. А. Н. Дремин, П. Ф. Похил. Докл. АН СССР, 1959, **128**, 5, 989.
8. А. Я. Апин, Ю. А. Лебедев. Докл. АН СССР, 1957, **114**, 4, 819.
9. Л. Н. Стесик, Н. С. Шведова. ПМТФ, 1964, **124**, 4.
10. Л. А. Бриги, М. С. Тарасов, З. А. Цукерман. ЖЭТФ, 1959, **37**, 6 (12).
11. А. Н. Дремин, К. К. Шведов, В. А. Веретенников. Сб. «Взрывное дело», 1963, № 52/9.
12. В. А. Веретенников, А. Н. Дремин, К. К. Шведов. ФГВ, 1965, 3.
13. Б. В. Некрасов. Курс общей химии. Госхимиздат, 1952.
14. Н. М. Кузнецов. ПМТФ, 1961, 1.
15. G. G. Kennedy. Amer. J. Sci., 1950, 248, 540.
16. I. Saurell, R. Bargeon et all. Disc. Faraday. Soc., 1956, 22, 64.
17. G. G. Kennedy. Amer. J. Sci., 1954, 252, 225.
18. Н. Б. Варгафтик. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. Физматгиз, 1963.
19. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Гостехиздат, 1951.
20. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Под ред. В. П. Глушко. Изд-во АН СССР, 1962.
21. И. М. Воскобойников, А. Я. Апин. Докл. АН СССР, 1960, **130**, 4.
22. F. S. Gibson et all. J. Appl. Phys., 1958, 29, 628.