

ПРОДУКТЫ ВЗРЫВА — МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ СРЕДА

Куропатенко В.Ф.

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

v.f.kuropatenko@vniitf.ru

Продукты взрыва за фронтом детонационной волны являются неравновесной смесью N компонентов ($N \approx 10-15$). В процессе установления равновесия компоненты взаимодействуют друг с другом и обмениваются импульсом, энергией, а при наличии химических реакций и массой. Как правило, в известных моделях многокомпонентных сред обменные процессы рассматриваются только в рамках парных взаимодействий компонентов, учитывающих их индивидуальные свойства (размер частиц, чистоту поверхности, адгезионные свойства и т.д.). Дополнительно к широко применяемым выражениям для интенсивности обмена импульсом и энергией между компонентами вводится тензор внешних для i -го компонента напряжений и потоки энергии. Для выбора конкретного выражения зависимости сил и потоков энергии от скоростей компонентов предлагается новый вид воздействия смеси на каждый компонент — кластерное взаимодействие. Исследуются условия, при которых средние величины P , ρ , E , \bar{U} удовлетворяют системе законов сохранения сплошной среды и устанавливается связь этих законов сохранения с законами сохранения компонентов. Для ликвидации произвола в выборе сил и потоков энергии предполагается, что они должны быть инвариантными относительно преобразования Галилея. Показано, что система законов сохранения смеси получается путем суммирования законов сохранения компонентов. Вводится понятие неравновесной кинетической энергии компонента и предлагается дополнительное уравнение для объемной концентрации, которое замыкает систему законов сохранения и уравнения состояния i -го компонента и не накладывает дополнительного ограничения на свойства смеси.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №04-01-00050.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПЛОТНЫХ ВВ

Сахаров М.Ю. , Куропатенко В.Ф.*

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

**m.yu.sakharov@vniitf.ru*

Предлагается уравнение состояния (УРС) плотных взрывчатых веществ (ВВ), в основе которого лежит достаточно точная функциональная аппроксимация зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры и плотности. В соответствии с классическим подходом, энергия и давление представляются в виде суммы потенциальных и тепловых членов. Тепловое давление и энергия ядер и электронов описываются отдельно друг от друга. Энергия и давление нулевых колебаний являются асимптотиками тепловых членов при нулевой температуре. Удельная тепловая энергия ядер получается интегрированием по температуре функции теплоемкости. Из уравнения термодинамической совместности получается функциональная зависимость теплового давления ядер от удельного объема и температуры. Для определения произвольных функций от удельного объема используется условие, что энтропия ядер является полным дифференциалом. При построении тепловых электронных составляющих давления и энергии предполагается, что

это функции с разделяющимися переменными. Для построения потенциальной части берется потенциал типа Леннарда–Джонса, на параметры которого накладываются ограничения в точке с нулевой температурой и давлением и асимптотические ограничения при стремлении плотности к нулю и бесконечности. Сконструированное уравнение состояния имеет несколько подгоночных параметров — коэффициентов УРС. Численные значения коэффициентов УРС для каждого ВВ подбираются таким образом, чтобы расчетные значения наилучшим образом аппроксимировали известные экспериментальные значения. Основными опорными были выбраны данные по ударному сжатию ВВ. Подобранные значения коэффициентов проверяются на других процессах (изобарическое температурное расширение, теплоемкость при постоянном давлении, изобарическая температурная зависимость скорости звука и др.), для которых есть достоверные экспериментальные данные.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №04-01-00050.

ОСОБЕННОСТИ ДЕТОНАЦИОННОГО АЛМАЗОСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА И ИК И КРС СПЕКТРЫ

Корец А.Я.

КрГТУ, Красноярск

prcom@kgtu.runnet.ru

Были получены инфракрасные спектры (ИК) поглощения и спектры комбинационного рассеяния света (КРС) различных образцов ультрадисперсного алмазосодержащего материала (УДА). Анализ устойчивости ИК-спектров УДА, подвергнутых различным воздействиям (радиационному облучению, термическому воздействию и окислению), и анализ результатов, полученных ранее другими авторами (например, Губаревич Т.М.), позволил сделать вывод, что структурной единицей УДА является неоднородная компактная частица размерами 30–50 нм [1]. Очевидным фактом является связь этой структурно-неоднородной частицы с неравновесными детонационными процессами, которые проявляют себя через пульсации физико-химических параметров и, прежде всего, энергии, делают неопределенными сложившиеся представления о функциях состояния, и ограничивают, вообще говоря, рост любых кристаллов. Анализ спектров КРС (Раман-спектров) позволил связать широкую полосу $1600\text{--}1610\text{ см}^{-1}$ с молекулярными группами $X\text{--NO}_2$ ($X = \text{O}, \text{N}$); R--X--N=O ($X = \text{O}, \text{C}, \text{N}$), а не с sp^2 -углеродными включениями. Участие данных фрагментов в детонационных процессах потребовало уточнения роли азота в детонационных процессах [2]. На основе анализа экспериментальных ИК и КРС спектров было предложено разделить данные процессы на две составляющие: 1 — эндотермический переход от молекулярного азота (частичное разрушение данной молекулы) к азотному дефекту А типа; 2 — экзотермический процесс перехода от активированных азотсодержащих фрагментов исходных молекул взрывчатых веществ (ВВ) к молекулярному азоту.

1. Mironov E., Koretz A., Petrov E. // Proc. 12th Europ. Conf. «Diamond, Diamond-like materials», Hungary. Diamond and Related Materials. 2002. V.11. №3–6. P.872–876.