

Детонация в модельном АВ взрывчатом веществе - атомистическое моделирование и кинетическое описание

С.А.Мурзов^{1,2}, О. В. Сергеев², В. В. Жаховский²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л.Духова, Росатом

Проведенные в последнее время исследования термического разложения конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) свидетельствуют о том, что химические реакции в системе идут уже на пикосекундном масштабе времен [1]. Экспериментальное измерение скорости реакции проводится на временах на несколько порядков больших. Поскольку получаемая при этом точность недостаточна для предсказательного гидродинамического расчета инициирования детонации, для определения пикосекундной кинетики химических реакций необходимо молекулярно-динамическое (МД) моделирование.

Проведено МД моделирование инициирования детонации в бесконечной тонкой пленке кристалла АВ модели [2,3] твердого ВВ в результате короткодействующего сжатия потенциальным поршнем, соответствующего непрямому инициированию детонации фемтосекундным лазерным импульсом. Взаимодействие атомов и химические превращения ВВ описывается упрощенным РЕВО потенциалом [3]. Исследовано влияние единичной поры, внедренной вблизи поверхности воздействия инициирующей УВ, на порог перехода в детонацию.

С целью распространения результатов МД моделирования на свойства реальных ВВ, построена кинетическая модель химических реакций в АВ веществе. Молекулярная динамика в данном случае служит аналогом эксперимента, из которого получают зависимости химического состава от времени. Константы скоростей химических реакций в модели определялись путем минимизации различия решения кинетических уравнений и результатов МД моделирования. Разработанная нами модель описывает процессы химических превращений в самоподдерживающейся детонационной волне и в стационарном фронте горения, полученных в МД. Обсуждается применение разработанной кинетической модели для описания термического разложения ТЭНа.

Литература

1. Сергеев О.В., Янилкин А.В. Молекулярно-динамическое моделирование движения фронта горения в монокристалле ТЭНа, *Физика горения и взрыва* Т. 53, (2014)
2. Elert M.L., One dimensional molecular-dynamics simulation of the detonation in nitric oxide, *Phys. Rev. B*, **39**, 1457 (1989).
3. Zhakhovsky V.V., Budzevich M.M., Landerville A.C., Oleynik I.I., White C.T., Laminar, cellular, transverse, and multiheaded pulsating detonations in condensed phase energetic materials from molecular dynamics simulations, *Phys. Rev. E*, **90**, 033312 (2014).