

В этом случае уменьшение мощности генерации при $L_r/L \approx 10^{-1}$ составит $\beta \simeq 0,2$.

Следует отметить, что поглощение резонансного излучения сопровождается различными тепловыми эффектами [3]. Возможны начальное охлаждение газа (на 30—50 К), а затем его резкий нагрев по механизму теплового взрыва. Появление поперечных градиентов плотности может привести к смещению каустики луча и разъюстировки резонатора.

Таким образом, в СО-ГДЛ возникают дополнительные каналы оптических потерь, связанные с проявлением самопоглощения части энергии оптического излучения областями термализованного газа, с уменьшением КПД резонатора лазера вследствие падения интегрального коэффициента усиления среды и со смещением каустики и разъюстировкой резонатора при появлении поперечных градиентов плотности потока в поглощающих областях.

Указанные потери, вызванные резонансным самопоглощением индуцированного излучения, могут проявляться и в лазерах другого типа на двухатомных молекулах (химико-газодинамическом, электрогазодинамическом СО-лазере, химическом HF-лазере).

ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Лосев. Газодинамические лазеры. М.: Наука, 1977.
2. M. Hisli, H. Nagai, T. Akiba. Appl. Phys. Lett., 1980, 36, 797.
3. В. М. Шмелев, А. Д. Марголин. Хим. физика, 1985, 4, 7, 873.
4. Б. Ф. Гордиец, А. И. Осинов, Л. А. Шелепин. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980.
5. В. М. Шмелев, А. Д. Марголин. Хим. физика, 1983, 2, 11, 1480.
6. Н. Я. Василик, А. Д. Марголин, В. М. Шмелев. ПМТФ, 1982, 3, 22.

Поступила в редакцию 27/III 1986

УДК 532.593

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ГАЗОВ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Б. Н. Кондриков, А. И. Сумин
(Москва)

Уравнение состояния газообразных веществ при давлении $p \simeq 10^9 \div 10^{10}$ Па и температуре $T \simeq 10^3 \div 10^4$ К представляет значительный интерес для химической газодинамики.

В настоящее время для практических расчетов широко используется уравнение состояния БКВМ [1]. Оно содержит 5 констант, определяемых главным образом с помощью данных по скорости и давлению детонации. Недостатки этого уравнения: два набора констант для расчета детонационных характеристик веществ с разным содержанием углерода и завышенный изохорный коэффициент давления, вследствие чего температура детонации обычно занижается.

Первые попытки более строгого (в рамках статистической механики) подхода к составлению уравнения состояния предприняты в [2, 3] и продолжены в [5, 9] (см. также обзор [4]). Суть подхода состоит в выборе потенциала межмолекулярного взаимодействия и вычислении конфигурационной части статистического интеграла, определяющей степень отклонения термодинамических параметров газа от идеальных при уменьшении удельного объема. Потенциал межмолекулярного взаимодействия (обычно полуэкспоненциальный) содержит 3 константы, но при вычислении конфигурационной функции состояния вводится еще ряд констант, определяемых как из расчетных данных, полученных по методу Монте-Карло, так и из экспериментальных результатов на основе прин-

ципа соответственных состояний. Метод расчета громоздок и не всегда достаточно надежен [5—9] (некоторые замечания сделаны ниже).

Необходимо упомянуть также об уравнениях состояния, пренебрегающих химическим составом газа. Наиболее известны из них уравнение Абеля с коволюмом, зависящим от плотности [10], Уилкинса [11] и уравнение состояния Кузнецова — Шведова для продуктов детонации гексогена [12]. В последнем тщательно обоснован подход к тепловым составляющим давления и энергии.

В данной работе уравнение состояния основных продуктов детонационного превращения С-, Н-, N-, O-соединений получено обработкой имеющихся экспериментальных данных по динамическому сжатию и детонации конденсированных веществ. В целях получения наибольшей точности описания опытных данных, с одной стороны, и использования полученных ранее параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия — с другой, проведено разделение давления и внутренней энергии на потенциальную $p_{\text{п}}(v)$ и $E_{\text{п}}(v)$ и тепловую $p_{\text{т}}(v, T)$ и $E_{\text{т}}(v, T)$ составляющие.

Основная трудность в построении уравнения состояния сжатых до высокой плотности газов состоит в том, что для них в отличие, например, от металлов упругие составляющие давления и внутренней энергии p_y и E_y , теплоемкость c_v и параметр Грюнайзена $\Gamma = (\partial p / \partial E)_v v$ в общем термодинамическом соотношении

$$p = p_y + \Gamma c_v T / v \quad (1)$$

($p_y = -dE_y/dv$) есть функции одновременно температуры и удельного объема. Использующиеся во многих работах приближения $p_y = p_y(v)$, $\Gamma = \Gamma(v)$, $c_v = c_v(T)$ (или тем более $c_v = \text{const}$) для тонких расчетов, прежде всего для расчета параметров детонации конденсированных систем, заведомо не пригодны.

В данной работе использовано уравнение состояния вида

$$p = p_{\text{п}} + kRT/v, \quad (2)$$

в котором $k = [v(\partial p / \partial T)_v / R] [1 - RT(\partial k / \partial p)_v / v]$. Составляющая $p_{\text{п}}$ зависит только от v (не приближенно, а точно). Соответственно $E_{\text{п}} = - \int p_{\text{п}} dv$ также определяется только удельным объемом, а зависимость параметра k от T (а вдоль ударной адиабаты и от v) невелика и может быть найдена на основании анализа данных по детонации гексогена и изотермической сжимаемости продуктов его взрыва [12]. Таким образом, вместо трех функций без потери термодинамической строгости расчета введены две, одна из которых не зависит от T . Функция $E_{\text{п}}$ записывается в виде полуэкспоненциального потенциала

$$E_{\text{п}} = E_{\text{п}}(v) = \frac{c_m}{\alpha - 6} \left\{ 6 \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{v}{v_m} \right)^{1/3} \right] - \alpha \left(\frac{v_m}{v} \right)^2 \right\}. \quad (3)$$

Коэффициент k задан следующим образом:

$$\frac{dk}{d\tau} = (a_1 + a_2 k)(a_3 - k). \quad (4)$$

Здесь $\tau = (v_0/v)(T_0/T)^{0.3}$ — параметр Н. М. Кузнецова [12] ($v_0 = 1 \text{ см}^3/\text{г}$, $T_0 = 1000 \text{ К}$). При $v \rightarrow \infty$ (2) переходит в уравнение состояния идеального газа, поэтому при $\tau = 0$ $k = 1$. Для твердых веществ (в данном случае только графит и алмаз) использовались уравнения состояния, приведенные в [13, 14].

Для (2) — (4) внутренняя энергия и теплоемкость определяются простыми соотношениями

$$E_j = E_j^0 + E_{\text{п}j} + 0.3RT(k_j - 1), \quad c_{vj} = c_{vj}^0 + 0.3R \left[(k_j - 1) + T \left(\frac{\partial k_j}{\partial T} \right)_v \right], \quad (5)$$

индекс 0 указывает на соответствующие величины для идеального газа.

Для рассмотрения стационарных (или квазистационарных) газодинамических волновых процессов (2)–(5) следует дополнить уравнениями сохранения энергии, импульса и массы

$$H = H_0 + \frac{1}{2} (p + p_0) (v_0 + v), \quad D = v_0 \sqrt{(p - p_0)/(v_0 - v)}, \\ u = \sqrt{(p + p_0)(v_0 - v)}. \quad (6)$$

В (6) D — скорость волны; u — скорость потока за волной; H_0 , p_0 , v_0 — энтальпия, давление, удельный объем исходного вещества; $H = G + TS$ — энтальпия вещества в данном сечении за фронтом волны. Энергия Гиббса G и энтропия S рассчитываются по формулам

$$G = \sum_{j=1}^m \mu_j n_j, \quad S = \sum_{j=1}^m S_j n_j = \sum_{j=1}^m -(\partial \mu_j / \partial T)_p n_j. \quad (7)$$

Здесь n_j — число молей данного компонента в 1 кг смеси; m — количество компонентов в смеси; μ_j и S_j — химический потенциал и энтропия, которые определяются для газообразных и конденсированных веществ следующим образом:

$$\mu_j = \mu_j^f + p v_j + E_{\text{пп}} + RT \left[\ln \frac{r_j}{n_0} - 1 - \int_{v_{0j}}^{v_j} \frac{k_j}{v} dv \right], \quad (8)$$

$$S_j = S_j^0 + R \left[0,3(k_j - 1) - \ln \frac{n_j}{n_0} + \int_{v_{0j}}^{v_j} \frac{k_j}{v} dv \right], \quad (9)$$

$$\mu_j = \mu_j^f + p v_j - p_0 v_{0j} + \int_{v_{0j}}^{v_j} p dv, \quad (10)$$

$$S_j = S_j^0 + \int_{v_{0j}}^{v_j} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v dv. \quad (11)$$

В (8)–(11) n_0 — сумма молей всех газообразных продуктов; μ_j^f , S_j^0 , v_{0j} — химический потенциал, энтропия и удельный объем j -го компонента при нормальном давлении.

Уравнения (2)–(11) позволяют рассчитать параметры уравнения состояния (α , e_m , v_m , $a_{1,2,3}$) по имеющимся экспериментальным данным по динамической сжимаемости и по зависимости детонационных характеристик от состава и плотности исходного вещества.

В данной работе получено уравнение состояния следующих веществ: N_2 , CO , CO_2 , O_2 , H_2O , H_2 , NH_3 , CH_4 и NO . Для первых восьми из них имеются ударные адиабаты [2, 14–24] — это исходный материал, с помощью которого можно определить параметры уравнения состояния в первом приближении. Методы их расчета из ударных адиабат подробно описаны в [25–27]. Это прямые методы: анализ зависимости $D(u, T_0)$ дает непосредственно k , $p_{\text{пп}}$, $E_{\text{пп}}$ для каждого вещества, но точность их, вообще говоря, невелика — ударная адиабата плохо чувствует изменение параметров уравнения состояния. Нужно очень точное определение $D(u, T_0)$, чтобы результат был сколько-нибудь надежным. Поэтому величины, вычисленные таким образом, уточнялись в дальнейшем по детонационным данным: параметры уравнения состояния варьировали таким образом, чтобы достичь наилучшего согласия с опытом по всему массиву экспериментальной информации. Если при этом вдруг оказывалось, что модифицированные параметры не удовлетворяют результатам ударно-волновых измерений, вся процедура повторялась до полного согласования со всеми имеющимися данными.

Кроме восьми ударных адиабат, в рассмотрение были включены 15 зависимостей скорости и давления детонации от плотности для C -, H -

Таблица 1

Константы в выражениях (3), (4)

Вещество	α	ε_m , кДж/кг	v_m , см ³ /г	a_1	a_2	a_3
N ₂ , CO	9,46	557,5	1,081	0,34	0,24	6,77
H ₂ O	11,08	905,4	0,843	0,34	0,24	6,77
O ₂	10,40	272,2	0,835	0,34	0,24	6,77
CO ₂	12,00	515,2	0,609	-0,09	0,33	7,55
H ₂	12,06	252,7	13,170	0,16	0,83	6,45
NH ₃	11,80	450,0	1,400	0,30	0,18	10,27
CH ₄	11,39	470,1	2,348	0,33	0,26	6,84
NO	11,00	282,0	0,940	0,34	0,24	6,77

N-, O-соединений, а также значения температуры ударного разогрева [28, 29] и детонации [30]. Состав продуктов рассчитывали по методу минимизации энергии Гиббса. Параметры состояния во фронте УВ определяли по выражениям (2) — (11). Программа расчета характеристик детонации состоит из двух итерационных процедур. Во внешней итерационной процедуре минимизируется зависимость скорости ДВ от давления на детонационной адиабате по уравнению сохранения импульса (6). Во внутренней процедуре при заданном давлении по (7) — (11) определяли состав, по (2), (4) — удельный объем продуктов детонации и температуру детонационного процесса по уравнению сохранения энергии в волне (6). Вычисления прекращались после достижения заданной точности во внешней процедуре. Полученные таким образом параметры уравнения состояния приведены в табл. 1. Область наилучшего согласия их с опытом лежит в интервале изменения $p = 1 \div 50$ ГПа и $T = 1000 \pm 6000$ К. Степень этого согласия рассмотрим на нескольких примерах.

На рис. 1, а показана ударная адиабата азота. Сплошная кривая отвечает расчету с использованием параметров, приведенных в табл. 1, штриховая проведена по формуле $D = 1,12 + 1,68u - 0,04u^2$, аппроксимирующей экспериментальные данные [15]. Согласие расчетной ударной адиабаты с опытом [2] хорошее во всем интервале (p, v). Температура ударно-сжатого азота измерена в [28]. Расчет по данным табл. 1 дает в среднем значение T на 100—200 К выше полученных экспериментом. Вычисления, выполненные в [9], завышают температуру на 400—700 К (рис. 1, б).

Большое значение для расчета параметров детонации C-, H-, N-, O-соединений имеет уравнение состояния воды. Ударная адиабата, рассчитанная по данным табл. 1 (рис. 2, а), при $p > 25$ ГПа отвечает результатам ударно-волновых измерений [18—20] лучше, чем при $p < 15$ ГПа. Этот результат можно объяснить тем, что при $p \leq 10 \div 12$ ГПа вода в УВ ассоциирована, при более высоком давлении — ассоциаты разрушены и молекулы упаковываются более плотно [18]. Кривая, проведенная в основном по детонационным данным, описывает состояние неассоциирован-

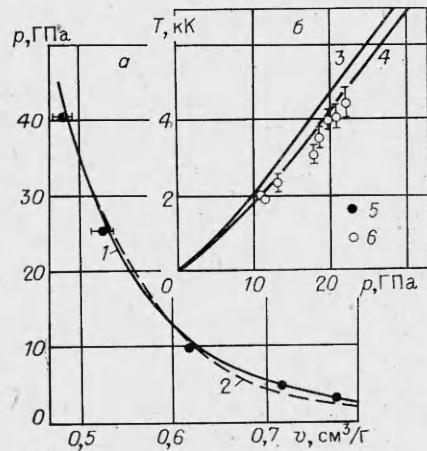


Рис. 1. Ударная адиабата (а) и температура ударного разогрева (б) азота.

1, 4 — расчет по данным табл. 1; 2 — аппроксимация экспериментальных данных [15]; 3 — расчет [9]; 5, 6 — опыт [2] и [28].

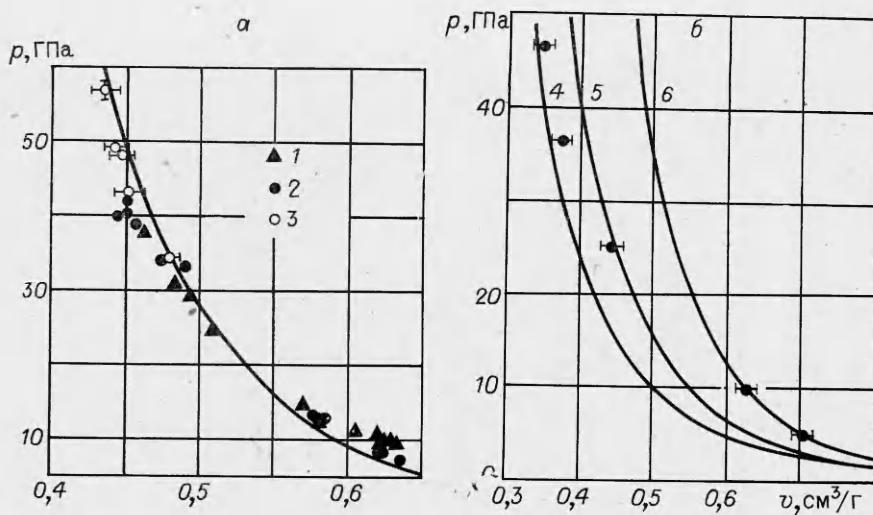


Рис. 2. Ударные адиабаты воды (а) и СО (б).
а) 1, 2, 3 — опыт [18—20], кривая — расчет; б) точки — опыт [14], 4 — равновесная реакция (С — алмаз), 5 — равновесная реакция (С — графит), 6 — расчет без учета разложения.

ной воды (в детонационной волне вода нагрета до высокой температуры — ассоциация затруднена). Поэтому при $p < 15$ ГПа расчетная кривая лежит несколько левее экспериментальных (ударно-волновых) точек. Расчет температуры ударного разогрева дает значение на 250 К выше опытной точки, приведенной в [31] (30 ГПа, 2000 К), и на 400 К выше, полученной в работе [29] (48,9 ГПа, 3280 К). Вычисления, проведенные в рамках квантово-механического подхода [32], завышают температуру в этих точках соответственно на 500 и 600 К.

Для кислорода, углекислого газа, водорода согласие расчетных ударных адиабат с опытом [2, 16, 17, 21, 22] во всем охваченном изменением интервале изменения давления хорошее. Такое же согласие наблюдается, если применить уравнение состояния водорода (см. табл. 1) для описания ударной адиабаты дейтерия [21, 22].

Ход ударной адиабаты CH_4 хорошо отвечает опыту, если предположить, что метан инертен в УВ. Учет его равновесной диссоциации почти не влияет на положение кривой $p(v)$. Предположение о полном распаде CH_4 на углерод и водород приводит к существенному завышению давления.

При динамическом сжатии СО (рис. 2, б) экспериментальные точки [14] по мере повышения давления последовательно (и логично) переходят с кривой инертного сжатия на кривую, рассчитанную в предложении образования углерода в виде графита, а при высоком давлении — в виде алмаза. Расчет, выполненный в [14] при условии, что за фронтом УВ углерод получается в виде графита, с опытом общих точек не имеет.

Расчетная кривая ударного сжатия аммиака практически совпадает с экспериментальными точками [20, 23] во всем интервале изменения p и v . Кривая, рассчитанная по уравнению [1], лежит значительно (на 20—30%) выше опытной.

Ударной адиабаты окиси азота, к сожалению, в нашем распоряжении нет. Получить ее сложно, поскольку оказалось [33], что жидккая окись азота — довольно чувствительное ВВ. Поэтому величина k для NO принята такой же, как для N_2 , CO и O_2 , а параметры потенциала определены на основании данных [33]. Согласие расчета с опытом показано в табл. 2. Впрочем, применительно к расчету параметров детонации возможные неточности в уравнении состояния NO малосущественны.

Таблица 2

Сравнение результатов расчета с опытом и с расчетами [1, 3, 5–7]

ВВ	Параметры	Экспериментальные данные	Данная работа	[1]	[3]	[5–7]
$C_7H_5N_3O_6$ ($\rho = 1,64$)	D	7000	7097	7197	6878	7110
	p	19,0	19,5	21,3	18,3	20,1
	T	—	3594	2829	3662	3618
$(\rho = 1,06)$	D	5254	5197	5320	5150	5312
	p	—	7,7	8,4	7,8	7,7
	T	—	3503	—	3658	3333
$C_6H_6N_6O_6$ ($\rho = 1,895$)	D	7860	8126	8411	8458	8085
	p	31,5	30,5	32,6	30,4	31,4
	T	—	2651	1887	3270	2979
$C_6N_6O_6$ ($\rho = 1,859$)	D	8485	8465	8156	8241	—
	p	—	34,0	32,5	33,2	—
	T	—	5693	4059	5344	—
$C_3H_6N_6O_6$ ($\rho = 1,80$)	D	8800	8824	8754	8778	8835
	p	34,7	34,6	34,7	32,6	35,6
	T	3700	3818	2587	4027	4074
$C_5H_8N_4O_{12}$ ($\rho = 1,77$)	D	8300	8448	8421	8087	8416
	p	33,5	31,2	31,8	28,5	31,5
	T	4200	4257	2833	4378	4349
$C_3H_5N_3O_9$ ($\rho = 1,6$)	D	7650	7588	7700	7111	7687
	p	—	21,9	24,5	20,0	23,4
	T	4260	4648	3216	4593	4582
CN_4O_8 ($\rho = 1,64$)	D	6360	6323	6421	5734	—
	p	15,9	15,6	16,2	13,4	—
	T	2800	2353	1341	2277	—
NO ($\rho = 1,3$)	D	5620	5677	5607	5145	—
	p	10,3	10,2	10,6	9,1	—
	T	—	2458	1854	2635	—
ГН/Г 30/70 ($\rho = 1,14$)	D	7870	7720	9393	9240	—
	p	16,9	16,0	22,7	20,1	—
	T	2180	1966	1008	1816	—

Примечание. D — в м/с, p — в ГПа, T — в К, ρ — в кг/м³, ГН/Г — смесь гидразин нитрата с гидразином.

венные, поскольку во всех случаях, в том числе и при детонации жидкой окиси азота, содержание NO в продуктах детонации очень мало.

Перейдя, таким образом, к рассмотрению данных по детонации, начнем с возможного более простых веществ. Зависимость скорости детонации смесей жидкого озона и кислорода от содержания последнего (с естественным для криогенной системы значительным разбросом результатов) приведена в [3]. Для расчета скорости детонации в этой системе необходимо лишь уравнение состояния кислорода. Вычисленная по данным табл. 1 скорость детонации показана на рис. 3,2. Она хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Оригинальные и весьма сложные в исполнении измерения скорости детонации растворов азотисто-водородной кислоты выполнены в рабо-

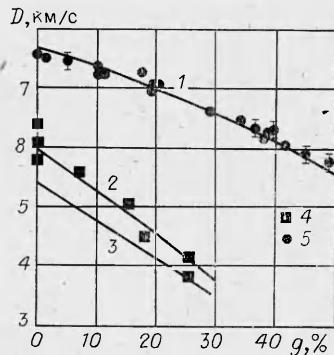


Рис. 3. Зависимость скорости детонации смесей O_3/O_2 и HN_3/H_2O от массового содержания O_2 и H_2O соответственно. Точки — опыт: 4 — [3], 5 — [34]; кривые — расчет: 1, 2 — по данным табл. 1, 3 — [3].

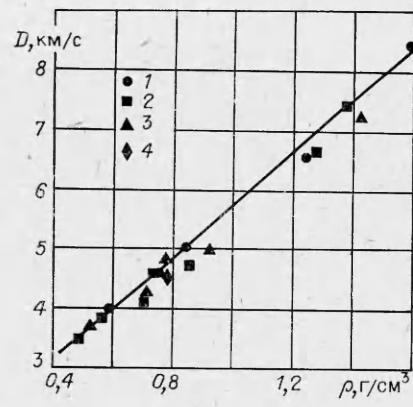


Рис. 4. Зависимость скорости детонации нитрата гидразина от плотности заряда. Диаметр заряда, см: 1 — 6,35, 2 — 4,14, 3 — 2,54, 4 — 1,27.

те [34]. Полученные результаты нанесены на рис. 3. Расчетная кривая для предполагаемых основных продуктов взрыва (N_2 , H_2 , NH_3 , H_2O и O_2) с хорошей точностью описывает опыт.

Скорость детонации нитрата гидразина измерена в [35] (цитируется по [36]). Кривая, рассчитанная для тех же пяти основных продуктов детонации, приведена на рис. 4. Экспериментальные точки для большого диаметра заряда практически не отклоняются от расчетной кривой.

Включение в схему веществ, содержащих значительное количество углерода, приводит к проблеме выбора уравнения состояния для твердых продуктов превращения. В работах [1, 3—7] углерод взят в виде графита, в [37] указано, что при высоком давлении основной модификацией углерода, по-видимому, является алмаз. Наш расчет проведен в предположении, что углерод выделяется в виде графита. Согласие расчета с опытом по скорости (рис. 5) и по давлению детонации хорошее во всем интервале изменения плотности заряда. Небольшой излом на зависимости $D(\rho_0)$ гексогена (при $\rho_0 = 1,25$ г/см³) связан, очевидно, с переходом через точку, в которой в продуктах взрыва появляется свободный углерод. Кривая $D(\rho_0)$ тротила изломов не имеет и хорошо со-

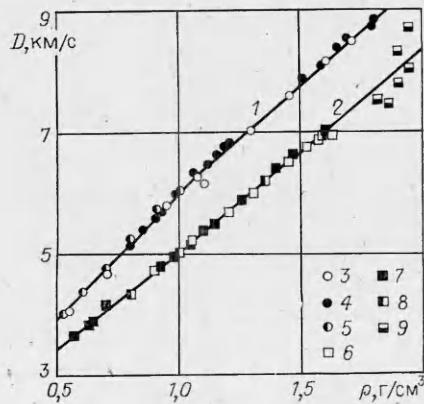


Рис. 5. Зависимость скорости детонации от плотности заряда для гексогена и тротила.

Кривые — расчет: 1 — гексоген, 2 — тротил; точки — опыт: 3 — [12], 4 — [38], 5 — [39], 6 — [40], 7 — [38], 8 — [41], 9 — [42].

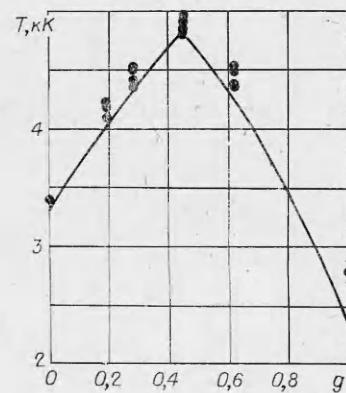


Рис. 6. Зависимость температуры детонации смесей нитрометан — тетранитрометан.

Кривая — расчет, точки — опыт [30] (g — массовая доля тетранитрометана в смеси).

Таблица 3

Расчетный состав продуктов детонации

ВВ	Состав продуктов детонации, моль/кг									
	N ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	H ₂	O ₂	C	NH ₃	CH ₄	NO
C ₇ H ₅ N ₃ O ₆ (ρ = 1,64 кг/м ³) (ρ = 1,00 кг/м ³)	6,20 6,45	0,88 9,40	9,31 6,91	6,93 3,18	1,43 4,00	— —	19,92 12,82	0,81 0,31	0,72 1,68	— —
HM/THM 81,4/16,6	8,05	3,12	9,97	11,20	4,86	—	—	1,03	1,20	—
HM/THM 38,4/61,6	8,49	—	9,42	9,41	—	3,79	—	—	—	1,88
ГН/Г 30/70	13,27	—	—	9,47	2,18	—	—	26,61	—	—

Примечание: HM/THM — смесь нитрометана с тетранитрометаном.

гласуется со всеми экспериментальными данными, за исключением одной точки, полученной в [40] при $\rho_0 = 1,635 \text{ г/см}^3$. Эта экспериментальная точка лежит на 120 м/с ниже расчетной кривой. Возможно, что при $p \approx 20 \text{ ГПа}$ часть углерода все же выделяется в виде алмаза, хотя для ударного сжатия CO (см. рис. 2, б) точка при $p = 25 \text{ ГПа}$ (и при температуре гораздо более высокой, чем при детонации) лежит еще на кривой, где углерод выделяется в виде графита. Не исключено поэтому, что несмотря на значительный диаметр заряда и применение массивной оболочки, детонация тротила в опытах [40] нестационарна и скорость ее ниже «идеальной».

Точность измерения D при высокой плотности заряда во многих случаях сейчас гораздо выше той, которую разрешает графическое изображение кривых на рис. 5. Поэтому для нескольких веществ сравнение экспериментальных и расчетных характеристик по нашим данным и данным работ [1, 3, 5—7] приведено в табл. 2. Видно, что в большинстве случаев наши результаты ближе к опыту.

Особо следует сказать о температуре продуктов детонации. Этот вопрос в течение продолжительного времени изучался весьма обстоятельно. Высказывались предположения порой довольно неожиданные. Серьезно обсуждалось, например, не равна ли температура детонации при $\rho_0 \approx 2 \text{ г/см}^3$ абсолютному нулю. Опыт показал (см. табл. 2), что для такой крайней точки зрения нет никаких оснований. Очевидно, применение «жесткого» степенного потенциала (также как уравнения (1)) существенно завышает упругую часть давления. Более «мягкий» экспоненциальный потенциал дает результаты, хорошо согласующиеся с опытом. Систематическое изучение детонации смесей нитрометана с тетранитрометаном (рис. 6) показывает хорошее согласие измеренной температуры детонации [30] с рассчитанной по предлагаемому методу. Разница в среднем, за исключением точки для тетранитрометана, не превышает 100—200 К, т. е. лежит в пределах погрешности измерений.

Последний вопрос, требующий рассмотрения,—расчетный состав продуктов взрыва. В точке Жуге состав продуктов реакции пока не измерен. Однако при проведении опытов в массивной оболочке получается состав, не сильно отличающийся от того, который имеет место в точке Жуге [45]. В этом плане серьезные сомнения вызывает, например, метод [5—7], согласно которому в находящихся в состоянии термодинамического равновесия продуктах детонации тэна и октогена отсутствует углерод, обнаруженный на опыте. В ходе расширения при условии термодинамического равновесия углерод, если его нет в точке Жуге, образоваться не может. Разумеется, нереален и состав продуктов распада

высокоплотного гексогена, предложенный в [12], и также не содержащий свободного углерода. Данные по равновесному составу продуктов детонации в точке Жуге для нескольких веществ приведены в табл. 3. Особо следует отметить образование при детонации Н-, Н-, О-систем значительных количеств аммиака, а в случае тротила и смеси нитрометан — тетранитрометан в соотношении 81,4/18,6 — заметного количества метана.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ч. Мейдер. Численное моделирование детонации. М.: Мир, 1985.
2. Б. Н. Зубарев, Г. С. Телегин. Докл. АН СССР, 1962, 142, 2, 309.
3. W. Fickett. Detonation properties of condensed explosives calculated with an equation of state based on intermolecular potentials. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA — 2712, 1962.
4. Б. Н. Зубарев, А. А. Евстигнеев. ФГВ, 1984, 20, 6, 114.
5. R. Chirat, G. Pittion-Rossillion. J. Chem. Phys., 1981, 74, 8, 4634.
6. R. Chirat, G. Pittion-Rossillion. 7-th Symp. (Intern.) on Detonation. Maryland, 1981.
7. R. Chirat, G. Pittion-Rossillion. Comb. Flame, 1982, 45, 2, 147.
8. M. Ross. J. Chem. Phys., 1979, 71, 4, 4567.
9. M. Ross, F. H. Ree. J. Chem. Phys., 1980, 73, 12, 6146.
10. M. A. Cook. The science of high explosives. London: Reinhold Publ. Corp. 1958.
11. M. Finger, E. Lee e. a. 6-th Symp. (Intern.) on Detonation. San Diego, 1976.
12. Н. М. Кузнецов, К. К. Шведов. ФГВ, 1966, 2, 4, 85.
13. R. D. Cowan, W. Fickett. J. Chem. Phys., 1956, 24, 5, 932.
14. W. J. Nellis, F. H. Ree e. a. J. Chem. Phys., 1981, 75, 6, 3055.
15. R. D. Dick. J. Chem. Phys., 1970, 52, 12, 6021.
16. W. J. Nellis, A. C. Mitchell. J. Chem. Phys., 1980, 73, 12, 6137.
17. J. Wackerle, W. L. Seitz, J. C. Jamieson. Behavior of dense media under high dynamic pressure. N. Y., 1968.
18. И. И. Шарипджанов, Л. В. Альтшулер, С. Е. Брускинин. ФГВ, 1983, 49, 5, 149.
19. J. M. Walsh, M. H. Rose. J. Chem. Phys., 1957, 26, 4, 815.
20. A. C. Mitchell, W. J. Nellis. J. Chem. Phys., 1982, 76, 12, 6273.
21. R. D. Dick, G. I. Kerley. J. Chem. Phys., 1980, 73, 12, 5264.
22. W. J. Nellis, A. C. Mitchell e. a. J. Chem. Phys., 1983, 79, 3, 1480.
23. R. D. Dick. J. Chem. Phys., 1981, 74, 7, 4053.
24. W. J. Nellis, F. H. Ree e. a. J. Chem. Phys., 1981, 75, 6, 3055.
25. В. Н. Жарков, В. А. Калинин. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
26. Р. С. Lysne, D. E. Hardisty. J. Chem. Phys., 1973, 59, 12, 6512.
27. Б. Н. Кондриков, В. М. Райкова. Расчет параметров уравнения состояния. М., МХТИ им. Д. И. Менделеева, 1981.
28. И. М. Воскобойников, М. Ф. Гогуля, А. Ю. Долгобородов. Докл. АН СССР, 1979, 246, 9, 579.
29. G. A. Lyzenga, T. A. Ahrens e. a. J. Chem. Phys., 1982, 76, 12, 6282.
30. Y. Kato, P. Bauer e. a. 7-th Symp. (Intern.) on Detonation. Maryland, 1981.
31. С. Б. Кормер. УФН, 1965, 85, 2, 197.
32. F. H. Ree. J. Chem. Phys., 1982, 76, 12, 6287.
33. J. B. Ramsay, W. C. Chiles. 6-th Symp. (Intern.) on Detonation. San Diego, 1976.
34. Г. С. Яковleva. Канд. дисс. Черноголовка, 1981.
35. D. Price, T. P. Liddiard, Jr., R. D. Drosd. The detonation behavior of hidrazine mononitrate. NOL Report, NOLTR66-31, 1966.
36. K. Tanaka. J. Ind. Expl. Soc., Japan, 1982, 43, 5, 335.
37. С. А. Губин, В. В. Однцов, В. И. Пепекин. Хим. физика, 1984, 3, 5, 754.
38. Л. Н. Стесик, Л. Н. Акимова.— В кн.: Физика взрыва № 5. М.: Изд-во АН СССР, 1956.
39. Л. Н. Стесик, И. С. Шведова. ПМТФ, 1964, 4, 124.
40. M. J. Urizar, E. James, L. C. Smith. Phys. Fluids, 1961, 4, 2, 262.
41. А. Н. Дремин, С. Д. Савров, В. С. Трофимов и др. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука, 1970.
42. В. И. Таржанов. ФГВ, 1976, 12, 6, 924.
43. В. А. Веретенников, А. И. Дремин, К. К. Шведов. ФГВ, 1965, 1, 3, 3.
44. A. N. Dremin, V. M. Zaitzev e. a. 8-th Symp. (Intern.) on Combustion. Pasadena, 1960.
45. D. L. Ornellas. Comb. Flame, 1974, 23, 1, 37.