# ВЛИЯНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЭКЗОТЕРМИЧЕСКУЮ РЕАКЦИЮ ПРИ ИНИЦИИРОВАНИИ ТЭНА ЭЛЕКТРОННЫМ ИМПУЛЬСОМ

Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт

Проведено численное моделирование инициирования ТЭНа электронным импульсом. Решались система уравнений несвязанной термоупругости. Учитывались фазовый переход – плавление ТЭНа, а также зависимость энергии активации экзотермической реакции от механического напряжения. Рассчитаны распределения температуры, напряжения, деформации, а также динамика акустических импульсов сжатия – растяжения. Предсказан размерный эффект – зависимость времени задержки инициирования от размера образца.

### ВВЕДЕНИЕ

Тетранитрат пентаэритрит (ТЭН) относится к классу нитроэфиров и является высокобризантным взрывчатым веществом. В последние годы интенсивно изучаются физические процессы, происходящие в ТЭНе при воздействии пучка электронов наносекундной длительности. Изучены спектральнокинетические характеристики импульсной люминесценции, кинетика взрывного свечения, определена критическая плотность энергии электронного пучка  $W^*$ , приводящая к инициированию ТЭНа (W<sup>\*</sup> ~15 Дж/см<sup>2</sup>) [1-4]. Существуют две точки зрения на механизм инициирования ТЭНа электронным пучком: электрический пробой [2] и тепловой взрыв [3]. Следует отметить, что критическая плотность энергии инициирования ТЭНа лазерным импульсом с большим диаметром пучка также составляет ~ 15 Дж/см<sup>2</sup> [4]. Таким образом, вероятнее всего инициирование ТЭНа лазерным и электронным импульсами происходят по одному и тому же механизму.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим возможность теплового инициирования ТЭНа электронным пучком. При поглощении электронного пучка конденсированным взрывчатым веществом, кроме собственно нагрева, в твердом теле возникают термоупругие напряжения. Известно, что упругие напряжения могут изменять энергию активации твердотельной химической реакции [6]. Это приводит к возникновению обратной связи в системе: экзотермическая реакция – упругие механические напряжения. Данная обратная связь может быть как положительной, так и отрицательной, то есть, как снижать порог инициирования взрывчатого вещества, так и увеличивать.

Для исследования данного вопроса в работе проведено численное решение одномерного нелинейного уравнения теплопроводности

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\Lambda(x)}{R_e} I(t) + qK_0 \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$
(1)

совместно с волновым уравнением для термоупругих напряжений

$$c_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = 3\alpha_t K \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}.$$
 (2)

Уравнения (1) и (2) имеют следующие начальные и граничные условия:

$$T(\mathbf{x},0] = T_0, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0} = -j_s L, \quad \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=h} = 0, \quad (3)$$
  
$$\sigma(0,x) = 0, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0, \quad \sigma(t,0) = -p, \quad \sigma(t,h) = 0. \quad (4)$$

Здесь *h* – толщина образца; *T* – температура; λ, c, ρ – коэффициент теплопроводности, теплоемкость и плотность ТЭНа; q, K0, E - тепловой эффект реакции, предэкспонент и энергия активации термического распада ТЭНа соответственно; *j*<sub>s</sub> – поток испаряющихся частиц с поверхности; L теплота испарения;  $k_B$  – постоянная Больцмана; Re – эффективная длина линейного пробега электрона; *I*(*t*) – плотность потока энергии электронного пучка;  $\Lambda(x)$  – распределение плотности поглощенной энергии электронного пучка; c<sub>s</sub> – адиабатическая скорость звука;  $\sigma$  – напряжение; *К* – модуль всестороннего сжатия;  $\alpha_t$  – коэффициент линейного расширения.

Зависимость интенсивности пучка электронов от времени задавалось в виде:

$$I = \frac{W}{6\tau_m} \left(\frac{4t}{\tau_m}\right)^4 \exp\left(-\frac{4t}{\tau_m}\right),$$

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2008

где  $\tau_m$  – длительность переднего фронта импульса, связанная с длительностью импульса, измеренного на полувысоте выражением  $\tau_i = 1.19\tau_m$ ; *W* – плотность энергии электронного импульса.

Экспериментальное распределение плотности поглощенной энергии электронно-го импульса [3] аппроксимировалось полиномом третьей степени

$$\Lambda(\xi) = 0,7 + 1,57\xi - 2,31\xi^2 + 0,61\xi^3,$$
(5)

где  $\xi = x/R_e$  ( $R_e = 173,6 \cdot 10^{-4}$  см). Выражение (5) имеет максимум:  $\Lambda_m = \Lambda(\xi_m) = 1$  при  $\xi_m = 0,405$ . Кроме того, полагаем, что функция  $\Lambda(\xi) = 0$  при  $\xi \ge 1,44$  и интеграл

$$\int_{0}^{1,44} \Lambda(\xi) d\xi = 1$$

Зависимость энергии активации экзотермической реакции задавалось в виде линейной функции от упругого напряжения [6]

$$E(x) = E_a + \sigma(x, t)\Delta V^{\neq}, \qquad (6)$$

где  $E_a$  – энергия активации термического распада ТЭНа при  $\sigma = 0$ ;  $\sigma \Delta V^{\neq}$  – работа, производимая упругими напряжениями в акте реакции;  $\Delta V^{\neq}$  – объем активации. В нашем случае объем активации равен разности объемов реагентов в исходном состоянии и объема активированного комплекса:

$$\Delta V^{\neq} = V_{act} - \sum V_i \; .$$

В зависимости от знака  $\sigma$  и  $\Delta V^{\neq}$  возможно как увеличение энергии активации термического разложения ТЭНа так и уменьшение. Таким образом, в системе уравнений (1), (2) появляется обратная связь, которая может быть как положительной, так и отрицательной.

Динамическое давление испаряющихся молекул ТЭНа вычислялось по формуле

$$p = mu_s j_s$$
.

Здесь *m* – масса молекул ТЭНа; *u*<sub>s</sub> – скорость испаряющихся с поверхности твердого тела молекул ТЭНа, определяемая выражением [7]

$$u_s = \sqrt{\frac{k_B T_s}{2\pi m}}$$

где *T<sub>s</sub>* – температура поверхности ТЭНа.

Кроме напряжения, в работе вычислялись также деформация твердого тела

$$\varepsilon = \frac{1}{\rho c_0^2} \left[ \mathbf{r} + 3\alpha_t K \left( \mathbf{r} - T_0 \right) \right]$$
(7)

и смещение частиц конденсированного тела

$$u(x) = \int_{0}^{x} \varepsilon(x) \, dx \,. \tag{8}$$

Выражение для плотности потока испаряющихся молекул ТЭНа задавалось в виде

$$j_s = j_0 \exp\left(-\frac{L}{k_B T}\right),$$

где  $j_0 = 10^{32}$  м<sup>-2</sup> · c<sup>-1</sup> – предэкспонент плотности потока испарения.

Численное решение уравнения теплопроводности (1) проводилось с использованием консервативной неявной схемы. Для решения волнового уравнения термоупругости (2) использовалась полунеявная схема второго порядка точности. Система разностных уравнений решалась методом прогонки. Разностная сетка выбиралась как по координате, так и по времени однородной. Аррениусовская нелинейность линеаризовывалась на каждом временном шаге при помощи преобразования Франк-Каменецкого.

При численной реализации алгоритма решения уравнения теплопроводности учитывалось плавление ТЭНа. Фазовый переход учитывался следующим образом. При достижении, в каком либо слое «i» разностной сетки по координате температуры плавления  $T_f$ , считалось, что в этой области темпера-

тура перестает изменяться и начинается процесс плавления. С этого момента времени полагалось, что на плавление идет энергия, выделяющаяся при поглощении электронного пучка, энергия, выделяющаяся в экзотермической реакции, а также энергия уходящая на теплопроводность:

$$\Delta Q_{i} = c\rho\Delta T_{i} = \Delta t \left[ \lambda \frac{T_{i+1} - 2T_{i} + T_{i-1}}{\Delta x^{2}} + \frac{\Lambda(x_{i})}{R_{e}} I(t) + qK_{0} \exp\left(-\frac{E_{i}}{kT_{i}}\right) \right], \qquad (9)$$

где  $\Delta t$  и  $\Delta x$  – шаги по времени и координате соответственно. Как только накопленная энергия в слое становилась равной произведению

$$\sum \Delta Q_i = \rho H_f$$
 ,

температура слоя вновь начинала изменяться. Здесь  $H_f$  – скрытая теплота плавления.

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2008

Расчеты проведены при следующих па-ТЭНа:  $c = 1.255 \cdot 10^3$ Дж/(кг.К), раметрах  $\rho = 1,77 \cdot 10^3$ Вт/(м⋅К), кг/м<sup>3</sup>,  $\lambda = 0.1004$  $q = 4,184 \cdot 10^9 \text{ Дж/м}^3$ ,  $K_0 = 10^{16} \text{ c}^{-1}$ ,  $E_0 = 1,717$ **9B** [8],  $c_s = 2320$  M/c,  $\alpha_t = 0.773 \cdot 10^{-4}$  K<sup>-1</sup>,  $K = \rho c_s^2 = 9,52 \cdot 10^9$  Па [9], L = 1,0 эВ [10],  $T_f = 413$  К,  $H_f = 192$  кДж/кг [10]. В работе мы пренебрегали различием теплофизических и кинетических параметров расплава и монокристалла ТЭНа, так как неизвестно как данные параметры изменяются при фазовом переходе. Объем активации  $\Delta V^{\neq}$  варьировали от  $+3 \cdot 10^{-10}$  эВ/Па до  $-3 \cdot 10^{-10}$  эВ/Па.

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Численное моделирование проводилось при различных длительностях и плотностях энергии электронного импульса. Толщина *h* кристалла ТЭНа менялась от 1 до 1,5 мм. Некоторые из результатов численного моделирования приведены на рисунках 1 – 5.

На рисунке 1 приведена динамика изменения температуры ТЭНа  $\Delta T$  ( $\Delta T = T - 300$  K) в области поглощения электронного пучка с энергией W = 20 Дж/см<sup>2</sup> и длительностью  $\tau_i = 15$  нс. Как видно из рисунка 1, на кривых распределения температуры  $\Delta T$  появляются «ступеньки» обусловленные плавлением кристалла (кривые 2, 3).



Рисунок 1. Распределение температуры  $\Delta T$ в образце в различные моменты времени при

поглощении электронного пучка:  $t = 1 \cdot 10^{-8}$ 

(1),  $2 \cdot 10^{-8}$  (2),  $3 \cdot 10^{-8}$  (3) c

На рисунке 2 представлены результаты расчета зависимости температуры в области

максимума поглощения электронного пучка при различных плотностях поглощенной энергии *W*. На рисунке 2 также хорошо видна «ступенька», обусловленная плавлением кристалла.



Рисунок 2. Влияние плотности поглощенной энергии на зависимость изменения температуры от времени в максимуме поглощения

электронного пучка в ТЭНе при W = 15 (1), 20

На рисунке 3 представлены результаты расчета времени задержки инициирования ТЭНа электронным импульсом в зависимости от объема активации при различных размерах кристалла. Время задержки определялось из условия, что



Рисунок 3. Влияние объема активации  $\Delta V^{\neq}$  на время задержки инициирования ТЭНа электронным импульсом при W = 20 Дж/см<sup>2</sup>,

 $\tau_i = 15$  нс: h = 1 (1), 1,5 мм (2)

Из рисунка 3 видно, что кривые  $t^* = f(\Delta V^{\neq})$  имеют максимум при  $\Delta V^{\neq} = 0$ , не зависящий от толщины кристалла. Причем время задержки, не зависимо от знака от

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2008

#### ВЛИЯНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЭКЗОТЕРМИЧЕСКУЮ РЕАКЦИЮ ПРИ ИНИЦИИРОВАНИИ ТЭНА ЭЛЕКТРОННЫМ ИМПУЛЬСОМ

объема активации, а, следовательно, и пороговая плотность энергии электронного импульса инициирования ТЭНа с увеличением объема активации по модулю, уменьшаются. Это связано с тем, что при поглощении энергии электронного пучка и дальнейшего саморазогрева ТЭНа экзотермической реакцией, возникают термоупругие напряжения (рисунок 4), которые перемещаются по кристаллу в виде волн.



Рисунок 4. Динамика распределения термоупругих волн напряжения по толщине кристалла

Из рисунка 4 видно, что вначале происходит генерация волн сжатия ( $\sigma < 0$ ), которые переходят со временем в волны растяжения ( $\sigma > 0$ ). Повторение данного процесса проис-

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2008

ходит периодически. Таким образом, волны упругости при импульсном воздействии, не зависимо от знака объема активации, стимулируют инициирование ТЭНа. Причем время задержки инициирования зависит от толщины кристалла. Обнаружение данного эффекта экспериментально послужило бы доказательством зависимости энергии активации химической реакции от механического напряжения.

Из рисунка 4 так же видно, что в кристалле как бы возникают "две" бегущие волны упругости. Данный эффект связан с процессом плавления ТЭНа в области облучения. Первая волна генерируется до момента плавления, а вторая через некоторое время, после момента плавления. Это и приводит к появлению полочки на зависимости распределения напряжения по толщине кристалла, которая со временем искажается.

Возникающие растягивающие напряжения могут вызвать внутри твердого тела разрывы. Откольное разрушение образца в сечении *х* может произойти в том случае, если максимальное значение растягивающего напряжения в этом сечении будет равно динамической прочности вещества на разрыв.

На рисунке 5 приведены результаты расчета смещения тыльной поверхности образца. Расчеты проводились путем численного интегрирования выражения (8) с заменой верхнего предела x на h. Из рисунка 4 видно, что смещение тыльной поверхности образца носит колебательный характер. Период колебания  $\tau \approx 860$  нс и определяется выражением

$$\tau = \frac{2h}{c_s}$$



Рисунок 5. Динамика смещения тыльной поверхности образца

Следует заметить, что возникающие в ТЭНе расчетные упругие механические напряжения соизмеримы с его пределом прочности и взрыва ударом [17]. Однако этот вопрос мы здесь не обсуждаем в связи с тем, что термоупругое напряжение зависит от модуля всестороннего сжатия и коэффициента линейного расширения. Данные параметры для расплава ТЭНа нам неизвестны. Хотя предварительные расчеты показали, что увеличение коэффициента линейного расширения в данной модели приводят к снижению порога инициирования.

Данные колебания генерируют акустический сигнал частотой

$$v = \frac{c_s}{2h} \approx 1,16$$
 МГц.

Амплитуда колебаний в процессе повышения температуры увеличивается. Зависимость периода колебаний от размера кристалла и приводит к появлению размерного эффекта – зависимости времени задержки инициирования от толщины кристалла. Это связано с тем, что чем больше размер кристалла, тем дольше волны термоупругости находятся вне зоны экзотермической реакции.

### выводы

1. Инициирование ТЭНа электронным импульсом можно объяснить тепловым механизмом;

 Обнаружен размерный эффект – зависимость времени задержки инициирования от толщины кристалла;

3. При импульсном неоднородном нагреве механические напряжения снижают порог инициирования не зависимо от знака

объема активации  $\Delta V^{\neq}$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Корепанов В.И., Лисицын В.М., Олешко В.И., Ципилев В.П. Инициирование детонации ТЭНа мощным электронным пучком // Письма в ЖТФ, 2003, том 29, вып. 16. С. 23-28.

- Oleshko V.I., Korepanov V.I., Lisitsyn V.M., Tsypilev V.P. The Threshold Phenomena in Pentaerythritol Tetranitrate, Initiated by Powerful Electron Beam//Известия вузов. Физика. 2006. №10. Приложение. С.204-207.
- Адуев Б.П., Белокуров Г.М., Гречин С.С., Швайко В.Н. Исследование ранних стадий взрывного разложения кристаллов тентранитропентаэритрита при инициировании импульсными электронными пучками//Известия ВУЗов. Физика. 2007. №2. С.3-9.
- Олешко В.И., Корепанов В.И., Лисицын В.М., Ципилев В.П. О природе свечения, возникающего при облучении тентранитропентаэритрита электронным пучком//ФГВ. 2007, Т. 43, №5. С. 87-89.
- 5. Таржанов В.И., Зинченко А.Д., Сдобнов В.И., Токарев Б.Б., Погребов А.И., Волкова А.А. Лазерное инициирование ТЭНа // ФГВ. 1996. Т.32, №4. С.113-119
- Алиев И.И., Коварский А.Л., Бучаченко А.Л. Радикальные реакции в органических кристаллах под давлением: эксперимент и теория // Химическая физика. 2007, Т. 26, №5, С.11-19.
- Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С., Ходько Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Физ-матлит. 1970. 272 с.
- Беляев А.Ф., Боболев В.К., Коротков А.И., Сулимов А.А., Чуйко С.В. Переход горения конденсированных систем во взрыв. – М.: Наука. 1973. – 293 с.
- Детонация и взрывчатые вещества / Сборник статей. Под ред. А.А. Борисова. – М.: Мир. 1981. – 392 с.
- Физика взрыва / Под ред. Л.П. Орленко.
   Т.1. М.: Физматлит. 2004. 832 с.
- Афанасьев Г.Т., Боболев В.К. Инициирование твердых взрывчатых веществ ударом.– М.: Наука. 1968. – 174 с.