

УДК 662.215.1

## ГИПОТЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ДЕТОНАЦИОННОГО ФРОНТА

*А.И. Шимко, канд.тех.наук, ст. научн. сотр.;*

*В.А. Батурич, канд.физ.-мат.наук, вед. научн. сотр.*

*Институт прикладной физики НАН Украины, г. Сумы*

По гидродинамической теории взрыва детонационная волна отождествляется с ударной волной, а детонация – это процесс сверхзвукового распространения фронта химического превращения по веществу, который может протекать без всякого взаимодействия с окружающей средой, последовательно распространяясь от слоя к слою.

Детонация в газах – это горение с увеличивающейся скоростью фронта и скачком, переходящее в детонацию с медленной скоростью, а затем – в стационарную детонацию с большой скоростью [1,2]. В жидких взрывчатых веществах – это тепловой взрыв, характеризующийся интенсивным разогревом жидкости во фронте ударной волны, переходящем в детонацию [3]. В твердых взрывчатых веществах разогрев во фронте ударной волны недостаточен для возбуждения детонации в пограничном слое вещества. Поэтому принята концепция очагового механизма возбуждения и поддержания детонации [4]. Ведущая роль в процессе детонации отводится ударной волне. Для газовых взрывчатых веществ процессы детонации хорошо описываются законами сохранения массы, импульса и энергии совместно с уравнением состояния газов.

Существующие модели и теории, основанные лишь на законах гидродинамики, термодинамики и газодинамики не дают ответа на кардинальные вопросы процесса взрыва: почему взрывчатые вещества, имеющие различную исходную агрегатную структуру (газ, жидкость, кристаллические или аморфные), детонируют и на завершающей стадии взрыва протекают процессы, описываемые хорошо известными законами; какие физические агенты инициируют, поддерживают и развивают детонацию; как они взаимодействуют с исходным взрывчатым веществом и между собой? Ответить на поставленные вопросы, осветить известные физические явления, исходя из законов квантовой физики и квантовой химии, и на основе этого предложить гипотезу структуры фронта детонационной волны, вот чему посвящена данная статья.

Плоскость разрыва в классической структуре детонационного фронта следует рассматривать как слой конечной толщины, в котором протекают начальные процессы физической перестройки взрывчатого вещества.

В начальный момент детонации во взрывчатых веществах протекают процессы, приводящие их структуру к одному агрегатному состоянию. Таким состоянием для газовых, жидких и твердых взрывчатых веществ является периодическое расположение в пространстве свободных, невзаимодействующих атомов и молекул. Для твердого вещества это квазигаз с плотностью частиц, равной плотности исходного твердого тела с разрушенными кристаллическими связями и компенсированными колебаниями решетки. В жидких взрывчатых веществах разрушены Ван-дер-ваальсовы и химические связи, а атомы выстроены в периодическую структуру. В газовых взрывчатых веществах свободные атомы выстроены в периодическую структуру квазирешетки с периодом, равным длине свободного пробега атомов газа. Такие процессы в детонирующих взрывчатых веществах протекают при взаимодействии с гиперзвуковыми (и электромагнитными) волнами, объединенными в волновые пакеты квазичастиц.

Квазичастицы обладают квазиимпульсом и энергией и описываются корпускулярно – волновой теорией квантовой механики, а система волновых пакетов рассматривается как идеальный газ квазичастиц. Для них применимы понятия эффективной массы, скорости, длины свободного пробега, энергии взаимодействия. Квазичастицы имеют конечное время жизни. При движении из зоны химических реакций к границе исходного взрывчатого вещества квазичастицы – гиперзвуковые волновые пакеты, взаимодействуя между собой как корпускулы, выстраиваются в плотноупакованную периодическую структуру, характерную для данного взрывчатого вещества.

При детонации во фронте детонационной волны взаимодействие ультразвуковых волн, генерируемых в зоне химических реакций и квантовых состояний кристаллических связей, носит резонансный характер [5,6]. Поскольку кристаллы твердого тела далеко не идеальны, то, естественно, начинают разрушаться более слабые связи, для которых необходимы более низкочастотные составляющие волновых пакетов. Разрушение кристаллических твердых тел под воздействием гиперзвуковых волновых пакетов первоначально идет по дефектам кристаллической структуры, т.е. по тем областям, где энергия связи наименьшая. По мере возрастания частоты в спектре гиперзвуковых волновых пакетов происходит более мелкое дробление. Взаимодействие носит резонансный характер, поэтому частицы не разлетаются. В пределе самыми высокими частотами гиперзвуковых пакетов разрушаются кристаллические связи монокристалла, и твердое вещество (конденсированная среда) превращается в систему плотного атомарного газа, повторяющего кристаллическую решетку исходного взрывчатого вещества – квазирешетка газа. Колебательный характер

движения атомов вырождается и представляет собой прямолинейное движение массивного ядра с колеблющейся электронной оболочкой.

Волновые пакеты газовых и жидких взрывчатых веществ, выстроенные в периодическую структуру потенциальных ям, воздействуют на свободные атомы и смещают их к центру потенциальных ям. В результате атомы выстраиваются в периодическую структуру. В твердых взрывчатых веществах волновые пакеты совмещаются с узлами кристаллической решетки исходного вещества так, что свободные атомы квазигаса сразу же оказываются на дне потенциальных ям.

Электромагнитные волновые пакеты атомов также являются квазичастицами и выстраиваются в периодическую структуру, совпадающую со структурой гиперзвуковых волновых пакетов атомных объемов. И как только свободные атомы исходного вещества оказываются в потенциальных ямах, электромагнитные волны резонансно взаимодействуют с атомными электронами, в результате чего электрон переходит в состояние  $E_e \approx 0$ , т.е. на поверхность Ферми. Скачком уходят все электроны с оболочки одновременно, т.к. они изоэнергетичны. Скачком изменяется и объем атома [7]. Объемные состояния атома дискретны и (каким-то образом) связаны с электронным состоянием, взаимодействуют только с соответствующими объемными квантами.

При резонансном взаимодействии высокочастотной части волновых пакетов с квантовыми состояниями взрывчатого вещества образуется плазменная среда, в которой ядра практически неподвижны (в пределах времен рассматриваемых физических процессов), а электроны свободны и обладают энергией, близкой нулю [8]. Такие электроны взаимодействуют друг с другом и образуют куперовские пары [9]. Электроны, соединившиеся в пары, пространственно остаются в зоне действия «своего» ядра. Плазма приобретает свойства сверхпроводимости и сверхтекучести. Известно, что в такой среде любые возмущения распространяются со скоростью Ферми, равной 0,01 от скорости света, а волновые пакеты – без дисперсии и диссипации. По этой же причине волновые пакеты имеют преимущественное направление движения вперед к зоне деструкции (сильная анизотропия коэффициента преломления).

Волновые пакеты любой природы при движении в сверхпроводящей среде взаимодействуют как квазичастицы, выстраиваются в периодическую структуру и к моменту подхода к зоне деструкции совмещаются с узлами кристаллической решетки.

Первичные сверхпроводящие струи с полной ионизацией атомов организуются детонатором (первичным возбудителем), не размножаются, неустойчивы к поперечным возмущениям. В слое разрыва они переходят в поперечные винтовые движения [2]. Ионно-электронная плазма и электронно-ядерные струи (образованные детонатором) не смешиваются. Существуют независимо.

Восстановление атомов начинается в головной части зоны химических реакций с распада куперовских пар и последующей реконструкции объема атомов. Электроны одной изоэнергетической оболочки освобождают и заселяют оболочку одновременно. Изменение электронных состояний влечет за собой и изменение объемных квантовых состояний (гиперзвуковые квазичастицы). Энергия, поглощенная от внешних и внутренних источников, создает в среде неравновесные концентрации промежуточных высокорезонансноспособных частиц и квазичастиц.

Близко расположенные ионы образуют друг с другом неустойчивые квазимолекулы с обобществлением всех  $L$  - электронов обоих атомов в единую систему, в которой все электроны занимают орбиты вокруг обоих ионов, еще более сближая положительные ядра. Переход химической системы из начального состояния (реагента) в конечное (продукты) связан с образованием активированного комплекса, или переходного состояния. Время жизни активированного комплекса составляет  $\sim 10^{-13}$  с. Эта величина может рассматриваться как нижняя граница времени быстрых химических реакций. За это время детонационная волна проходит  $\sim 10$  Å.

Квазимолекулы активированного комплекса неустойчивы и диссоциируют на составляющие ионы с захватом «своих» электронов на законные  $L$  - орбиты с понижением химической активности и сопровождаются излучением электромагнитных, ультра- и гиперзвуковых волн.

Быстрые химические реакции формируют агрегатные ультразвуковые и гиперзвуковые волны, т.е. волны взаимодействия с кристаллическими связями, тепловыми фонами кристаллической решетки, молекулярными связями, дефектами структуры.

При быстрых химических реакциях одновременно с излучением объемных квантов, генерируемых при образовании неустойчивых молекул, излучаются электромагнитные волны заселения больших (общих) орбит квазимолекул. Гиперзвуковые волны в этой зоне существуют как индивидуально, так и образуют волновые пакеты, которые, в свою очередь, могут соответствовать как простым (одноатомным), так и сложным (многоатомным) квазичастицам. Такие системы неустойчивы, время жизни их мало и они перестраивают свои квазимолекулярные электронные состояния в устойчивые атомные.

При диссоциации квазимолекулы (активированного комплекса) происходит кулоновский взрыв, положительные ядра разлетаются. Это первый источник тепловой энергии плазмы. Вторым источником энерговыделения – это реакции между атомами в неустойчивых положениях и структурирование квазимолекул в плотно упакованную систему (выделяется энергия активации). Это работа первоначально затраченной технологической энергии взрывчатого вещества. Третий источник энерговыделения – это

медленные химические реакции с образованием устойчивых молекул и выделением тепла химических реакций.

Релаксационные процессы медленных химических реакций формируют свои волновые пакеты, спектр частот которых достаточен для разрушения кристаллических и молекулярных связей, компенсации тепловых фононов и ионизации свободных атомов. Это поддерживает цепной характер развития детонационного процесса, при котором выделяются и размножаются резонансные кванты.

Сила инициирующего заряда (детонатора) определяется количеством порождаемых электронно-ядерных струй. Чем их больше, тем более эффективно начинается и развивается детонация. Первоначально из спектра шума быстрых и медленных химических реакций образовавшиеся электромагнитные волны воздействуют на неструктурированный атом и ионизируют его наружную оболочку. В зоне быстрых химических реакций при рекомбинации образуются гиперзвуковые волновые пакеты, которые в ионно-электронно-ядерной плазме структурируются в плоскопараллельную решетку и далее включаются в общую схему цепной реакции. При этом первичные электронно-ядерные струи не размножаются (неоткуда дополнительно взяться электромагнитным квантам энергии с частотами внутренних переходов). Они служат центрами инициирования более низкочастотных переходов.

Итак, на основании вышеизложенной картины физической модели фронта детонационной волны структура фронта представляется в следующем виде.

1 Исходное взрывчатое вещество.

2 Зона деструкции, в которой под воздействием ультразвуковых и электромагнитных волновых пакетов происходит разрушение кристаллических и молекулярных связей; компенсация тепловых фононов, структурирование свободных атомов, их ионизация и образование куперовских пар, разрушение коволюма.

3 Сверхпроводящая зона. Состоит из первичных электронно-ядерных струй и вторичной плазмы из многозарядных ионов и электронов, куперовских электронных пар. По ней распространяются гиперзвуковые и электромагнитные волновые пакеты, которые структурируются в периодическую систему.

4 Зона быстрых химических реакций. Включает зону восстановления объема атомов и образование неустойчивых квазимолекул (активированных комплексов). Происходит диссоциация неустойчивых молекул и образование свободных атомарных ионов. Генерируются ультразвуковые волны и длинноволновое электромагнитное излучение.

5 Зона медленных химических реакций. Образуются устойчивые молекулы, происходит их диссоциация – рекомбинация, генерация гиперзвуковых волн и коротковолнового электромагнитного излучения.

6 Релаксационная зона – установление термодинамического равновесия.

7 Плоскость Чепмена-Жуче.

8 Продукты взрыва.

Зона деструкции, сверхпроводящая зона и зона быстрых химических реакций образуют переходной слой (слой разрыва) или собственно фронт детонационной волны, в котором и протекают все подготовительные процессы детонации.

## SUMMARY

*In work the hypothesis about existence in front of a detonation wave of a transitive layer in which explosive exists in a gaseous kind with a periodic arrangement of atoms is stated. As a result of interaction with hypersound and electromagnetic wave packages gas is ionized, and plasma gets super conducting properties. In relaxation zone fast reactions of the activated complex and slow chemical reactions of products of a detonation proceed. The structure of front of a detonation wave is formulated.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Г.В. Баженова, Л.Г. Гвоздева, Ю.П. Лагунов и др. Нестационарные взаимодействия ударных и детонационных волн в газах. - М.: Наука, 1986. –206с.
2. Б.В. Войцеховский, В.В. Митрофанов, М.Е. Толчиян. Структура фронта детонации в газах. СО АН СССР. – Новосибирск, 1983. – 168с.
3. Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. Физика взрыва. - М.: Наука, 1975. – 704с.
4. А.А. Дремин, С.Д. Савров, В.С. Трофимов и др. Детонационные волны в конденсированных средах. - М.: Наука, 1970. – 164с.
5. Г. Бете и Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами / Пер. с англ. - М., 1960. – 564с.
6. А.М. Акулин, Н.В. Карлов. Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике. - М.: Наука, 1987. –312с.
7. П. Савич, Р. Кашанин. Поведение материалов при высоких давлениях / Пер. с англ. - Киев: Наукова думка, 1976. – 263с.
8. Л. Спитцер. Физика полностью ионизованного газа / Пер. с англ. - М.: Мир, 1965. –212с.
9. Дж. Шриффер. Теория сверхпроводимости / Пер. с англ. М.: Наука, 1970. –312с.

*Поступила в редакцию 10 марта 2003 г.*