

На правах рукописи



**Долгачев Вадим Александрович**

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ  
ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ НАНО- И МИЛЛИСЕКУНДНЫМИ  
ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ В ОБЛАСТИ СЛАБОГО ПОГЛОЩЕНИЯ**

02.00.04. – Физическая химия

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Кемерово – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Кемеровский государственный университет» на кафедре теоретической физики

**Научный руководитель:** **Ханефт Александр Вилливич**, доктор физико-математических, старший научный сотрудник профессор кафедры теоретической физики ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

**Официальные оппоненты:** **Павленко Анатолий Александрович**, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории физики преобразования энергии высокоэнергетических материалов, ФГБУН «Институт проблем химико-энергетических технологий» СО РАН, г. Бийск

**Нурмухаметов Денис Рамильевич**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Федерального исследовательского центра угля и углехимии СО РАН, г. Кемерово

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный университет»

Защита диссертации состоится 13 октября 2017 г. в 10 часов на заседании диссертационного совета Д 212.088.03 при ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет» по адресу: 650043, г. Кемерово, ул. Красная, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет» и на сайте <http://www.kemsu.ru>

Автореферат разослан

2017 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.088.03  
доктор физико-математических наук,  
профессор



А. Г. Кречетов

## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** В последнее десятилетие возросло число работ как в России, так и за рубежом по экспериментальному изучению и математическому моделированию инициирования твердых взрывчатых веществ (ВВ), гетерогенных пиротехнических составов и твердых ракетных топлив лазерными импульсами различной длительности: от нано- до миллисекундного диапазона. Это обусловлено, во-первых, возросшей чувствительностью современной электронной аппаратуры для регистрации быстропротекающих процессов, происходящих в конденсированных взрывчатых веществах в периоде задержки, например импульсная проводимость и люминесценция твердого тела и продуктов взрыва. Во-вторых, данные проводимости и люминесценции твердого тела необходимы для разработки механизмов и математических моделей зажигания конденсированных взрывчатых веществ. В-третьих, это вызвано практическим использованием лазеров, например, для запуска ракетных двигателей при помощи светодетонаторов, помехозащищенность которых намного больше, чем у электродетонаторов. Кроме того, лазерное инициирование открывает весьма интересные перспективы развития взрывных технологий в плане повышения их безопасности. Именно с этим связан нарастающий поток работ, посвященных изучению инициирования конденсированных энергетических веществ лазерными импульсами различной длительности.

Наиболее плодотворно в последние десятилетия изучается инициирование тетранитропентаэритрита (ТЭН) лазерным импульсом в Кемеровском государственном и Национальном исследовательском Томском политехническом университетах. Для использования ТЭНа в реальных условиях необходимо в первую очередь детальное изучение механизма инициирования мощным импульсным излучением лазера, импульсом электронов, нагревом и ударом.

При инициировании органических ВВ по тепловому механизму с открытой поверхности, например, ТЭНа, необходим импульсный лазер огромной мощности [1]. Это вызвано тем, что коэффициент поглощения света на длине волны неодимового лазера органическими ВВ мал. Поэтому для снижения пороговой энергии зажигания органических взрывчатых веществ монохроматическим импульсом света их накрывают прозрачной пластинкой, наносят металлическую пленку или вводят поглощающие свет включения (горячие точки). В [2] полагают, что зажигание ВВ в этом случае обусловлено плазмой, образующейся при оптическом пробое на границе раздела стекло-ВВ, на границе между кристалликами в прессованных таблетках [3], а также абляцией металлической пленки [4].

Для того, чтобы пренебречь оптическим пробоем необходимо использовать лазер миллисекундной длительности, а для того чтобы пренебречь абляцией вместо металлической пленки необходимо использовать пленку из полупроводника. Это обусловлено тем, что толщина скин-слоя в металле значительно меньше толщины слоя, в котором поглощается свет в

полупроводнике. В этом случае зажигание ВВ произойдет от горячей плоскости на границе раздела полупроводниковая пленка-ВВ. Данная идея с точки зрения эксперимента реализована в работе [5] на примере системы: стекло-оксид меди-ВВ. Работ по численному моделированию зажигания ВВ горячей полупроводниковой пленкой, нагреваемой лазерным импульсом нет. Этим и определяется актуальность работы.

Следует заметить, что для более полного понимания теплофизических процессов, происходящих в трехслойной системе стекло-оксид меди-ВВ необходимо провести численное моделирование зажигания органических ВВ как с открытой поверхности, так и в двухслойной системе оксид меди-ВВ.

**Целью работы** является систематическое численное исследование макроскопических закономерностей зажигания органических ВВ (ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ) нано- и миллисекундными лазерными импульсами, выяснение закономерностей влияния теплоты плавления, радиуса светового пучка и толщины пленки оксида меди в системах оксид меди-ВВ, стекло-оксид меди-ВВ в рамках единых физико-химических моделей на основе уравнений теплопроводности.

Для достижения поставленной цели потребовалось решить следующие **задачи**:

1. Получить аналитический критерий для оценки порога зажигания конденсированных взрывчатых веществ лазерным импульсом с учетом многократного отражения светового потока от противоположных сторон образца.
2. Разработать пакеты прикладных программ:
  - для решения уравнений теплопроводности в цилиндрической системе координат с учетом плавления и многократного отражения светового потока от противоположных сторон образца;
  - для решения уравнений теплопроводности в системах оксид меди-ВВ; стекло-оксид меди-ВВ.
3. Провести численное моделирование зажигания с открытой поверхностью ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ наносекундным лазерным импульсом, сопоставить с имеющимися экспериментами, проверить критерий зажигания ВВ и установить рядовую зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ.
4. Провести численное моделирование зажигания ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ миллисекундным лазерным импульсом в двухслойной системе: оксид меди-ВВ. Установить рядовую зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ лазерным импульсом. Рассчитать минимальную энергию зажигания ВВ по окончании лазерного импульса.
5. Провести численное моделирование зажигания ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ миллисекундным лазерным импульсом в трехслойной системе: стекло-оксид меди-ВВ. Определить влияние теплоотвода в стеклянную пластинку на порог зажигания. Сопоставить с имеющимися экспериментами, установить рядовую зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ лазерным

импульсом. Рассчитать минимальную энергию зажигания ВВ по окончании лазерного импульса.

**Научная новизна** работы заключается в том, что в ней впервые:

1. Получены уравнения для расчета критической температуры и плотности пороговой энергии зажигания конденсированных взрывчатых веществ лазерным импульсом малой длительности с учетом многократного отражения светового потока от противоположных сторон образца.
2. Установлена рядовая зависимость зажигания органических ВВ с открытой поверхности лазерным импульсом наносекундной длительности: ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ. Наиболее чувствительным при одинаковых коэффициентах отражения и поглощения света к инициированию лазерным импульсом является ТЭН, а наиболее термостойким является ТАТБ.
3. При зажигании ВВ лазерным импульсом миллисекундной длительности в двухслойной системе: пленка оксида меди-ВВ, динамическое время задержки зажигания ВВ имеет минимум в зависимости от толщины пленки, поглощающей световой поток, обусловленный тем, что чем меньше толщина пленки, тем больше световой энергии выходит из пленки, а для толстой пленки необходима больше времени для прогрева ее холодной части до температуры зажигания за время действия лазерного импульса.
4. При зажигании ВВ лазерным импульсом миллисекундной длительности в трехслойной системе: стекло-пленка оксида меди-ВВ, динамическое время задержки зажигания ВВ больше, чем в двухслойной системе и имеет минимум в зависимости от толщины пленки, обусловленный тем, что чем меньше толщина пленки оксида меди, тем быстрее она отдает тепло в стеклянную пластину, а для толстой пленки необходима больше времени для прогрева ее холодной части до температуры зажигания за время действия лазерного импульса.
5. Минимальная энергия зажигания ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ по окончании лазерного импульса миллисекундной длительности в двухслойной системе оксид меди-ВВ линейно зависит от толщины оксидной пленки, а рядовая зависимость чувствительности ВВ имеет вид: ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ.
6. Минимальная энергия зажигания ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ по окончании лазерного импульса миллисекундной длительности в трехслойной системе стекло-оксид меди-ВВ практически не зависит от толщины оксидной пленки, а рядовая зависимость чувствительности ВВ имеет вид: ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ.

**Научные положения, выносимые на защиту:**

1. Критерий зажигания конденсированных взрывчатых веществ коротким лазерным импульсом, учитывающий многократное отражение светового потока от противоположных сторон образца и согласующийся с результатами численного моделирования зажигания с открытой поверхности ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ.

2. Динамическое время задержки зажигания органических ВВ лазерным импульсом миллисекундной длительности имеет минимум в зависимости от толщины поглощающей пленки оксида меди в системах: оксид меди-ВВ, стекло-оксид меди-ВВ.

3. Тепловой механизм зажигания ТЭНа лазерным импульсом миллисекундной длительности для трехслойной системы стекло-пленка оксида меди-ТЭН, согласующийся с экспериментом для пленок, толщиной до 14 мкм.

**Практическая значимость.** Критерий зажигания ВВ лазерным импульсом, учитывающий радиус пучка, многократное отражение светового потока от противоположных сторон образца и теплоту плавления ВВ может быть использован в практической деятельности для оценки порога зажигания энергетических материалов. Комплекс программ, разработанный для решения системы уравнений теплопроводности, может быть использован для моделирования процессов зажигания и для других конденсированных ВВ.

Диссертационная работа выполнялась в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № 3.1235.2014 К.

**Достоверность** научных положений, результатов и выводов обусловлена совпадением критической энергии зажигания ВВ лазерным импульсом, полученной из результатов численных расчетов и из критерия, а также выполнением законов сохранения энергии в тестовых задачах. Полученные результаты находятся в качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными по энергиям зажигания ТЭНа лазерным импульсом со свободной поверхности и в трехслойной системе: стекло-оксид меди- ТЭН.

**Личный вклад автора.** Постановка задачи и определение направлений исследования были проведены совместно с научным руководителем. Разработка программного обеспечения проводилась совместно с руководителем, а проведение численных расчетов проведено автором. Результаты численного моделирования обсуждались непосредственно с научным руководителем. В работах, опубликованных с соавторами, автору принадлежат результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах.

**Апробация работы.** Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на конференции "Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященной 50-летию полета Ю.А. Гагарина и 90-летию со дня рождения основателя и первого директора НИИ ПММ ТГУ А.Д. Колмакова (Томск, 2011), на Energetic Materials: 43<sup>th</sup> International Annual Conference of ICT (Karlsruhe, Federal Republic of Germany, 2012), на Energetic Materials: Characterization and Modeling of Ignition Process, Reaction Behavior and Performance: 44<sup>th</sup> International Annual Conference of ICT (Karlsruhe, Federal Republic of Germany, 2013), на 50-той юбилейной Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс» (Новосибирск, 2012), на 3-rd International congress on radiation physics, high current electronics, and modification of materials (Tomsk, Russia, 2012), на 4-rd International congress on radiation physics, high current

electronics, and modification of materials (Tomsk, Russia, 2014), на XIII Международной школе-семинаре "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" (Барнаул, 2014), на 15th International Detonation Symposium (San Francisco, CA, 2014), на третьей международной конференция по горению и детонации «Мемориал Я. Б. Зельдовича» (Москва, 2014), на 5th International Congress on High Current Electronics, Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows and Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter (Tomsk, Russia, 2016), на Proceedings of the 20th Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials (Czech Republic, Pardubice, 2017).

**Публикации.** По теме диссертации опубликованы 18 работ, в том числе 11 статей опубликованы в научных журналах из списка ВАК, получено одно свидетельство на программу для вычислительных машин.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 139 наименований. Работа изложена на 131 страницах, содержит 6 таблиц и 83 рисунка.

### Основное содержание работы.

**Во введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, определены научная новизна полученных результатов и их практическая значимость, представлены защищаемые положения, достоверность и апробация работы.

**В первой главе** приводится обзор имеющихся литературных данных по структуре, свойствам, механизмам горения и термического разложения ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ. Приведены результаты экспериментов по иницированию ТЭНа лазерными импульсами нано- и миллисекундной длительности, а также рассмотрены существующие точки зрения на механизм иницирования органических взрывчатых веществ лазерным импульсом.

**Во второй главе** рассмотрена тепловая модель иницирования органических взрывчатых веществ с открытой поверхности лазерным импульсом наносекундной длительности:

$$\rho[c + H_f \delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \alpha(1 - R_1) I_0(t) \exp\left(-\alpha z - \frac{r^2}{r_0^2}\right) \frac{[1 + R_2 \exp(2\alpha(z - L))]}{[1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha L)]} + \rho Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (1)$$

с начальными и граничными условиями

$$T(r, z, 0) = T_0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R_0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=L} = 0, \quad (2)$$

$$I_0(t) = \frac{W}{6\tau_m} (4t/\tau_m)^4 \exp(-4t/\tau_m),$$

где  $T_0$ ,  $T$  – начальная и текущая температуры образца;  $T_f$  – температура плавления;  $\delta(T - T_f)$  – дельта функция;  $\lambda$ ,  $c$ ,  $\rho$  – теплопроводность,

теплоемкость и плотность образца;  $H_f$  – удельная теплота плавления на единицу массы вещества;  $Q$  – тепловой эффект реакции на единицу массы вещества;  $I_0(t)$  – плотность потока энергии лазерного импульса;  $\alpha$  – коэффициент поглощения светового пучка кристаллом;  $Z$  – частотный фактор;  $E$  – энергия активации скорости химической реакции;  $R$  – газовая постоянная;  $r_0$  – радиус лазерного пучка.

Получен критерий зажигания энергетических материалов лазерным импульсом, учитывающий многократное отражение светового потока гауссовой формы по сечению пучка от противоположных сторон образца:

$$z_1 \rho Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT_m}\right) = \lambda \frac{\Delta T_m}{F(\gamma)} \left\{ \alpha \operatorname{th}\left[\alpha L - \frac{1}{2} \ln(R_2 F^2(\gamma))\right] + \frac{4z_1}{r_0^2} \right\}. \quad (3)$$

$$W^* = \frac{[1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha L)]}{[1 + R_1 \exp(-2\alpha L)]} \cdot \left[ \frac{c\rho\Delta T_m}{\alpha(1 - R_1)} + \frac{\rho H_f}{\alpha(1 - R_1)} \right], \quad (4)$$

где  $F(\gamma) = (1 + \gamma)/(1 - \gamma T_0 / \Delta T_m)$ ,  $\gamma = RT_m / E$ ,  $z_1$  – ширина реакционного слоя.

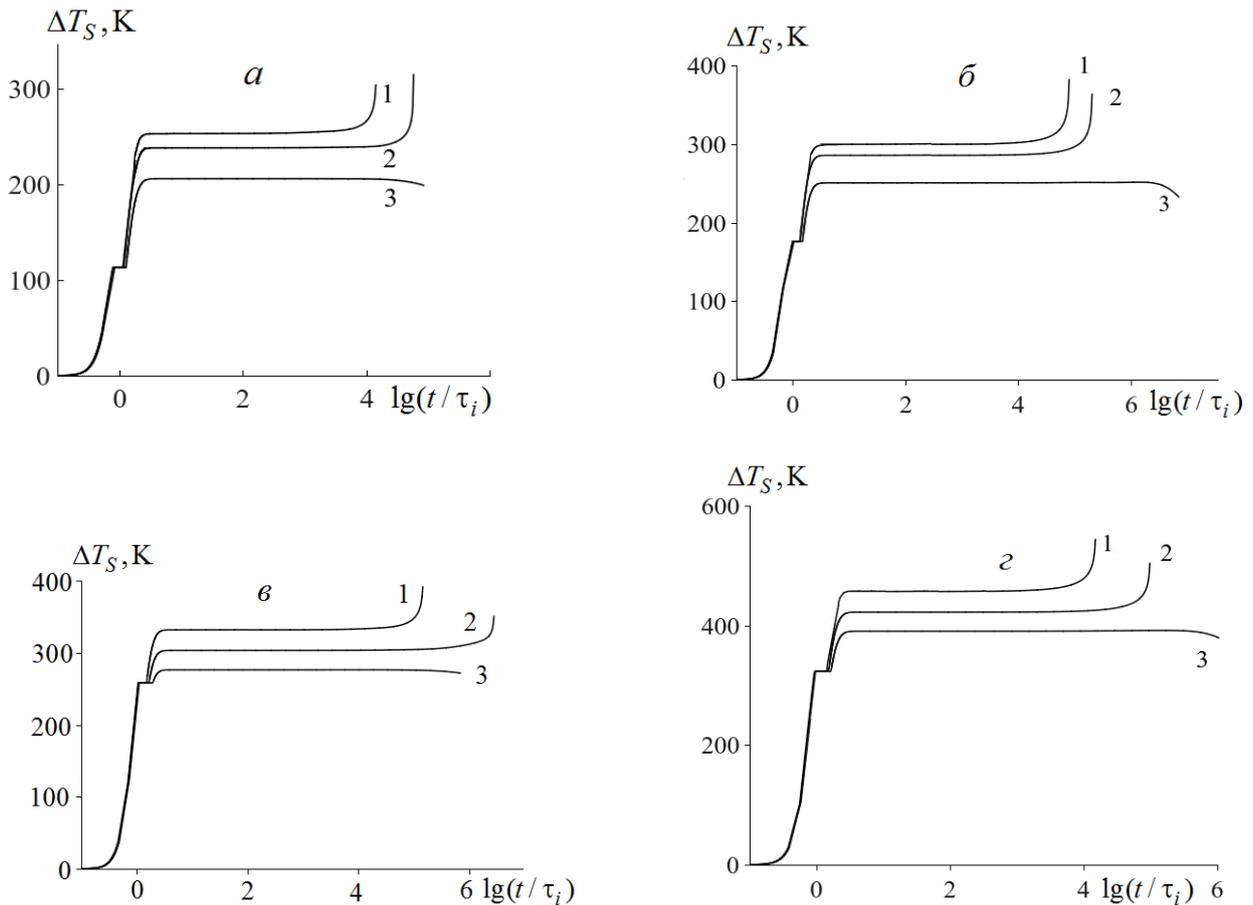


Рис. 1. Зависимость температуры  $\Delta T_S$  на поверхности от времени при различных плотностях энергии лазерного импульса наносекундной длительности при радиусе пучка  $r_0 = 0.25$  мм в ТЭНе (а) ( $W = 1.5 \cdot 10^8$  (1),  $1.4 \cdot 10^8$  (2),  $1.3 \cdot 10^8$  Дж/м<sup>2</sup> (3)); гексогене (б) ( $W = 1.55 \cdot 10^8$  (1),  $1.5 \cdot 10^8$  (2),  $1.4 \cdot 10^8$  Дж/м<sup>2</sup> (3)); октогене (в) ( $W = 1.8 \cdot 10^8$  (1),  $1.7 \cdot 10^8$  (2),  $1.6 \cdot 10^8$  Дж/м<sup>2</sup> (3)); ТАТБ (г) ( $W = 2.2 \cdot 10^8$  (1),  $2.1 \cdot 10^8$  (2),  $2 \cdot 10^8$  Дж/м<sup>2</sup> (3)).

На рис. 1 и рис. 2 и в таблице представлены результаты численного решения уравнений (1), (3) и (4). Как видно из таблицы, результаты определения критической энергии из решения уравнения теплопроводности (1) и из критерия (уравнения (3) и (4)) достаточно хорошо согласуются между собой. Критическая температура зажигания взрывчатых веществ в области слабого поглощения определяется радиальным теплообменом.

Таблица. Критические температуры, плотности энергии зажигания ВВ лазерным импульсом, плотности и доли энергии лазерного импульса, затраченные на плавление ВВ

ВВ	$T_m, \text{ К}$	$W^*, 10^8 \text{ Дж/м}^2$		$W_f, 10^8 \text{ Дж/м}^2$	$\frac{W_f}{W^*}$
		расчет	критерий		
ТЭН	513.4	1.35	1.26	0.53	0.46
Гексоген	538.9	1.42	1.34	0.66	0.48
Октоген	589.3	1.72	1.63	0.57	0.34
ТАТБ	683.4	2.07	1.95	0.81	0.42

Из таблицы видно: процесс плавления ВВ существенно повышает критическую плотность энергии лазерного импульса; наиболее чувствительным к воздействию лазерного импульса является ТЭН, а наиболее термостойким является ТАТБ (табл. 1). Из рис. 2 видно, что результаты расчетов для ТЭНа хорошо согласуются с экспериментом [1].

На рис. 3 приведены результаты расчета критической энергии зажигания  $E^*$  ТЭНа в зависимости от коэффициента отражения тыльной поверхности образца. Коэффициент отражения тыльной поверхности образца менялся от френелевского ( $R_2 = 0.036$ ) до коэффициента отражения металла ( $R_2 = 0.95$ ). Как видно из рисунка, чем больше коэффициент отражения  $R_1$ , тем в более широких пределах можно регулировать энергию зажигания  $E^* = \pi r_0^2 W^*$ , изменяя коэффициент отражения  $R_2$ .

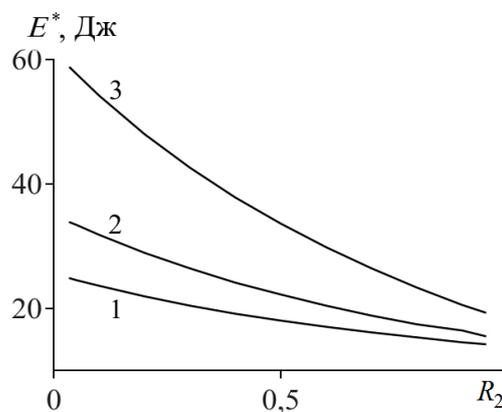
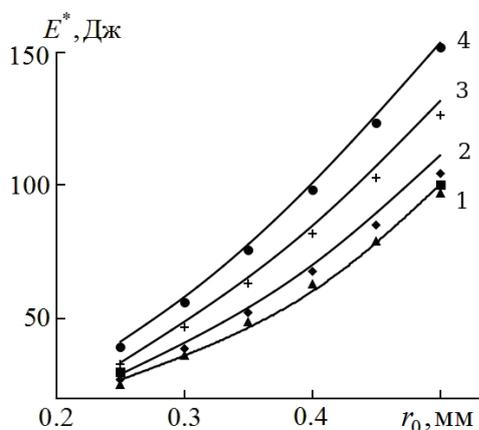


Рис. 2. Зависимость пороговой энергии инициирования лазерным импульсом ТЭНа (1), гексогена (2), октогена (3) и ТАТБ (4) от радиуса светового пучка: линии – численный расчет; точки ( $\blacktriangle$ ,  $\blacklozenge$ ,  $+$ ,  $\bullet$ ) – расчет по критерию (формулы (3) и (4));  $\blacksquare$  – эксперимент [1].

Рис. 3. Зависимость критической энергии зажигания ТЭНе от коэффициента отражения  $R_2$  тыльной поверхности образца при  $r_0 = 0.25$  мм и  $R_1 = 0.036$  (1), 0,3 (2) и 0,6 (3).

В работе рассмотрено влияние реакции автокатализа на время задержки зажигания ТЭНа:

$$\frac{d\eta}{dt} = k_1(1-\eta) + k_2\eta(1-\eta), \quad k_1 = Z \exp(-E/RT), \quad k_2 = Z_c \exp(-E_c/RT).$$

Согласно рис. 4 и рис. 5, реакция автокатализа снижает время задержки зажигания ТЭНа. Чем меньше энергия активации стадии автокатализа, тем меньше время задержки зажигания. Степень превращения по окончании лазерного импульса порядка  $10^{-7}$ , а к моменту зажигания порядка  $10^{-2}$ . Кривая 4 на рис. 4 для температуры практически согласуется с кривой 2 для температуры, изображенной на рис. 1а. Следовательно, выгорание не влияет на порог зажигания ВВ, имеющих большую энергию активации.

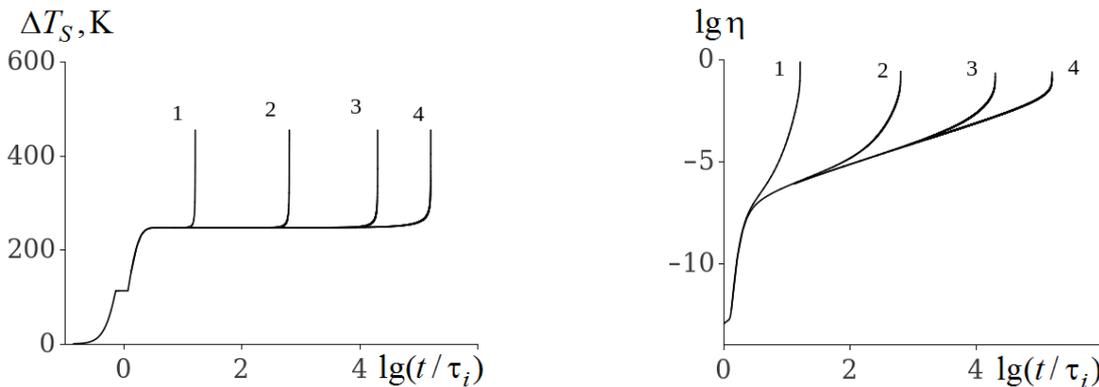


Рис. 4. Зависимость температуры  $\Delta T_s$  в центре поверхности ТЭНа от времени при значениях энергии активации стадии автокатализа  $E_c = 59,89$  (1),  $77,19$  (2)  $96,49$  (3) и  $115,79$  (4) кДж/моль.

Рис. 5. Зависимость кинетики степени превращения в центре поверхности  $\eta$  ТЭНа при значениях энергии активации стадии автокатализа  $E_c = 59,89$  (1),  $77,19$  (2)  $96,49$  (3) и  $115,79$  (4) кДж/моль.

Получены выражения для степени превращения от реакций первого порядка  $\Delta\eta_1$  и автокатализа  $\Delta\eta_2$  на изотермическом участке кинетической кривой при условии, что  $\Delta\eta_1, \Delta\eta_2 \ll 1$ :

$$\Delta\eta_1 = k_1 t, \quad \Delta\eta_2 = \frac{k_1}{k_2} [\exp(k_2 t) - 1] - k_1 t.$$

**В третьей главе** проведено численное моделирование зажигания ВВ (ТЭН, октоген, гексоген, ТАТБ) лазерным импульсом миллисекундной длительности в двухслойной системе оксид меди-ВВ:

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2} + \alpha(1 - R_1) I(t) \exp(-\alpha z) \frac{[1 + R_2 \exp(2\alpha(z - h_1))]}{[1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha h_1)]}, \quad (5)$$

$$\rho_2 [c_2 + H_f \delta(T_2 - T_f)] \frac{\partial T_2}{\partial t} = \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2} + \rho_2 Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT_2}\right) \quad (6)$$

с начальными и граничными условиями:

$$T_1(z, 0) = T_2(z, 0) = T_0, \quad \frac{\partial T_1(0, t)}{\partial z} = \frac{\partial T_2(h_1 + h_2, t)}{\partial z} = 0, \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1(h_1, t)}{\partial z} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(h_1, t)}{\partial z}. \quad (7)$$

Здесь приняты следующие обозначения:  $h_1$ ,  $T_1$  – толщина и температура пленки оксида меди;  $h_2$ ,  $T_2$  – толщина и температура ВВ;  $T_0$  – начальная температура двухслойной системы – оксид меди и ВВ;  $\lambda_1$ ,  $c_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $c_2$  – коэффициенты теплопроводности и удельные теплоемкости оксида меди и ВВ;  $\rho_1$ ,  $\rho_2$  – плотности оксида меди и ВВ;  $R_1$ ,  $R_2$  – коэффициенты отражения светового потока внешней и тыльной поверхностями оксида меди;  $I(t)$  – интенсивность светового потока. Зависимость интенсивности светового потока от времени задавалось в виде прямоугольного импульса:

$$I(t) = W_{\max} / \tau_i = I_0, \quad \text{при } \tau_i \geq t \geq 0; \quad I(t) = 0, \quad \text{при } t > \tau_i, \quad (8)$$

где  $W_{\max} = 72.2 \cdot 10^4$  Дж/м<sup>2</sup> – плотность энергии лазерного импульса;  $\tau_i = 20 \cdot 10^{-3}$  с – длительность лазерного импульса.

На рис. 6 представлены результаты численных расчетов динамики распределения температуры в различные моменты времени в поглощающей лазерное излучение пленке (I), и в ТЭНе (II) при экспериментальном значении  $\alpha = 1750$  см<sup>-1</sup> для оксида меди. Подобные расчеты проведены для гексогена, октогена и ТАТБ. На рис. 7 представлены результаты расчетов зависимости плотности энергии зажигания ВВ миллисекундным лазерным импульсом прямоугольной формы длительностью 20 мс от толщины пленки оксида меди в динамическом режиме.

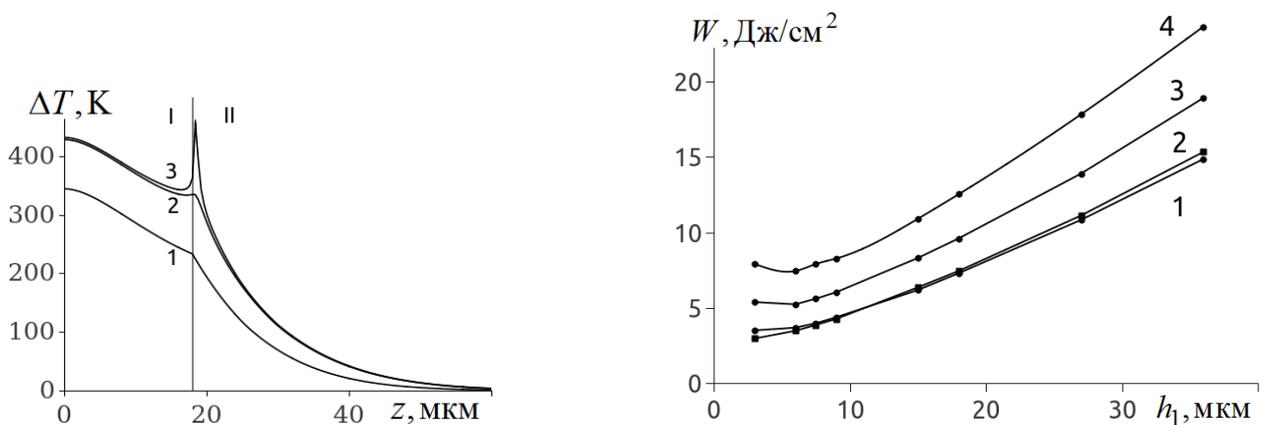


Рис. 6. Динамика распределения температуры в пленке оксида меди (I) и ТЭНе (II) при толщине пленки  $h_1 = 18$  мкм и времени  $t = 1.5$  (1), 2.0 (2) и 2.0208 мс (3).

Рис. 7. Зависимость плотности энергии зажигания ВВ лазерным импульсом от толщины оксидной пленки: 1-ТЭН; 2-гексоген; 3-октоген; 4-ТАТБ.

Расчеты показали, что зависимость плотности энергии лазерного импульса от толщины пленки оксида меди имеют вид кривых с минимумом. Данный эффект обусловлен тем, что чем меньше толщина пленки, тем больше световой энергии выходит из пленки. Поэтому, чем тоньше нагреваемая лазерным излучением пленка, тем больше необходимо закачать энергии лазерного излучения в пленку для нагрева ее до температуры зажигания. В случае толстой

пленки необходима дополнительная энергия и соответственно время для прогрева ее холодной части до температуры зажигания за время действия лазерного импульса. Из рис. 7 видно, что плотности энергии  $W^*$  зажигания для ТЭНа и гексогена близки. Следовательно, гексоген, как и ТЭН можно инициировать волоконным иттербийевым лазером.

На рис. 8 представлены результаты численных расчетов динамики распределения температуры по окончании лазерного импульса с плотностью энергии  $W^* = 7.65 \text{ Дж/см}^2$  в пленке CuO, толщиной 9 мкм и в ТЭНе. Согласно рис. 8 зажигание ВВ происходит на расстоянии несколько большем от границы раздела оксид меди-ВВ. Это обусловлено задержкой зажигания по окончании лазерного импульса.

На рис. 9 представлены результаты расчетов зависимости минимальной энергии зажигания взрывчатых веществ по окончании миллисекундного лазерного импульса в двухслойной системе от толщины поглощающей пленки. Как видно из рис. 9 энергия от толщины растет линейно. Плотность критической энергии по окончании лазерного импульса возрастает в последовательности гексоген, ТЭН, октоген, ТАТБ.

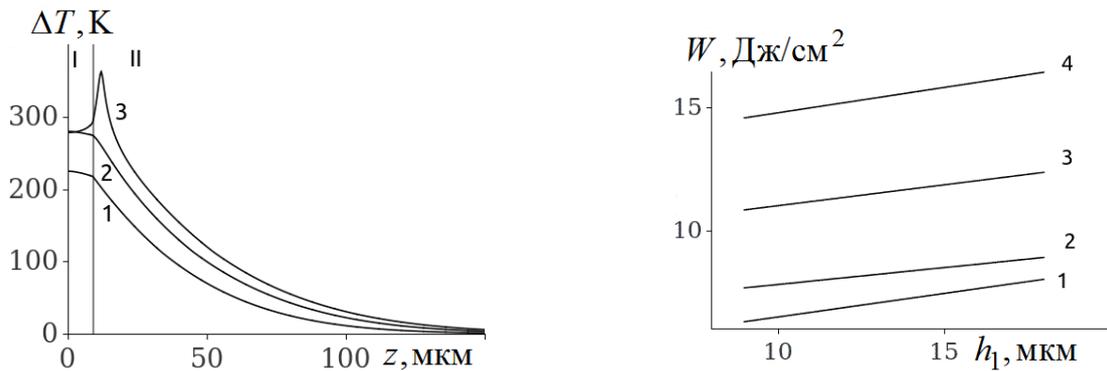


Рис. 8. Динамика распределения температуры в пленке CuO (I) и ТЭНе (II) при толщине пленки  $h_1 = 9 \text{ мкм}$  и времени  $t = 15.0$  (1),  $20.0$  (2) и  $23.15 \text{ мс}$  (3).

Рис. 9. Зависимость минимальной плотности энергии зажигания взрывчатых веществ по окончании миллисекундного лазерного импульса в двухслойной системе от толщины поглощающей пленки 1-гексоген; 2-ТЭН; 3-октоген; 4-ТАТБ.

**В четвертой главе** проведено численное моделирование зажигания ВВ (ТЭН, октоген, гексоген, ТАТБ) лазерным импульсом длительностью 20 мс в трехслойной системе стекло-оксид меди-ВВ:

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T_1}{\partial t} = \lambda_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial z^2}, \quad (10)$$

$$\rho_2 c_2 \frac{\partial T_2}{\partial t} = \lambda_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial z^2} + \alpha(1 - R_{12}) I_0(t) \exp[-\alpha(z - h_1)] \times \\ \times \frac{[1 + R_{23} \exp(2\alpha(z - h_1 - h_2))]}{[1 - R_{12} R_{23} \exp(-2\alpha h_2)]}, \quad (11)$$

$$\rho_3[c_3 + H_f \delta(T_3 - T_f)] \frac{\partial T_3}{\partial t} = \lambda_3 \frac{\partial^2 T_3}{\partial z^2} + \rho_3 Q Z \exp\left(-\frac{E}{RT_3}\right) \quad (12)$$

с начальными и граничными условиями

$$T_1(z, 0) = T_2(z, 0) = T_3(z, 0) = T_0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial T_1(0, t)}{\partial z} = \frac{\partial T_3(h_1 + h_2 + h_3, t)}{\partial z} = 0, \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1(h_1, t)}{\partial z} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(h_1, t)}{\partial z}, \quad T_1(h_1, t) = T_2(h_1, t),$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2(h_1 + h_2, t)}{\partial z} = \lambda_3 \frac{\partial T_3(h_1 + h_2, t)}{\partial z}, \quad T_2(h_1 + h_2, t) = T_3(h_1 + h_2, t). \quad (14)$$

Здесь  $h_1$ ,  $T_1$  – толщина и температура стеклянной пластинки;  $h_2$ ,  $T_2$  – толщина и температура окисной пленки;  $h_3$ ,  $T_3$  – толщина и температура ВВ;  $T_0$  – начальная температура трехслойной системы: стекло – оксид меди – ВВ;  $\lambda_1$ ,  $c_1$ , – коэффициент теплопроводности и удельная теплоемкость стекла;  $\lambda_2$ ,  $c_2$ , – коэффициент теплопроводности и удельная теплоемкость оксида меди;  $\lambda_3$ ,  $c_3$  – коэффициент теплопроводности и удельная ВВ;  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ ,  $\rho_3$  – плотности стекла, оксида меди и ТЭНа соответственно;  $R_{12}$ ,  $R_{23}$  – коэффициенты отражения светового потока от границы стекло – оксид и оксид – ВВ соответственно.

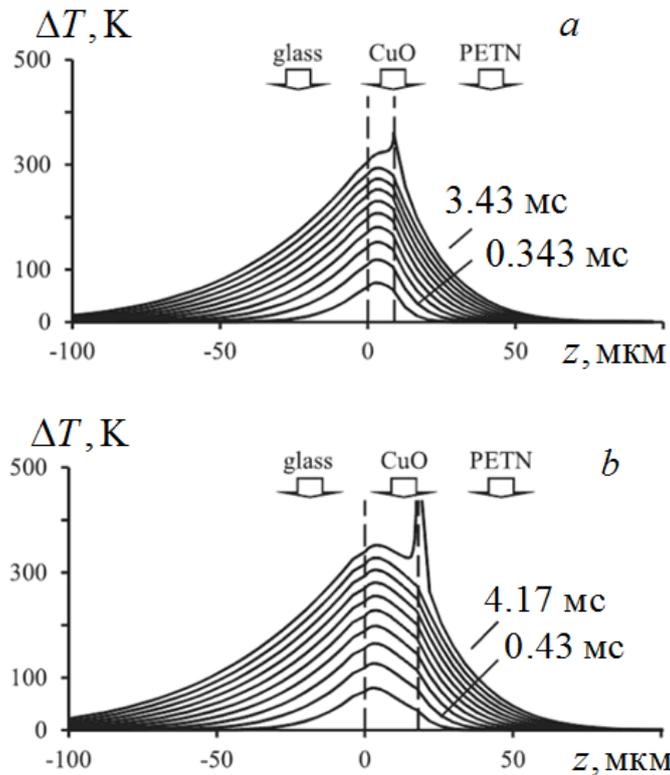


Рис. 10. Динамика распределения температуры в трехслойной системе стекло-оксид меди-ТЭН в разные моменты воздействия. *a* – толщина CuO  $h = 9$  мкм, *b* - толщины CuO  $h = 18$  мкм.

Расчеты показали, что зажигание ТЭНа происходит вблизи границы раздела поглощающая свет пленка оксида меди-ВВ. Зажигание ТЭНа горячей

«стенкой» происходит до окончания лазерного импульса, т.е. в режиме линейного нагрева.. Как видно из рис. 10 количество тепла в стеклянной пластинке заметно больше чем в ТЭНе.

На рис. 11 приведены результаты экспериментов и численному моделированию зажигания ТЭНа иттербиевым волоконным лазером. Как видно из данного рисунка, при толщинах пленки оксида меди меньше 14 мкм результаты численных расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментом. Однако при толщинах более 14 мкм начинает увеличиваться расхождение между расчетами и экспериментом. Это обусловлено эндотермической реакцией восстановления  $\text{CuO}$ .

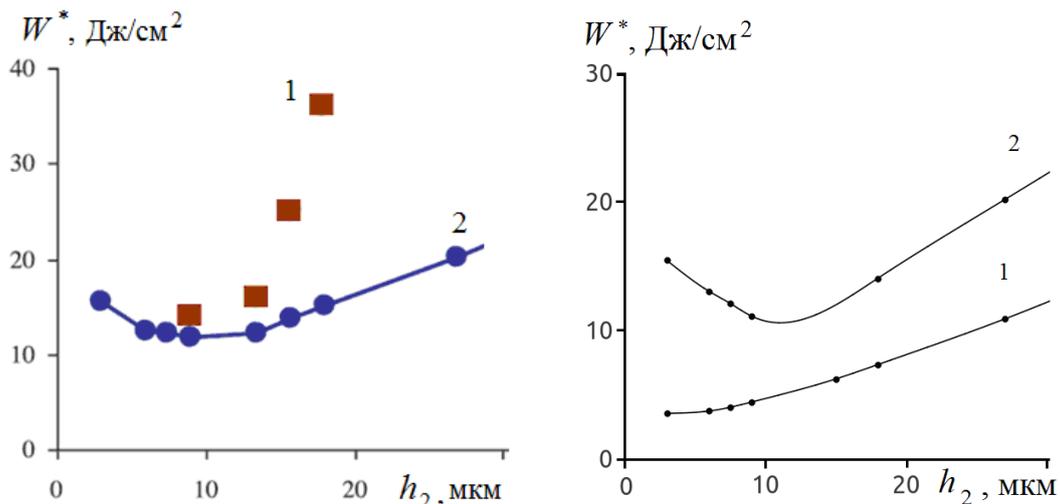


Рис. 11. Зависимость критической плотности энергии иницирования ТЭНа от толщины пленки  $\text{CuO}$ : 1 – эксперимент, 2 – расчет.

Рис. 12. Зависимость критической плотности энергии иницирования ТЭНа от толщины пленки  $\text{CuO}$ : 1 – двухслойная система: пленка оксида меди-ТЭН, 2 – трехслойная система: стекло-пленка оксида меди-ТЭН.

Расчеты показали, что и в трехслойной системе стекло-пленка оксида меди-ВВ, как и в двухслойной системе, наблюдается минимум на зависимости критической плотности энергии от толщины, поглощающей лазерное излучение пленке (рис. 11, кривая 2,). Минимум плотности энергии наблюдается при  $h_2 \sim 12$  мкм. Как видно из рис. 12, причина появления минимума в трехслойной системе совершенно другая, чем в двухслойной. Появление минимума обусловлено малым временем теплоотвода оксидной пленки толщиной  $h_2 < 12$  мкм в стеклянную пластику. Кроме того, теплоотвод в стеклянную пластинку примерно в два раза повышает порог зажигания ТЭНа.

На рис. 13 представлены результаты численных расчетов динамики распределения температуры в различные моменты времени в стекле (I), в поглощающей лазерное излучение пленке (II), толщиной 18 мкм и в гексогене (III). Как видно из рис. 13 зажигание ВВ происходит на небольшом расстоянии от границы раздела оксид меди – ВВ.

На рис. 14 представлены результаты расчетов зависимости плотности энергии зажигания  $W^*$  ТЭНа (1), гексогена (2), октогена (3) и ТАТБ (4) мили-

секундным лазерным импульсом Положение минимумов на зависимостях  $W^* = f(h_2)$  для данных ВВ примерно одинаково и расположено при  $h_2 \sim 10$  мкм. Согласно расчетам, пороговая плотность энергии зажигания лазерным импульсом органических ВВ в динамическом режиме нагрева в трехслойной системе возрастает в последовательности ТЭН, гексоген, октоген и ТАТБ.

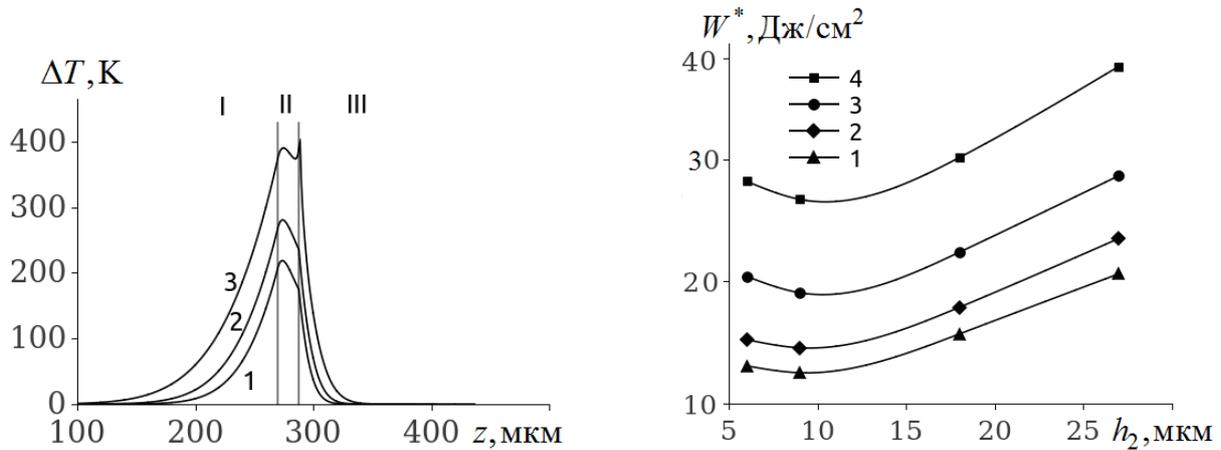


Рис. 13. Динамика распределения температуры в стекле (I), пленке CuO (II) и гексогене (III) при толщине пленки  $h_2 = 18$  мкм и времени  $t = 1,76 \cdot 10^{-3}$  (1),  $2,57 \cdot 10^{-3}$  (2),  $4,23 \cdot 10^{-3}$  с (3).

Рис. 14. Зависимость плотности энергии зажигания ВВ лазерным импульсом от толщины пленки оксида меди: 1-ТЭН; 2-гексоген; 3-октоген; 4-ТАТБ.

На рис. 15 представлены результаты численных расчетов динамики распределения температуры в различные моменты времени в стекле (I), в пленке оксида меди (II) и ТЭНе (III) по окончании лазерного импульса. Как видно из рис. 15 зажигание ВВ происходит на расстоянии несколько большем от границы раздела оксид меди – ВВ. Расчеты показали, что тем толще пленка оксида меди, нанесенная на ВВ, тем больше время задержки зажигания. Это обусловлено тем, что по окончании лазерного импульса температура на границе оксид меди – ВВ для толстой пленки меньше чем для тонкой.

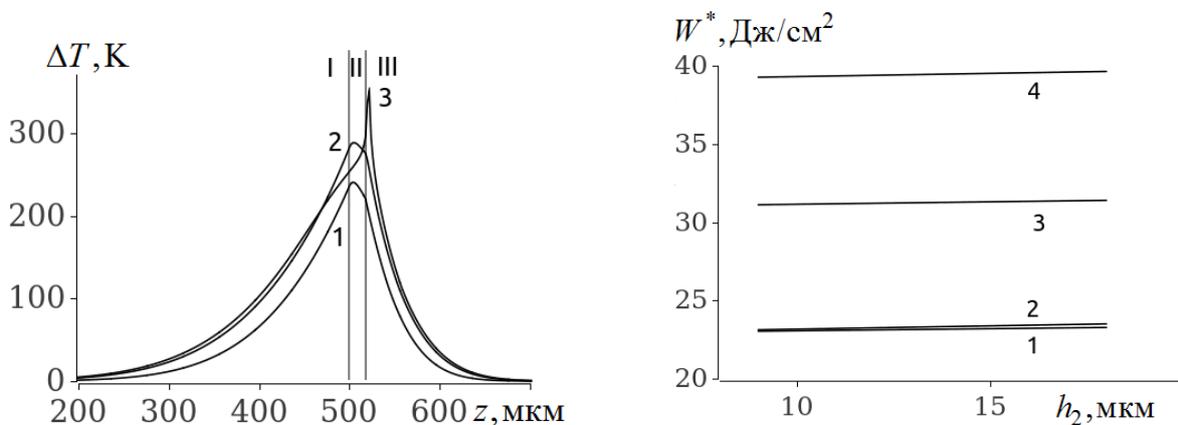


Рис. 15. Динамика распределения температуры в стекле (I), пленке CuO (II) и ТЭНе (III) при толщине пленки  $h_1 = 9$  мкм и времени  $t = 15,0 \cdot 10^{-3}$  (1),  $20,0 \cdot 10^{-3}$  (2),  $20,58 \cdot 10^{-3}$  с (3).

Рис. 16. Зависимость минимальной плотности энергии зажигания взрывчатых веществ по окончании миллисекундного лазерного импульса в трехслойной системе от толщины поглощающей пленки: 1-ТЭН; 2- гексоген; 3-октоген; 4-ТАТБ.

На рис. 16 представлены результаты расчетов зависимости минимальной плотности энергии зажигания взрывчатых веществ по окончании миллисекундного лазерного импульса в трехслойной системе от толщины поглощающей пленки оксида меди.

Расчеты показали, что зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ по окончании лазерного импульса практически не зависит от толщины пленки оксида (рис. 16, прямые 1 – 4). Таким образом имеем следующую рядовую зависимость пороговой плотности энергии зажигания ВВ по окончании миллисекундного лазерного импульса: ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ.

### Основные результаты и выводы

1. Получены выражения для расчета критической температуры и плотности пороговой энергии зажигания конденсированных взрывчатых веществ лазерным импульсом малой длительности, учитывающие плавление взрывчатых веществ и многократное отражение светового пучка.
2. Разработаны программы для решения задач зажигания ВВ лазерным импульсом: в цилиндрической системе координат с учетом многократного отражения светового пучка; в двухслойной системе: пленка оксида меди-ВВ; в трехслойной системе: стекло-пленка оксида меди-ВВ.
3. Критическая температура зажигания взрывчатых веществ с открытой поверхностью в области слабого поглощения определяется радиальным теплоотводом. Процесс плавления ВВ существенно повышает критическую плотность энергии лазерного импульса. Наименьший порог зажигания лазерным импульсом наносекундной длительности при одинаковых коэффициентах отражения и поглощения света имеет ТЭН, а наибольший ТАТБ. Результаты расчетов для ТЭНа согласуются с экспериментом, что доказывает зажигание ВВ поглощенной энергией лазерного импульса, а не оптическим пробоем. Реакция автокатализа уменьшает время задержки зажигания ВВ. Получена формула для оценки вклада реакции автокатализа в степень разложения ВВ.
4. При зажигании ВВ лазерным импульсом миллисекундной длительности в двухслойной системе: пленка оксида меди-ВВ, динамическое время задержки зажигания ВВ имеет минимум в зависимости от толщины пленки, поглощающей световой пучок. Появление минимума обусловлено тем, что чем меньше толщина пленки, тем больше световой энергии выходит из неё вследствие меньшего поглощения. Для толстых пленок необходима дополнительная энергия и соответственно время для прогрева ее холодной части до температуры зажигания за время действия лазерного импульса.
5. Установлена рядовая зависимость зажигания ВВ как в режиме динамического нагрева прямоугольным лазерным импульсом, так и по окончании лазерного импульса для двухслойной системы: пленка оксида меди-ВВ. Плотность критической энергии зажигания в динамическом режиме нагрева лазерным импульсом для пленок оксида меди толщиной более 10 мкм

возрастает линейно от толщины пленки в последовательности ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ. Минимальная плотность критической энергии по окончании лазерного импульса возрастает линейно от толщины пленки в последовательности гексоген, ТЭН, октоген, ТАТБ.

6. При зажигании ВВ лазерным импульсом миллисекундной длительности в трехслойной системе: стекло-пленка оксида меди-ВВ, динамическое время задержки зажигания больше, чем в двухслойной системе и имеет минимум в зависимости от толщины пленки. Это обусловлено тем, что чем меньше толщина пленки оксида меди, тем быстрее она отдает накопленное тепло в стеклянную пластинку. Для пленки толщиной более 12 мкм необходима дополнительная энергия и соответственно время для прогрева ее холодной части до температуры зажигания за время действия лазерного импульса. Плотность критической энергии зажигания ВВ лазерным импульсом возрастает в последовательности ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ.

7. Результаты численного моделирования зажигания ТЭНа, поглощающей лазерное излучение пленкой оксида меди до толщин порядка 14 мкм согласуется с экспериментом, что доказывает тепловой механизм зажигания ВВ лазерным импульсом в трехслойной системе. Несовпадение результатов расчетов с экспериментом при больших толщинах пленки оксида меди обусловлено не учетом в модели эндотермической реакции восстановления оксидной пленки.

8. Минимальная энергия зажигания ТЭНа, гексогена, октогена и ТАТБ по окончании лазерного импульса миллисекундной длительности в трехслойной системе практически не зависит от толщины оксидной пленки. Это обусловлено значительным теплоотводом в стеклянную пластинку. Плотность критической энергии зажигания ВВ лазерным импульсом возрастает в последовательности ТЭН, гексоген, октоген, ТАТБ.

### **Список основных публикаций по теме диссертации**

1. Долгачев, В.А. Моделирование зажигания органических взрывчатых веществ лазерным импульсом наносекундной длительности в области слабого поглощения / В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт // Физика горения и взрыва. – 2017. – Т. 53. – № 2. – С. 98-106. (Dolgachev, V. A. Modeling of Ignition of Organic Explosives by a Laser Pulse in the Weak Absorption Range / V.A. Dolgachev, E.V. Duginov, A. V. Khanefit // Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 2017. – Vol. 53. – No. 2. – pp. 211-218.)
2. Mitrofanov, A. Sensitization of PETN to laser radiation by opaque film coating / A. Mitrofanov, A. Zverev, N. Ilyakova, A. Krechetov, A. Khanefit, V. Dolgachev // Combustion and Flame. – 2016. – V. 172. – pp. 215-221.
3. Ханефт, А.В. Влияние толщины и коэффициента поглощения пленки оксида меди на время задержки зажигания тэна лазерным импульсом / А.В. Ханефт, В.А. Долгачев, А.С. Зверев, А.Ю. Митрофанов // Физика горения и взрыва. – 2016. – Т. 52. – № 1. – С. 103-108. (Khanefit, A.V. Influence of the Thickness and Absorption Coefficient of a Copper Oxide Film on the Ignition

- Delay of PENT by a Laser Pulse / A.V. Khanef, V.A. Dolgachev, A.S. Zverev, A.Yu. Mitrofanov // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2016. – Vol. 52. – No. 1. – pp. 91-95.)
4. Ханефт, А.В. Моделирование инициирования ТЭНа лазерным импульсом наносекундной длительности в области слабого поглощения / А.В. Ханефт, В.А. Долгачев // *Физика горения и взрыва*. – 2014. – Т. 50. – № 1. – С. 115-123. (Khanef, A.V. Simulation of Initiation of PETN by a Nanosecond Laser Pulse in the weak Absorption region / A.V. Khanef, V.A. Dolgachev // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. – 2014. – Vol. 50. – No. 1. – pp. 105-112.)
  5. Ханефт, А.В. Критерии зажигания энергетических материалов лазерным и электронным импульсами / А.В. Ханефт, В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, Г.А. Иванов // *Вестник КемГУ*. – 2013. – Т. 3. – № 3 (55). – С. 31-39.
  6. Долгачев, В.А. Моделирование инициирования тэна лазерным импульсом наносекундной длительности / В.А. Долгачев, А.В. Ханефт // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2012. – Т. 14. – № 4. – С. 1-8.
  7. Долгачев, В.А. Моделирование инициирования ТЭНа лазерным импульсом в области прозрачности образца / В.А. Долгачев, А.В. Ханефт // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2012. – №3. – С. 405-410.
  8. Долгачев, В.А. Критерий инициирования лазерным импульсом взрывчатых веществ с температурой плавления ниже температуры зажигания / В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт // *Ползуновский вестник*. – 2011. – № 4-1. – С. 195-199.
  9. Zverev, Anton. “Hot plate” laser ignition of the condensed energetic material / Anton Zverev, Anton Anatoly Mitrofanov, Alexander Khanef, Natalya Ilyakova, Alexander Krechetov and Vadim Dolgachev // *Proceedings of the 20th Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials*. Czech Republic, Pardubice, April 26 – 28, 2017. – pp. 1161-1173.
  10. Ханефт, А.В. Влияние толщины и коэффициента поглощения пленки на порог зажигания тэна лазерным импульсом / А.В. Ханефт, В.А. Долгачев, А.С. Зверев, А.Ю. Митрофанов // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2014. – Т. 57. – № 12-3. – С. 208-212
  11. Долгачев, В.А. Моделирование зажигания органических взрывчатых веществ коротким лазерным импульсом / В.А. Долгачев, А.В. Ханефт // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2014. – Т. 57. – № 12-3. – С. 122-126.
  12. Khanef A.V., Duginov E.V., Dolgachev V.A., Ivanov G.A. The criterion of initiation for explosive materials with the fusing temperature that is less than the ignition temperature by the short laser beam // *Известия вузов. Физика*. 2012. Т. 55. – №11-3. – С. 66-70.
  13. Khanef, A.V. Simulation of initiation PETN laser pulse in the region of weak absorption / A.V. Khanef, V.A. Dolgachev // *Energetic Materials: Characterization and Modeling of Ignition Process, Reaction Behavior and Performance*. – 2013. – pp. 7-1 – 7-11.

14. Khanef, A.V. The criterion of initiation for explosive materials with the fusing temperature that is less than the ignition temperature by the short laser impulse / A.V. Khanef, E.V. Duginov, V.A. Dolgachev, G.A. Ivanov // *Energetic Materials: Modelling, Simulation and Characterisation of Pyrotechnics, Propellants and Explosives*. – 2011. – pp. 74-1 – 74-11.
15. Ханефт, А. В. DWUH-SLOIYKA / А. В. Ханефт, В. А., Долгачев // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, № 2016618116 от 21 июля 2016.

### Цитируемая литература

1. Быхало, А.И. Инициирование ТЭНа мощным лазерным излучением / А.И. Быхало, Е.В. Жужукало, Н.Г. Ковальский, А.Н. Коломыйский, В.В. Коробов, А.Д. Рожков, А.И. Юдин // *Физика горения и взрыва*. – 1985. – Т. 21. – № 4. – С. 110-113
2. Kunihito Nagayama, Pulse laser ablation of ground glass surface and initiation of PETN powder / Kunihito Nagayama, Yuriko Kotsuka, Motonao Nakahara, Shiro Kubota. // *Science and Technology of Energetic Materials*. – 2005. – Vol. 66. – № 6. – P. 416-420.
3. Таржанов, В.И. Лазерное инициирование ТЭНа / В.И. Таржанов, А.Д. Зинченко, В.И. Сдобнов, Б.Б. Токарев, А.И. Погребов, А.А. Волкова // *Физика горения и взрыва*. – 1996. – Т. 32, – № 4. – С. 113-119.
4. Таржанов, В.И. Инициирование тэна с помощью взрываеваемой светом металлической пленки / В.И. Таржанов, А.Д. Зинченко, Б.М. Смирнов, А.И. Погребов, В.И. Сдобнов, Б.Б. Токарев // *Физика горения и взрыва*. – 1996. – Т. 32. – № 2. С. 111-116.
5. Зверев, А.С. Взрывное разложение тетранитрата пентаэритрита и углеродсодержащих композитов на его основе при инициировании лазерными импульсами наносекундной и миллисекундной длительности: автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. ф.-м.н. / А.С. Зверев. – Кемерово, 2015. – 16 с.