

ПИСЬМО В РЕДАКЦИЮ

УДК 541.12.031 : 547.232 : 662.1/4

А. В. Белик, В. А. Потемкин

**НОВАЯ МЕТОДИКА
ПРОГНОЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ВВ К УДАРУ**

Одной из важных характеристик взрывчатых веществ (ВВ) является их чувствительность к удару, которую можно определить как высоту копра ($H_{50\%}$ [см]), при которой вероятность взрыва достигает 50% (все условия испытаний приведены к определенному стандарту [1]). Выяснение причин, обуславливающих различную чувствительность ВВ к механическим воздействиям или (и) получение функциональной зависимости между структурой соединения и $H_{50\%}$, позволит прогнозировать эту величину для произвольных гипотетических структур. Обычно для этой цели предлагались различные эмпирические зависимости, учитывающие, например избыток «встроенного» в молекулу окислителя [1] или основанные на данных квантово-химических расчетов [2—4]. Недостаток этих подходов к оценке $H_{50\%}$ связан с тем, что они не выделяли направления, позволяющего подойти к решению вопроса о механизме процесса. Сама проблема сверхбыстрых твердофазных химических реакций подробно представлена, например, в работах [5—7].

В [8] отмечена линейная корреляция между $\ln H_{50\%}$ и средней резонансной энергией $E_{\text{ср}}^R$ молекулы, полученной в расчетах CNDO/2. Поскольку квантово-химические расчеты требуют больших затрат машинного времени, то в качестве $E_{\text{ср}}^R$ стали использовать величины, которые определены на первом шаге процедуры самосогласования. Современные экспериментальные исследования твердофазных химических реакций [5—7] не противоречат тому, чтобы остановиться в оценке $H_{50\%}$ на простом соотношении

$$H_{50\%} = A \exp(aE_{\text{ср}}^R),$$

где параметры моделей (коэффициенты) A и a определяются структурой молекулы рассматриваемого вещества. В [9] предложен способ вычисления коэффициентов A и a , который основан на анализе данных спектра структурной матрицы соединения. Под структурной понимается матрица, которая составлена из межатомных расстояний в молекуле (Å), где на главной диагонали расположены атомные массы (а. е. м.). Затем вычисляются индексы

$$A_2 = (a_{\text{min}} + a_{\text{max}})/2, \quad A_3(\text{отн.}) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k a_i,$$

где суммированию подлежат все a_i такие, значения которых не превышают A_2 . Тогда предэкспоненциальный множитель $A = \ln A_3(\text{отн.}) \cdot 10^8$ см.

Однако практика показала, что не во всех случаях при расчете $H_{50\%}$ получается удовлетворительный результат. Поэтому вначале необходим

предварительный качественный анализ чувствительности к удару исследуемого вещества. Это легко осуществить по вычислительным схемам [8, 10], когда оценивается класс чувствительности вещества.

Высокочувствительными считаются такие вещества, для которых $H_{50\%} < 30$ см, а для низкочувствительных $H_{50\%} > 70$ см. Получено, что для соединений, имеющих в своем составе карбонильный кислород и не принадлежащих к высокочувствительным, должно быть $A = -\ln A_2 \cdot 10^8$ см. Коэффициенты a для каждого соединения выбираются из элементов a_i (спектра структурной матрицы). Для этого имеется простое правило [9].

В результате построена эмпирическая модель, осуществляющая непосредственную взаимосвязь между структурой соединения и его чувствительностью к удару без введения дополнительных коэффициентов. При этом достигается достаточно высокая точность прогноза $H_{50\%}$ [9].

Как показано в работе [11], коэффициенты a_i можно рассматривать в виде квадратов длин волн колебаний в специальной модельной задаче, где каждый из атомов имеет только одну степень свободы, и обратное силовое поле имеет специальный вид (с единичными диагональными элементами и недиагональными, которые пропорциональны евклидовым расстояниям и обратно пропорциональны корню квадратному из произведения атомных масс). Следовательно, выбор коэффициентов a в модели связан с определенными формами колебаний атомов, анализ которых может привести к новым знаниям в понимании механизма процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Камлет М. Определение чувствительности твердых взрывчатых веществ/Детонация и взрывчатые вещества.— М.: Мир, 1981.— С. 114—131.
2. Delpuech A., Cherville J. Relation entre la structure electronique et la sensibilité au choc des explosifs secondaires nitrés. Critère moléculaire de sensibilité II. Cas des esters nitriques // Propellants, Explos.— 1979.— 4, N 6.— P. 121—127.
3. Mullay J. Relationships between impact sensitivity and molecular electronic structure // Propellants, Explos., Pyrotech.— 1987.— 12.— P. 121—124.
4. Белик А. В., Потемкин В. А. Схема оценки чувствительности ВВ к удару/Челяб. ун-т.— Челябинск, 1988.— 24 с.— Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 655.
5. Енколопян Н. С. Детонация — твердофазная химическая реакция // Докл. АН СССР.— 1988.— 302, № 3.— С. 630—634.
6. Енколопян Н. С. Сверхбыстрые химические реакции в твердых телах // ЖФХ.— 1989.— 63, вып. 9.— С. 2289—2298.
7. Овчинников М. А., Овчинников А. А. О квантовом пределе скорости низкотемпературных химических реакций // Докл. АН СССР.— 1989.— 309, № 3.— С. 652—655.
8. Белик А. В., Потемкин В. А. Программа SENSIB/3 расчета чувствительности ВВ к удару/Челяб. ин-т.— Челябинск, 1989.— 14 с.— Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 478.
9. Белик А. В., Потемкин В. А., Зефирин Н. С. Взаимосвязь между геометрическим строением молекул взрывчатых веществ и чувствительности к удару // Докл. АН СССР.— 1989.— 308, № 4.— С. 882—886.
10. Белик А. В., Потемкин В. А. Прогнозирование чувствительности ВВ к удару // ФГВ.— 1988.— 24, № 5.— С. 103—106.
11. Белик А. В., Потемкин В. А. Новая интерпретация ряда геометрических индексов // Докл. АН СССР.— 1990.— 312, № 2.— С. 377—379.

г. Челябинск

Поступила в редакцию 12/VII 1991