

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ТЕПЛОФИЗИКЕ  
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ  
ИНСТИТУТ ТЕПЛОФИЗИКИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ  
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
НИИ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ КВНЦ РАН

---

**ФИЗИКА ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ВЕЩЕСТВА — 2006**

ЧЕРНОГОЛОВКА — 2006

# ПРОДУКТЫ ВЗРЫВА — МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ СРЕДА

Куропатенко В.Ф.  
РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск  
v.f.kuropatenko@vniitf.ru

**1. Модель.** После химического разложения плотного взрывчатого вещества (ВВ) на фронте детонационной волны образуются продукты взрыва (ПВ), представляющие неравновесную смесь отдельных компонентов. Так, например, гексоген  $C_3H_6N_6O_6$  разлагается на  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $NO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  с высвобождением энергии, равной калорийности ВВ. В результате этого в точке Жуге все компоненты находятся в газообразном состоянии при давлениях  $P \approx 20-40$  ГПа и температурах  $T \approx 3000-4000$  К [1]. Все модели, описывающие поведение ПВ после взрыва, можно разделить на несколько типов в зависимости от того, насколько полно они учитывают физические и химические свойства компонентов. В моделях первого поколения разделение ПВ на компоненты отсутствует. Продукты взрыва рассматриваются как сплошная газовая среда, свойства которой определяются некоторым уравнением состояния (УРС) [2]. Поведение ПВ после взрыва описывается системой законов сохранения. Численные значения параметров УРС подбираются так, чтобы были описаны хотя бы частично экспериментальные данные. В экспериментах, как правило, измеряются скорость детонационной волны  $D$  и массовая скорость  $U$  в точке Жуге. Есть эксперименты [3], в которых измеряются также траектории ПВ в плоских образцах, калорийность ВВ, метательные свойства или температура [1]. Однако, точность измерения этих величин чаще всего не высока. В моделях второго поколения делается попытка учесть многокомпонентность ПВ при создании уравнения состояния [4,5]. При этом смесь предполагается равновесной по давлениям и скоростям. И хотя эти ограничения довольно жесткие, тем не менее, такой подход позволяет построить УРС с немонотонной зависимостью коэффициента адиабатичности  $N = \left( \frac{\partial \ln P}{\partial \ln \rho} \right)_S$  от

плотности. Наконец в моделях третьего поколения ПВ будем рассматривать как неравновесную смесь взаимодействующих друг с другом компонентов. Однако, и в этих моделях возникает необходимость в некоторой схематизации физических процессов. Рассмотрим такую модель. Будем исходить из того, что фронт нормальной детонационной волны распространяется по постоянному фону с постоянной скоростью. Постоянство фона в случае многокомпонентной среды означает, что все компоненты находятся в равновесии друг с другом:  $P_i^0 = P^0$ ,  $P_i^0 = 0$ ,  $T_i^0 = T^0$ . Будем считать, что химикат имеет нулевую толщину и все химические реакции разложения ВВ происходят мгновенно в зоне химиката. Из известного факта, что скорость  $D$  нормальной детонационной волны постоянна, следует что должна быть постоянной и скорость разрыва в каждом компоненте, т.е.  $D_i = D$ . Следовательно, ПВ являются неравновесной смесью с  $P_i \neq P$ ,  $U_i \neq U$ ,  $T_i \neq T$  и обмен импульсом и энергией между компонентами начинается на фронте детонационной волны. Свойства каждого компонента описываются «своим» индивидуальным уравнением состояния, а смесь в целом уравнения состояния не имеет.

**2. Уравнения модели.** Рассмотрим модель многокомпонентной среды предложенную в [6]. Ограничимся для простоты одномерным течением с плоской симметрией. Законы сохранения  $i$ -го компонента имеют вид

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_i \rho_i U_i}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i U_i}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_i \rho_i U_i^2}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_i P_i}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_i F_{Si}}{\partial x} - \alpha_i R_i = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i \epsilon_i}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_i \rho_i \epsilon_i U_i}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_i P_i U_i}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_i U_i F_{Si}}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_i Q_{Si}}{\partial x} - \alpha_i \Phi_i - \alpha_i A_i = 0, \quad (3)$$

где  $\alpha_i$  – объемная концентрация,  $\rho_i$  – плотность,  $U_i$  – скорость,  $P_i$  – давление,  $\epsilon_i$  – удельная полная энергия. Функции  $R_i$  и  $\Phi_i$ , определяемые парными обменов между компонентами, в соответствии с [6] имеют вид

$$R_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j R_{ji}, \quad R_{ji} = \alpha_{ij} (U_j - U_i) / \tau_{ij}^U, \quad (4)$$

$$\Phi_i = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi_{ji}, \quad \Phi_{ji} = \frac{b_{ij}}{\tau_{ij}^P} (P_j - P_i) \frac{C_{ji}}{\tau_{ji}^T} (T_j - T_i), \quad (5)$$

где  $N$  – число всех компонентов смеси,  $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ ,  $b_{ij} = b_{ji}$ ,  $c_{ij} = c_{ji}$ . Времена релаксации скоростей давлений и температур также удовлетворяют условиям взаимности Онзагера

$$\tau_{ij}^U = \tau_{ji}^U, \quad \tau_{ij}^P = \tau_{ji}^P, \quad \tau_{ij}^T = \tau_{ji}^T. \quad (6)$$

В результате условий взаимности  $R_{ji}$  и  $\Phi_{ji}$  удовлетворяют условиям

$$R_{ji} = -R_{ij}, \quad \Phi_{ji} = -\Phi_{ij}. \quad (7)$$

Функция  $A_i$  означает работу, совершенную над  $i$ -м компонентом другими компонентами и определяемую уравнением

$$A_i = 0.5 \sum_{j=1}^N \alpha_j R_{ji} (U_i + U_j), \quad (8)$$

Функция  $\Phi_{Si}$  означает силу воздействия смеси в целом на  $i$ -й компонент, а функция  $Q_{Si}$  – определяет поток энергии от смеси к  $i$ -му компоненту. Они определяются кластерной формой взаимодействия  $i$ -го компонента со смесью и в соответствии с [5] имеют вид

$$F_i = -0.5\rho_i(U - U_i)^2, \quad (9)$$

$$Q_i = 0.5(P_i + \rho_i E_i)(U - U_i). \quad (10)$$

Удельная полная энергия  $\varepsilon_i$  связана с удельной внутренней энергией  $E_i$  и удельной кинетической энергией  $0.5U_i^2$  уравнением

$$\varepsilon_i = E_i + 0.5U_i^2 \quad (11)$$

К уравнениям (1)-(5), (8)-(10) добавляются уравнения состояния

$$P_i = P_i(\rho_i, E_i), \quad (12)$$

$$T_i = T_i(\rho_i, E_i). \quad (13)$$

Далее к системе уравнений добавим уравнения для объемной концентрации из [6]

$$P_i \left( \frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + U_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} \right) + (U - U_i) \frac{\partial \alpha_i P_i}{\partial x} - 2 \frac{\partial \alpha_i Q_i}{\partial x} = 0. \quad (14)$$

Замыкает систему уравнений уравнение для барицентрической скорости

$$U = \left( \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i U_i \right) / \left( \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i \right). \quad (15)$$

Т.о. для каждого компонента получается система 13 уравнений с 13 искомыми функциями:  $\alpha_i, \rho_i, U_i, P_i, F_i, \varepsilon_i, E_i, R_i, Q_i, \Phi_i, A_i, T_i, U$ .

**3. Условия на детонационной волне.** Рассмотрим стационарный сильный разрыв, на фронте которого выделяется энергия  $q$ . Перейдем к автомодельной переменной  $\xi = x - Dt$ , где  $D = \text{const}$ . После соответствующего преобразования уравнений (1)-(3) и интегрирования получим условия на фронте детонационной волны

$$\alpha_i \rho_i (D - U_i) = \alpha_{0i} \rho_{0i} (D - U_{0i}) = W_i, \quad (16)$$

$$W_i U_i - \alpha_i (P_i + F_i) = W_i U_{0i} - \alpha_{0i} (P_{0i} + F_{0i}), \quad (17)$$

$$W_i \varepsilon_i - \alpha_i Q_i - \alpha_i U_i (P_i + F_i) = W_i \varepsilon_{0i} - \alpha_{0i} Q_{0i} - \alpha_{0i} U_{0i} (P_{0i} + F_{0i}) + q_i, \quad (18)$$

Интегрирование (14) дает

$$2\alpha_i Q_i + \int_{\eta_1}^{\eta_0} \left( P_i (D - U_i) \frac{d\alpha_i}{d\eta} - (U - U_i) \frac{d\alpha_i P_i}{d\eta} \right) d\eta = 2\alpha_{0i} Q_{0i} \quad (19)$$

К уравнениям (16)-(19) добавляются уравнение (9)-(12), (15). Эта система определяет адиабату Жуге  $i$ -го компонента. Число адиабат Жуге равно числу компонентов  $N$ . На каждой адиабате Жуге условие касания изэнтропы и адиабаты Жуге имеет вид

$$D = U_i \pm C_i, \quad (20)$$

или, что то же самое,

$$W_i = \pm \sqrt{\left( \frac{\partial P_i}{\partial V_i} \right)_{S_i}}. \quad (21)$$

Значения  $q_i$  находятся следующим образом. Энергия связи, которая разрывается при химической реакции, распределяется между компонентами пропорционально их массовым концентрациям. В сумме эти энергии равны калорийности ВВ.

$$\rho q_0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i \rho_i q_i. \quad (22)$$

**4. Разгрузка ПВ.** При разгрузке ПВ каждый компонент разгружается по «своей» изэнтропе, обмениваясь с другими компонентами импульсом и энергией. Эти процессы определяются уравнениями (1)-(15). В процессе разгрузки каждый компонент может претерпевать фазовые переходы в соответствии со «своим» уравнением состояния. Такой подход к моделированию разгрузки ПВ позволяет естественным образом описать образование частиц алмаза в ПВ.

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

1. Похил П. Ф., Мальцев В. М., Зайцев В. М. Методы исследования процессов горения и детонации. М.: Наука, 1969.
2. Ландау Л. Д., Станюкович К. П. Об изучении детонации конденсированных взрывчатых веществ // Докл. АН СССР. 1945. Т. 46. С. 399-402.

3. Альтшулер Л. В., Ашаев В. К., Балалаев В. В., Доронин Г. С., Жученко В. С. Параметры и режимы детонации конденсированных ВВ // ФГВ. 1983. Т. 19. №4. С. 153–159.
4. Зубарев В. Н., Телегин Г. С. Расчет параметров детонационных волн конденсированных ВВ // Докл. АН СССР. 1962. Т. 147. №5. С. 1122–1125.
5. Куропатенко В. Ф. Уравнение состояния продуктов детонации плотных ВВ // ФГВ. 1959. №6. С. 112–117.
6. Куропатенко В. Ф. Модель многокомпонентной среды // ДАН. 2005. Т. 403. №6. С. 761–763.

## 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 ядерной теплоемкости при постоянном объеме от температуры и плотности.

$$C_V = A_g T (2\theta_D(V) + T) / (\theta_D(V) + T)^2, \quad (1)$$

где  $A_g = 3R/\mu$ ,  $R$  – газовая постоянная;  $\mu$  – молярный вес;  $\theta_D(V)$  – температура Дебая.

В соответствии с классическим подходом, энергия и давление представляются в виде суммы потенциальных, тепловых членов и членов, отвечающих за нулевые колебания. Тепловое давление и энергия ядер и электронов описываются отдельно друг от друга.

Удельная тепловая энергия ядер получается интегрированием (1) по температуре:

$$E_{\text{тя}} = A_g T^2 / (\theta_D(x) + T), \quad (2)$$

где  $x = V/V_{0k}$ .

Из уравнения термодинамической совместности получается функциональная зависимость теплового давления ядер от удельного объема и температуры:

$$P_{\text{тя}} = -A_g \frac{T^2}{\theta_D(x) + T} \cdot \frac{d \ln(\theta_D)}{V_{0k} dx}, \quad (3)$$

откуда, используя классическое представление:

$$P_{\text{тя}} = \Gamma_{\text{тя}} \rho E_{\text{тя}},$$

получаем:

$$\Gamma_{\text{тя}} = -d \ln(\theta_D) / d \ln(V) = -d \ln(\theta_D) / d \ln(x) = -x d \ln(\theta_D) / dx. \quad (4)$$

Вид функции  $\theta_D(x)$  получается интегрированием выражения (4).

Будем считать, что коэффициент Грюнайзена  $\Gamma_{\text{тя}}(x)$  имеет вид:

$$\Gamma_{\text{тя}}(x) = \Gamma_{\text{я}}^{\infty} \frac{x^2}{(1+x)^2} + b \cdot x^2 \exp(-a \cdot x), \quad (5)$$

Данное выражение удовлетворяет условиям:

$$x = 0, \quad \Gamma_{\text{тя}} = 0, \quad \Gamma'_{\text{тя}} = 0,$$

$$x = 1, \quad \Gamma_{\text{тя}} = \Gamma_{\text{я}}^{\infty} / 4 + b \cdot e^{-a}, \quad \Gamma'_{\text{тя}} = \Gamma_{\text{я}}^{\infty} / 8 + b(2-a) \cdot e^{-a},$$

$$x = \infty, \quad \Gamma_{\text{тя}} = \Gamma_{\text{я}}^{\infty}, \quad \Gamma'_{\text{тя}} = 0.$$

Потребуем, чтобы функция  $\Gamma_{\text{тя}}(x)$  имела максимум  $\Gamma_{\text{тя}}^{\text{max}}$  при некотором значении  $x_{\text{max}}$ . Тогда для коэффициентов  $a$  и  $b$  получаются следующие выражения:

$$a = \frac{2}{x_{\text{max}}} \left( 1 + \frac{\Gamma_{\text{я}}^{\infty} x_{\text{max}}^2}{(1+x_{\text{max}})(\Gamma_{\text{тя}}^{\text{max}}(1+x_{\text{max}})^2 - \Gamma_{\text{я}}^{\infty} x_{\text{max}}^2)} \right),$$

$$b = \frac{2\Gamma_{\text{я}}^{\infty} \exp(ax_{\text{max}})}{(1+x_{\text{max}})^2(ax_{\text{max}} - 2)}.$$

Значения  $\Gamma_{\text{я}}^{\text{max}}$ ,  $x_{\text{max}}$ ,  $\Gamma_{\text{я}}^{\infty}$  являются подбираемыми параметрами УРС.

После интегрирования (4), при подстановке (5), получим:

$$\theta_D(x) = K_{\theta} (1+x)^{-\Gamma_{\text{я}}^{\infty}} \exp \left( \frac{b(ax+1)}{a^2} \exp(-ax) - \frac{\Gamma_{\text{я}}^{\infty}}{1+x} \right), \quad (6)$$

где  $K_{\theta} > 0$ .

При построении тепловых электронных составляющих давления и энергии предполагается, что это функции с разделяющимися переменными. Для электронной тепловой части энергии выбрано следующее выражение:

$$E_{\text{тэ}} = \varphi_{\text{э}}(V) T^2, \quad (7)$$

где

$$\varphi_{\text{э}}(V) = \frac{(a_e + b_e)V_{0k} + (a_e - b_e)V}{(c_e + 1)V_{0k} - (c_e - 1)V}. \quad (8)$$

Электронная часть теплового давления получается из уравнения совместности:

$$\frac{\partial E_{\tau\gamma}}{\partial V} = T \frac{\partial P_{\tau\gamma}}{\partial T} - P_{\tau\gamma},$$

$$P_{\tau\gamma} = TK(V) + \frac{2V_{0k}(a_e - b_e c_e)}{((c_e + 1)V_{0k} - (c_e - 1)V)^2} T^2. \quad (9)$$

Вид функции  $K(V)$  выбирается таким образом, чтобы при  $T = \text{const}$  и  $V \rightarrow 0$   $P_{\tau\gamma} \rightarrow \infty$ . Следующий вид функции  $K(V)$  удовлетворяет этому условию при  $\gamma_s > 0$ .

$$K(V) = \beta_0 \left( \frac{V_{0k}}{V} \right)^{\gamma_s}. \quad (10)$$

Энергия и давление нулевых колебаний являются асимптотиками ядерных членов при нулевой температуре. Энергия нулевых колебаний в Дебаевском приближении дается формулой:

$$E_{нк}(x) = \frac{3}{8} A_g \theta_D(x). \quad (11)$$

Давление нулевых колебаний, соответственно:

$$P_{нк}(x) = -\frac{1}{V_{0k}} \frac{dE_{нк}}{dx} = \frac{\Gamma_{\tau\gamma}(x)}{xV_{0k}} E_{нк}. \quad (12)$$

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:

$$E_y = \frac{C_{0k}^2}{mn(m-n)} (nx^{-m} - mx^{-n} + m - n), \quad P_y = \frac{\rho_{0k} C_{0k}^2}{m-n} (x^{-m-1} - x^{-n-1}), \quad n = \frac{C_{0k}^2}{mQ_{суб}}, \quad (13)$$

где  $m, \rho_{0k}, C_{0k}, Q_{суб}$  являются подбираемыми параметрами УРС, причем, из условия  $m > n$ , следует:  $m^2 Q_{суб} - C_{0k}^2 > 0$

Выражения (13) удовлетворяют условиям:

$$\begin{aligned} x = 1, \quad E_y = 0, \quad P_y(1) = 0 \\ x = 0, \quad E_y = \infty, \quad P_y(0) = \infty \\ x = \infty, \quad E_y = Q_{суб} > 0, \quad P_y(\infty) = 0 \end{aligned}$$

Предлагаемое уравнение состояния имеет несколько эмпирических коэффициентов:  $m, \rho_{0k}, C_{0k}, Q_{суб}, \Gamma_{\tau\gamma}^{max}, x_{max}, \Gamma_{\tau\gamma}^{\infty}, K_{\theta}, \beta_0, \gamma_s, a_e, b_e, c_e$ . Их численные значения для каждого ВВ подбираются таким образом, чтобы расчетные значения наилучшим образом аппроксимировали известные экспериментальные значения. Основными опорными были выбраны данные по ударному сжатию ВВ.

Для определения произвольных функций от удельного объема используется условие, что энтропия ядер является полным дифференциалом.

Подобранные значения коэффициентов проверяются на данных о процессах (изобарическом температурном расширении, зависимости теплоемкости при постоянном давлении от температуры и плотности, изобарической температурной зависимости скорости звука и др.), для которых есть достоверные экспериментальные данные.

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

## ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ КРИТЕРИИ ПРИМЕНИМОСТИ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ НУКЛЕАЦИИ

Черевко А.Г.

СибГУТИ, Новосибирск

cherevko@mail.ru

Процесс зародышеобразования (нуклеации) при фазовых переходах первого рода, к которым относятся конденсация и кристаллизация, постоянно привлекает внимание исследователей, начиная с Гиббса [1,2]. В капельном приближении кластер представляет собой группу атомов или молекул, имеющих сферическую форму. Если число молекул  $g$  кластера новой фазы (размер кластера) меньше некоего размера  $g^*$ , называемого критическим, то вероятность распада такого кластера выше, чем вероятность роста; при  $g = g^*$  — эти вероятности равны. У кластеров новой фазы, в которых число молекул  $g$  превышает критическое значение ( $g > g^*$ ) вероятность роста выше вероятности распада.

Размер критических кластеров столь мал, что их тепловые флуктуации оказываются существенными. В работе [3] предложена двумерная форма уравнения Зельдовича – Френкеля, описывающая процесс нуклеации при учете температурных флуктуаций, возникающих при каждом поглощении и соответственно испускании кластером молекулы пара. Эта модель использовалась в [4] Температурные флуктуации также рассматривались в ряде других работ, например, в работах [5,6].

В опубликованных работах не рассматриваются температурные флуктуации, определяемые тепловым излучением кластеров. Отметим, что эти флуктуации являются статистически независимыми по отношению к процессам поглощения и испускания молекул кластерами и по отношению к температурным флуктуациям, связанным с этими процессами. Кроме того, при высоких температурах энергия кванта теплового излучения может составлять десятки доли электронвольта, что достаточно для отрыва молекулы от кластера и перевода за-критического кластера в до-критический. Следовательно, такие флуктуации должны быть учтены при определении вероятности образования критических зародышей и при определении средней скорости нуклеации. Температурные флуктуации, связанные с