

КРИТЕРИЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ТЕМПЕРАТУРОЙ ПЛАВЛЕНИЯ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ЗАЖИГАНИЯ

В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт

Получен критерий инициирования коротким лазерным импульсом взрывчатых веществ с температурой плавления ниже температуры зажигания. Критерий хорошо согласуется с результатами численного решения уравнения теплопроводности в цилиндрической системе координат. Рассмотрено влияние выгорания и энергии активации реакции автокатализа на время задержки и порог зажигания ТЭНа лазерным импульсом.

Ключевые слова: плавление, критерий зажигания, лазерный импульс, ТЭН, автокатализ.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительно возрос интерес к изучению инициирования конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) лазерным импульсом. Это связано с исследованием применения светодетонаторов, помехозащищенность которых выше, чем электродетонаторов [1]. Если у таких химических соединений из класса нитраминов, как гексоген и октоген температура зажигания ниже температуры плавления, то, например, у ТЭНа наоборот температура плавления T_f значительно ниже, чем температура зажигания.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Запишем уравнение теплопроводности в цилиндрической системе координат с учетом плавления:

$$\rho[c + H_f \delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \alpha(1-R)I_0(t) \exp \left(-\alpha z - \frac{r^2}{r_0^2} \right) + qK_0 \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right). \quad (1)$$

Уравнение (1) имеет начальные

$$T(r, z, 0) = T_0,$$

и граничные условия

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

Здесь H_f – скрытая теплота плавления; $\delta(x)$ – дельта функция; R_0 и L – радиус и длина образца в виде цилиндра; T_0 – начальная температура образца; λ , c – коэффициент теплопроводности и теплоемкость вещества; ρ – плотность вещества; q , K_0 , E – тепло-

вой эффект реакции, предэкспонент и энергия активации скорости разложения соответственно; k_B – постоянная Больцмана; α – коэффициент поглощения; R – коэффициент отражения. Внешний теплоотвод в данной задаче не учитывался. Полагалось, что длительность лазерного импульса и время задержки зажигания значительно меньше характерного времени внешнего теплоотвода.

Распределение интенсивности по сечению светового пучка задано в форме гаусса:

$$I(r, t) = I_0(t) \exp(-r^2 / r_0^2),$$

где r – расстояние от оси пучка; r_0 – характерный радиус пучка; $I_0(t)$ – плотность потока энергии в центре пучка. Плотность потока энергии в центре пучка

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

где τ_m – длительность переднего фронта импульса, связанная с длительностью импульса, измеренного на полувысоте выражением $\tau_i = 1,19\tau_m$; W – плотность энергии лазерного импульса.

Выражение для критической температуры зажигания ВВ коротким лазерным импульсом приведено в работе [2]:

$$z_1 q K_0 \exp \left(-\frac{E}{RT_m} \right) = \lambda \frac{\Delta T_m}{F(\gamma)} \left(\alpha + \frac{4z_1}{r_0^2} \right), \quad (2)$$

где T_m – критическая температура на поверхности в начале координат. Выражения

$$F(\gamma) = (1 + \gamma)/(1 - \gamma T_0 / T_m), \quad \gamma = RT_m / E,$$

$$\Delta T_m = T_m - T_0 = \alpha W(1 - A) / c\rho.$$

Толщина реакционного слоя z_1 согласно [3]:

$$z_1 \approx \frac{1}{\alpha(T_m)} \ln \left[\frac{(1 + \gamma)}{(1 - \gamma T_0 / \Delta T_m)} \right]. \quad (3)$$

Выражение (2) для определения критической температуры зажигания получено из условия,

что скорость выделения тепла Q_+ в зоне химической реакции равняется скорости теплоотвода Q_- из этой зоны вглубь вещества [3]. Ширина реакционной зоны определяется таким образом, чтобы скорость химической реакции на границе реакционной зоны была в e раз меньше, чем на поверхности.

Получим выражение для критической плотности энергии зажигания ВВ коротким лазерным импульсом. Процесс плавления не влияет на критическую температуру зажигания при воздействии короткого лазерного импульса. Процесс плавления влияет на время задержки инициирования. Из условия теплового баланса, энергия лазерного импульса, поглощенная в реакционном объеме ΔV

$$E_a = \alpha(1-R)W^* \Delta V$$

идет на нагрев реакционного объема до критической температуры

$$Q^* = c\rho\Delta T_m \Delta V$$

и плавление ВВ

$$Q_f = \rho H_f \Delta V.$$

Согласно закону сохранения энергии

$$E_a = Q^* + Q_f.$$

Отсюда критическая плотность лазерного импульса будет равна

$$W^* = \frac{c\rho\Delta T_m}{\alpha(1-R)} + \frac{\rho H_f}{\alpha(1-R)}. \quad (4)$$

Для проверки критерия (формулы (2) и (4)) было решено численно уравнение теплопроводности (1). Расчеты проводились при следующих теплофизических и кинетических параметрах ТЭНа: $\lambda = 2,51 \cdot 10^{-1}$ W/(m·K), $\rho = 1,77 \cdot 10^3$ kg/m³, $E = 196,6$ kJ/mol, $Q = 1,26$ MJ/kg, $Z = 6,3 \cdot 10^{19}$ s⁻¹, $c = 1,26 \cdot 10^3$ J/(kg·K) [4]. Здесь Z – частотный фактор, а Q – тепловой эффект реакции на единицу массы вещества. Предэкспонент скорости выделения тепла в единице объема вещества определяется выражением

$$qK_0 = \rho QZ = 1,4 \cdot 10^{29} \text{ J/(s·m}^3\text{)}.$$

Скрытая теплота плавления для ТЭНа $H_f = 192$ kJ/kg [4], температура плавления $T_f = 413$ K. При численном решении уравнения (1) полагалось $\alpha = 150$ cm⁻¹, $R = 0.6$.

При численном решении уравнения (1) использовалась неявная разностная схема, которая решалась методом прогонки. Аррениусовская нелинейность линеаризовывалась на каждом временном шаге при помощи

преобразования Франк – Каменецкого. Координатные сетки строились неравномерными. Шаги по координатам r и z вычислялись по закону геометрической прогрессии [5]. Шаг по времени выбирался переменным. При реализации алгоритма решения уравнения теплопроводности учитывалось плавление ТЭНа. Фазовый переход учитывался таким образом. При достижении, в каком либо элементарном объеме с координатами точки (i, j) двумерной разностной сетки температуры плавления T_f , считалось, что в этой области температура перестает изменяться и начинается процесс плавления. С этого момента времени полагалось, что на плавление идет энергия, выделяющаяся при поглощении светового пучка, энергия, выделяющаяся в экзотермической реакции, а также энергия уходящая на теплопроводность.

$$\begin{aligned} \Delta Q_{j,i} = & \lambda \frac{2\Delta t}{h_{zi-1} + h_{zi}} \left[\frac{T_{j,i+1} - T_{j,i}}{h_{zi}} - \frac{T_{j,i} - T_{j,i-1}}{h_{zi-1}} \right] + \\ & + \lambda \frac{2\Delta t}{r_{j+1}^2 - r_j^2} \left[r_{j+1} \frac{T_{j+1,i} - T_{j,i}}{h_{rj}} - r_j \frac{T_{j,i} - T_{j-1,i}}{h_{rj-1}} \right] + \\ & + \Delta t \alpha (1-A) I(t) \exp \left(-\alpha z_j - \frac{r_i^2}{r_0^2} \right) + \\ & + \Delta t q K_0 \exp \left(-\frac{E}{RT_{i,j}} \right), \end{aligned}$$

где Δt шаг по времени. Как только накопленная энергия в слое становилась равной произведению

$$\sum \Delta Q_{j,i} = \rho H_f,$$

температура элементарного объема вновь начинала изменяться.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рисунке 1 представлены результаты расчета динамики температуры ΔT_S на поверхности образца ВВ при $z = r = 0$ вблизи порога зажигания при воздействии лазерного импульса длительностью 40 ns и радиусом светового пучка $r_0 = 10^{-1}$ cm. Как видно из данного рисунка при $\Delta T_S = 113$ K на зависимости $\Delta T_S = f(t)$ наблюдается «полочка», которая обусловлена плавлением ТЭНа.

На рисунке 2 приведены результаты расчета зависимости критической плотности энергии лазерного импульса длительностью $\tau_i = 40$ ns от радиуса пучка без учета плав-

КРИТЕРИЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ТЕМПЕРАТУРОЙ ПЛАВЛЕНИЯ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ЗАЖИГАНИЯ

ления (кривая 1) и с учетом плавления (кривая 2). Как видно из сравнения двух кривых, плавление повышает критическую плотность энергии инициирования.

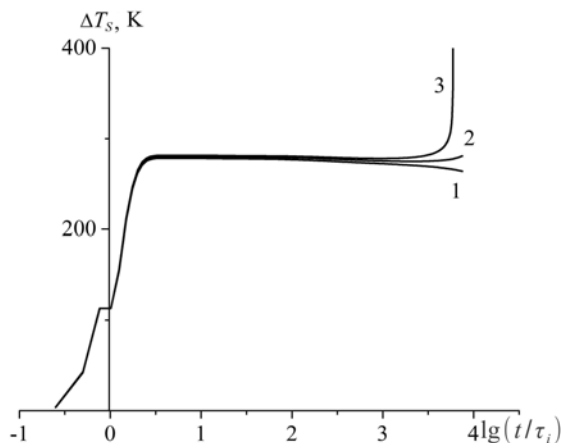


Рисунок 1. Зависимость температуры ΔT_s на поверхности образца в начале координат от времени при $W = 16,3$ (1), $16,4$ (2) и $16,5$ J/cm^2 (3).

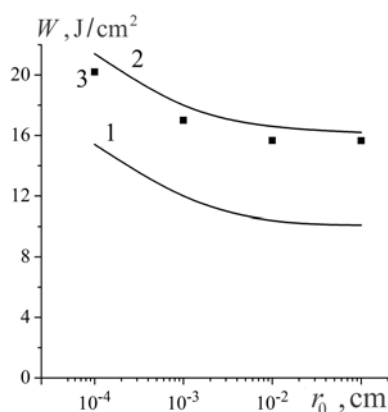


Рисунок 2. Влияние радиуса светового пучка лазерного импульса на критическую плотность энергии зажигания ТЭНа: кривая 1 – без учета плавления, кривая 2 – с учетом плавления, ■ – расчет по критерию (формулы (2), (4)).

Моделирование инициирования ТЭНа лазерным импульсом различной длительности показало, что увеличение τ_i увеличивает порог инициирования. Физика данного явления обусловлена тем, что с увеличением длительности лазерного импульса больше тепла уходит из реакционного объема.

В случае малого коэффициента поглощения ($\alpha \ll 4z_1/r_0^2$) критерий (2) принимает вид:

$$qK_0 \exp\left(-\frac{E}{k_B T_m}\right) = \lambda \frac{4\Delta T_m}{F(\gamma)r_0^2}, \quad (5)$$

а при вычислении критической плотности энергии необходимо учитывать многократное отражение светового пучка от противоположной стороны образца

$$W^* = \frac{[1 - R^2 \exp(-2\alpha L)]}{[1 + R \exp(-2\alpha L)]} \times \left[\frac{c\rho\Delta T_m}{\alpha(1-R)} + \frac{\rho H_f}{\alpha(1-R)} \right]. \quad (6)$$

В работе [6] изучалось инициирование флегматизированного ТЭНа с открытой поверхности неодимовым лазером длительностью импульса 3 ns в области прозрачности кристалла ($\lambda = 1,06$ μm). Плотность образца была близкой к плотности монокристалла. Коэффициент поглощения в данной области спектра порядка 0,033 – 0,1 cm^{-1} [7, 8]. Согласно [6], инициирование ТЭНа происходит во всей толщине кристалла. Это возможно только при малом коэффициенте поглощения, когда энергия лазерного излучения поглощается практически однородно по длине образца.

На рисунке 3 приведены результаты расчета критической энергии инициирования ТЭНа в области прозрачности образца по формуле

$$E^* = \pi r_0^2 W^*$$

с использованием выражений (2) и (6). Расчеты проведены при френелевском коэффициенте отражения

$$R = R_F = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 = 0.036,$$

где $n = 1,47$ – коэффициент преломления ТЭНа. Как видно из рис. 3 результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментом [6] при $\alpha = 0,065$ cm^{-1} . Данное значение α вполне разумно. Расчеты показали, что время задержки теплового взрыва соизмеримо со временем адиабатического периода индукции t_{ad} и равно $\sim 2 \cdot 10^{-4}$ s. Время задержки инициирования ТЭНа, согласно [6], составляет $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ s, что на два порядка меньше t_{ad} . Это может быть обусловлено тем, что в работе [6] энергия лазерного импульса несколько выше пороговой.

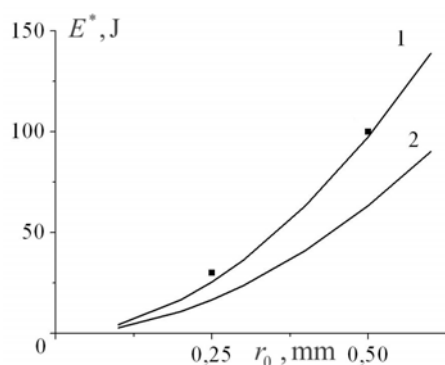


Рисунок 3. Зависимость пороговой энергии инициирования ТЭНа от радиуса пучка: линии – расчет при $\alpha = 0,065 \text{ см}^{-1}$ (кривая 1), $\alpha = 0,1 \text{ см}^{-1}$ (кривая 2), точки эксперимент [6].

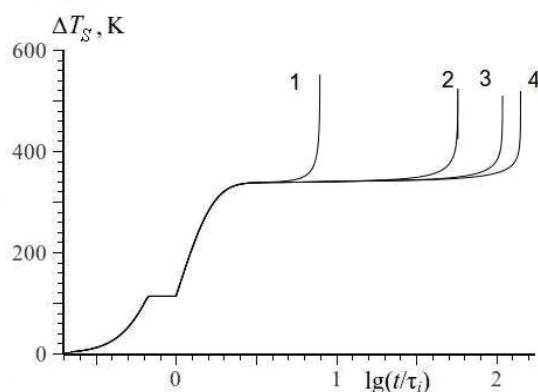


Рисунок 4. Зависимость температуры поверхности образца в начале координат ΔT_S от времени при $E_c = 0,6$ (1), $0,8$ (2) и $0,9 \text{ eV}$ (3), кривая 4 – расчет без учета стадии автокатализа.

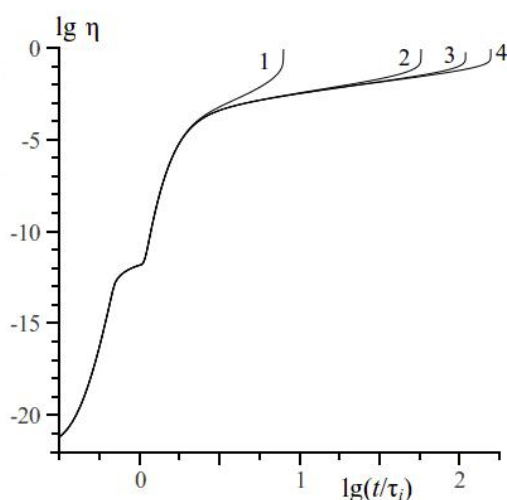


Рисунок 5. Зависимость степени разложения образца в начале координат от времени при $E_c = 0,6$ (1), $0,8$ (2) и $0,9 \text{ eV}$ (3), кривая 4 – расчет без учета стадии автокатализа.

Возможно и другая причина, например автокатализ. Согласно работе [9], термическое разложение многих ВВ происходит автокаталитически. Рассмотрим данную возможность. В случае автокатализа кинетика термического разложения будет определяться системой уравнений:

$$\rho[c + H_f \delta(T - T_f)] \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \alpha(1 - R) I_0(t) \exp \left(-\alpha z - \frac{r^2}{r_0^2} \right) + \rho Q \frac{d\eta}{dt}, \quad (7)$$

$$\frac{d\eta}{dt} = k_1(1 - \eta) + k_2\eta(1 - \eta). \quad (8)$$

Здесь k_1 , k_2 – константы химической реакции, определяемые выражениями

$$k_1 = Z \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right), \quad k_2 = Z_c \exp \left(-\frac{E_c}{k_B T} \right),$$

где Z_c , E_c – частотный фактор и энергия активации реакции автокатализа; η – степень разложения.

Система уравнений (7), (8) решалась численно с начальными и граничными условиями при $\eta(r, z, 0) = 0$ и $\alpha = 150 \text{ см}^{-1}$. Некоторые из результатов расчета приведены на рис. 4 – рис. 7.

Из сопоставления рис. 4 и рис. 5 видно, что к моменту зажигания степень превращения $\eta \rightarrow \infty$. Увеличение энергии активации стадии автокатализа приводит к увеличению времени задержки. Расчеты проведены при $W = 18 \text{ Дж/см}^2$, $r_0 = 10^{-3} \text{ см}$ и $Z_c = 10^{12} \text{ с}^{-1}$.

На рисунках 6 и 7 приведены результаты расчета критической плотности энергии W^* и времени задержки t^* зажигания ТЭНа лазерным импульсом в зависимости от радиуса светового пучка. Расчеты проведены при $Z_c = 10^{14} \text{ с}^{-1}$ и $E_c = 1,0 \text{ eV}$.

Как видно из данных расчетов, автокатализ с одной стороны снижает порог зажигания ВВ лазерным импульсом (рисунок 6, кривая 2), а с другой стороны увеличивает время задержки (рисунок 7, кривая 2). Увеличение времени задержки t^* обусловлено снижением температуры поверхности вследствие снижения порога зажигания. Кроме того, автокатализ приводит к более сильной зависимости порога зажигания от радиуса светового пучка.

КРИТЕРИЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ТЕМПЕРАТУРОЙ ПЛАВЛЕНИЯ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ЗАЖИГАНИЯ

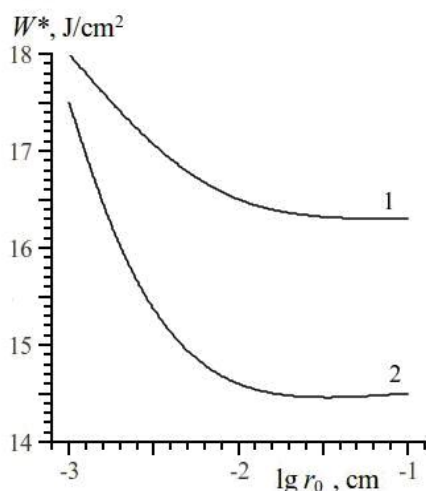


Рисунок 6. Влияние радиуса светового пучка лазерного импульса на критическую плотность энергии зажигания ВВ: кривая 1 – без учета автокатализа; кривая 2 – с учетом автокатализа.

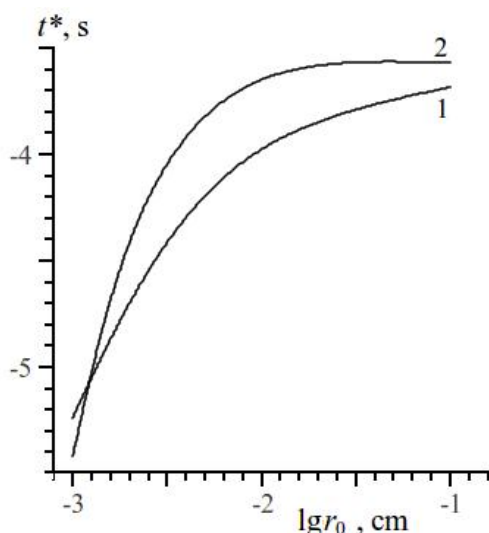


Рисунок 7. Влияние радиуса светового пучка лазерного импульса на время задержки зажигания ВВ лазерным импульсом: кривая 1 – без учета автокатализа; кривая 2 – с учетом автокатализа.

ВЫВОДЫ

1. Получен критерий инициирования взрывчатых веществ коротким лазерным импульсом с температурой плавления ниже температурой зажигания;
2. Размерный эффект зажигания ТЭНа в области прозрачности кристалла обусловлен радиальным теплоотводом из реакционного объема;
3. Реакция автокатализа снижает порог инициирования ВВ лазерным импульсом и приводит к более сильной зависимости порога зажигания от радиуса светового пучка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Илюшин М.А., Угрюмов И.А., Козлов А.С., Долматов В.Ю., Шугалей И.В., Головчак А.Н., Веденский А.В., Королев Д.В., Остаев В.Б. // Химическая физика, 2005, Т. 24, №10. С. 49-56.
2. Ханефт А.В. // Химическая физика. 1998, Т. 17, №10. С. 67-70.
3. Ковальский А.А., Хлевной С.С., Михеев В.Ф. // ФГВ, 1967, Т. 3, №4. С. 527-541.
4. Физика взрыва. / Под ред. Орленко. Т.1. - М.: Физматлит. 2004. - 832 с.
5. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. - М.: Наука. 1980. - 352 с.
6. Быхало А.И., Жужукало Е.В., Ковальский Н.Г., Коломийский А.Н., Коробов В.В., Рожков А.Д., Юдин А.И. // ФГВ, 1985, Т. 21, №4. С. 110-113.
7. Барановский А.М. // ФГВ, 1990, Т. 26, №3. С. 62-64.
8. Зинченко А.Д., Таржанов В.И., Погребов А.И., Токарев Б.Б. // ФГВ, 1992, Т. 28, №5. С. 80-87.
9. Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. -М.: Наука, 1996. - 223 с.