

Таким образом, в настоящей работе предложен подход к созданию эффективных методов с автоматическим выбором величины шага интегрирования на основе комбинирования явной и неявной численных схем. Разработан алгоритм второго порядка точности, включающий одношаговые безытерационные методы: L -устойчивый (m, k) -метод и явную формулу типа Рунге — Кутты. При расчете по (m, k) -методу осуществляется замораживание матрицы Якоби, которая вычисляется как численно, так и аналитически. Выбор численной схемы происходит автоматически из условия устойчивости явной формулы. Численные эксперименты показали эффективность алгоритма для моделирования процессов самовоспламенения с учетом детальной кинетики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kee R. J., Dwyer II. A. Combustion in Reactive Systems. Progr. Astron. Aeron., 1979, 76, 485.
2. Баев В. К., Головичев В. И., Третьяков П. К. и др. Горение в сверхзвуковом потоке.— Новосибирск: Наука, 1984.
3. Byrne G. D., Hindmarsh A. C. J. Comput. Phys., 1987, 70, 1.
4. Radhakrishnan K. AIAA J., 1987, 25, 11, 1449.
5. Yong T. R., Boris J. P. J. Phys. Chem., 1977, 81, 2424.
6. Бабушок В. И., Крахтинова Т. В., Бабкин В. С. Кинетика и катализ, 1984, 25, 1, 5.
7. Азатян В. В. ФГВ, 1979, 15, 5, 62.
8. Shampine L. F. Math. of Comput., 1981, 36, 499.
9. Новиков Е. А. Докл. АН СССР, 1984, 278, 2, 272.
10. Kahlert C., Rösler O. E., Varma A. // Modelling of Chemical Systems. Springer Ser. in Chem. Phys., 1981, 18, 355.
11. Бабушок В. И., Новиков Е. А., Бабкин В. С. Докл. АН СССР, 1983, 271, 4, 878.
12. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений/Под ред. Дж. Холла и Дж. Уатта.— М.: Мир, 1979.
13. Rosenbrock H. H. Computer J., 1963, 5, 329.
14. Kaps P., Rentrop P. Numer. Math., 1979, 33, 55.
15. Новиков В. А., Новиков Е. А. ЖВММФ, 1985, 25, 7, 1023.
16. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. // Математические модели и методы решения задач механики сплошной среды.— Красноярск, 1986.
17. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. Исследование (m, k) -методов решения жестких систем с одним и двумя вычислениями правой части.— Красноярск 1987.— (Препр./СО АН СССР. ВЦ; № 15).
18. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. Алгоритм интегрирования жестких систем на основе (m, k) -метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби.— Красноярск, 1987.— (Препр./СО АН СССР. ВЦ; № 20).
19. Деккер К., Вервер Я. Устойчивость методов Рунге — Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений.— М.: Мир, 1988.
20. Демидов Г. В., Новиков Е. А. ЧММСС, 1985, 16, 1, 27.
21. Новиков Е. А. Докл. АН СССР, 1984, 278, 2, 272.
22. Enright W. H., Hull T. E. // Numerical Methods for Differential Systems.— N. Y.: Academic Press, 1976.
23. Hindmarsh A. C. Ordinary Differential Equations System Solver.— UCID-3001, Rev. 3, Univ. California, 1974.

г. Новосибирск

Поступила в редакцию 18/XI 1988

УДК 541.1.034

А. Г. Белошапко, А. А. Букаемский, А. М. Ставер

ОБРАЗОВАНИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ ПОРИСТОГО АЛЮМИНИЯ. ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЧАСТИЦ

Необычные физические свойства ультрадисперсных частиц и их ансамблей представляют значительный научный и прикладной интерес. При этом для изучения и практического использования физических свойств ультрадисперсных сред необходимо получение порошков с узким

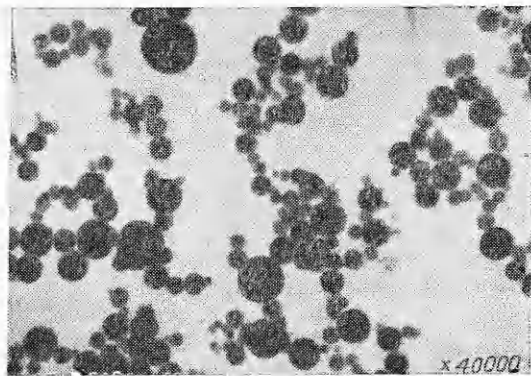


Рис. 1. Частицы окиси алюминия ($\times 40\,000$).

полученные при электрическом взрыве проводников. Обнаружено, что функция распределения по размерам отличается от логарифмически нормальной, имеет положительную асимметрию и два максимума в областях 10^{-7} — 10^{-8} и 10^{-4} — 10^{-5} м, что соответствует различным механизмам образования частиц. Существуют и другие способы получения ультрадисперсных порошков — механическое измельчение, конденсация в вакууме или в атмосфере газа при пониженном давлении, плазмохимический и др. [4].

Настоящая работа посвящена исследованию образования ультрадисперсных соединений при ударно-волновом нагружении слоя порошка Al контактным зарядом ВВ и последующем разлете во взрывную камеру.

В ряде работ [3, 4] рассматривалось влияние добавки Al на детонацию, разлет продуктов взрыва, фугасное и метательное действия ВВ и рассмотрен процесс окисления алюминия. Но нам не известны работы, в которых проводились систематические исследования полученных после взрыва порошков окиси. При детонации алюминизированных ВВ существуют также ограничения по массе порошка Al, которая не должна превышать нескольких десятков процентов от полной массы ВВ.

В работе экспериментальная сборка состояла из заряда ВВ цилиндрической формы диаметром 30, высотой 50 мм, окруженного слоем алюминиевой пудры ПАП-1 насыпной плотности $\rho = 0,35$ г/см³. Внешний диаметр слоя порошка менялся в зависимости от условий эксперимента от 50 до 90 мм. Применяли следующие ВВ — аммонит 6ЖВ, насыпной гексоген, литой тротил и сплав ТГ 50/50. Заряд инициировали с торца электродетонатором. Эксперименты проводили в герметичной взрывной камере, что позволяло перед подрывом заполнять ее различными газами: азотом, кислородом, углекислым газом, воздухом под давлением, равным атмосферному и выше. Отдельно проводили эксперименты с алюминиевым порошком АП-4 с $\rho = 1,35$ г/см³ и пудрой ПАП-1 с $\rho = 0,6$ г/см³. Исследовали также плоское нагружение слоя порошка Al от контактного заряда ВВ в режиме скользящей детонации, но для систематического изучения выбрали цилиндрическую постановку.

Для изучения вида частиц, определения их среднего размера и функции распределения применялся электронный микроскоп. На полученной фотографии (рис. 1) видно, что все частицы имеют шарообразную форму. При удачном совпадении фокуса микроскопа и положения частицы на некоторых фотографиях видна огранка и число граней равно восьми. Для каждого эксперимента проводился замер максимально возможного количества частиц (500—2000 шт.), вычислялся средний диаметр d , строилась функция распределения и вычислялись ее параметры. Фазовый состав полученных порошков изучался на установке ДРОН-3. Рентгенограммы расшифровывали по данным американского каталога ASTM. Оказалось, что полученные порошки состоят из окиси алюминия в α - и δ -мо-

распределением частиц по размерам, так как в противном случае отличительные свойства малых частиц могут быть сглажены [4]. Также желательно знать вид и параметры функции распределения, средний размер частиц, химический и фазовый состав полученных порошков. Это накладывает определенные ограничения на методы получения ультрадисперсных частиц. Например, в работе [2] исследовались частицы алюминия и окиси меди,

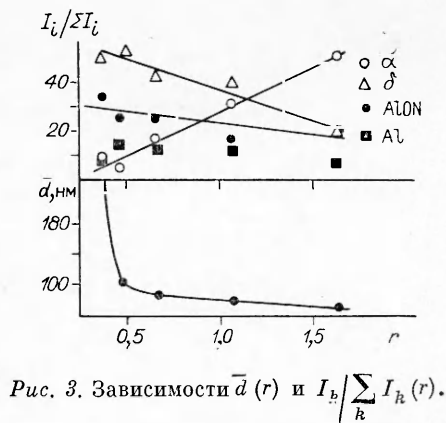
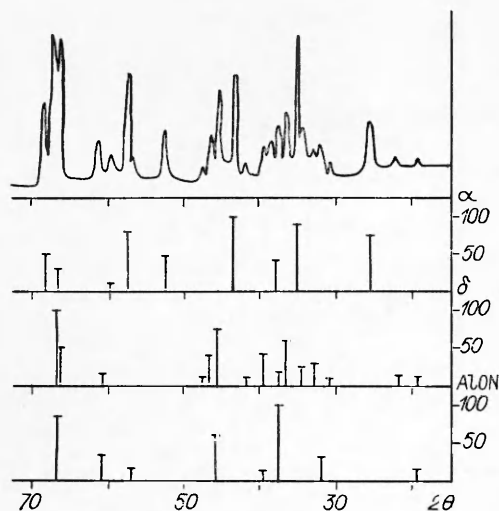


Рис. 3. Зависимости $\bar{d}(r)$ и $I_i / \sum_k I_k(r)$.

Рис. 2. Рентгенограмма порошка и данные каталога ASTM для α -, δ - и нитридосодержащей фаз окиси алюминия.

дификациях и нитридосодержащей фазы окиси, в которой кислород частично замещен азотом. Химическая формула этого соединения: $Al\left(\frac{8}{3} + \frac{x}{3}\right)O_{1-x}N_x$, где $0,22 < x < 0,5$.

Типичная рентгенограмма и данные каталога ASTM для обнаруженных фаз окиси приведены на рис. 2. Одновременное присутствие в порошках трех фаз окиси делает невозможным проведение количественного анализа. Качественно динамику содержания в порошке конкретной фазы в зависимости от условий эксперимента отражает нормированная величина амплитуды максимального пика $I_k^* / \sum_k I_k$. Условно процесс образова-

вания ультрадисперсных соединений можно разделить на стадию нагружения слоя порошка Al ударной волной и стадию разлета. Для изучения стадии нагружения провели серию экспериментов (рис. 3), в которых за счет изменения толщины слоя порошка изменялось отношение массы ВВ к массе Al: $r = m_{ВВ} / m_{Al}$. В других опытах слой порошка нагружался различными ВВ.

В первой серии в качестве ВВ использовали аммонит 6ЖВ. Из рис. 3 видно, что при изменении r от 0,37 до 1,64 средний размер уменьшается от 296 до 72 нм. С уменьшением размера полученных частиц возрастает содержание α -фазы Al_2O_3 (корунда), а δ - и нитридосодержащей фаз уменьшается.

При использовании различных ВВ обнаружено, что с повышением мощности ВВ возрастает и средний размер полученных частиц. Так, при нагружении слоя пористого Al аммонитом 6ЖВ образовались частицы с $\bar{d} = 106$ нм, гексогеном насыпной плотности, литым тротилом и сплавом ТГ 50/50 — соответственно 200, 287 и 299 нм.

Для изучения стадии разлета перед подрывом взрывная камера заполнялась азотом, кислородом, углекислым газом или воздухом под давлением; ВВ — гексоген, $r = 0,54$. Из рис. 4 видно, что с увеличением начального давления в камере p_0 уменьшается средний размер получаемых частиц. По данным рентгеноструктурного анализа с уменьшением \bar{d} возрастает доля α -фазы Al_2O_3 , содержание δ - и нитридосодержащей фазы убывает.

При взрывании в атмосфере углекислого газа значительная часть Al не прореагировала. В атмосфере кислорода образовались частицы с $\bar{d} = 87$ нм, преимущественно в α -модификации. В экспериментах с азотной атмосферой получен порошок ($\bar{d} = 143$ нм), в котором по сравнению с аналогичным экспериментом в воздухе ($\bar{d} = 200$ нм) содержание δ -фазы окиси возросло, а нитридосодержащей фазы уменьшилось. Таким обра-

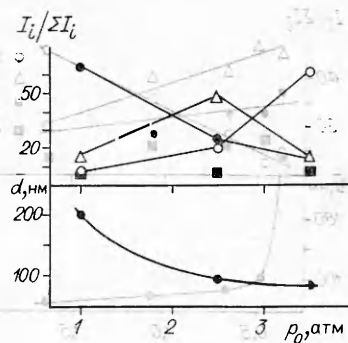


Рис. 4. Зависимости $\bar{d}(p_0)$ и $\bar{I}_k / \sum_k \bar{I}_k(p_0)$.

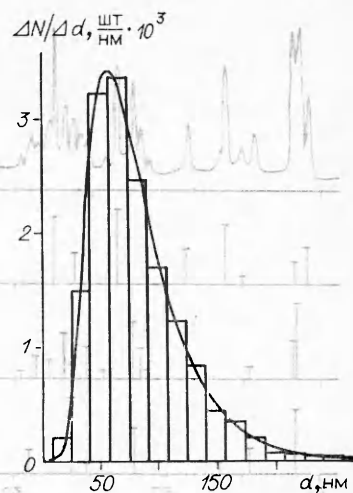


Рис. 5. Экспериментальная и теоретическая функции распределения частиц по размерам ($\exp(\ln \bar{d}) = 73$ нм, $\ln \sigma = 0,47$).

зом, в атмосфере азота преимущественно образуется δ -фаза Al_2O_3 , а в атмосфере воздуха — нитридосодержащая фаза.

В работах [5, 6] представлены результаты рентгеноструктурного и электронографического анализа ультрадисперсных частиц окиси алюминия, полученных окислением Al в твердом и жидком состоянии. Показано, что при $d > 100$ нм частицы многофазны; по мере уменьшения d увеличивается доля высокотемпературных фаз в ее составе (β - и γ -фазы); поверхностные слои частицы состоят из высокотемпературных, более «рыхлых» модификаций; в ультрадисперсных средах могут существовать кристаллические структуры, метастабильные для массивных материалов. В породах Al_2O_3 , полученных при ударно-волновом нагружении пористого алюминия, наблюдается аналогичная картина. Для частиц с $d < 100$ нм с уменьшением размера резко возрастает доля α -фазы. Более крупные частицы состоят из α -, δ - и нитридосодержащей фазы окиси. Можно предположить, что частицы являются многофазными. Центральная часть состоит из α -модификации Al_2O_3 , поверхностный слой из δ - и нитридосодержащей фаз и его толщина возрастает с увеличением \bar{d} . Поэтому доля α -фазы в частицах с $d > 100$ нм, по данным рентгеноструктурного анализа, приближается к уровню фона, так как значительную часть объема частицы составляют поверхностные δ - и нитридосодержащие модификации окиси. δ -фаза метастабильна для массивных материалов.

Функции распределения частиц по размерам строили путем статистической обработки электронно-микроскопических снимков. При помощи критерия Колмогорова оценивалось согласие между теоретическими и эмпирическими распределениями. Установлено, что распределение частиц по размерам для всех экспериментов соответствует логарифмически нормальному

$$\Delta N = f(d) \Delta(\ln d),$$

$$f(d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \ln \sigma}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\ln d - \ln \bar{d}}{\ln \sigma} \right)^2 \right\},$$

где $\ln \bar{d}$ — средний логарифм размера частиц; σ — дисперсия; $f(d)$ — плотность распределения; ΔN — число частиц в логарифмическом интервале $\Delta(\ln d)$. Максимальное отклонение экспериментальной и теоретической функций распределения не превышает 5%. Из графика распределения частиц по размерам в логарифмически вероятностных координатах вычислялись параметры $\ln \bar{d}$ и σ . Величина дисперсии для всех экспериментов лежит

в интервале $1,53 < \sigma < 1,65$. Для примера на рис. 5 приведены экспериментальное и теоретическое распределения частиц по размерам, полученных в эксперименте с $r = 0,47$ из первой серии.

Вид функции распределения взаимосвязан с механизмом образования и методом получения частиц. В [1] показано, что если в росте частиц доминирующую роль играют процессы коалесценции, их распределение по размерам имеет логарифмически нормальный характер.

Полученные результаты показывают, что наиболее мелкие частицы ($\bar{d} < 100$ нм) образуются в экспериментах с повышенным p_0 , в кислородной атмосфере (в качестве ВВ использовался гексоген) и при нагружении аммонитом 6ЖВ тонких слоев порошка Al. Общее в этих экспериментах по сравнению с другими — повышенное отношение количества кислорода в камере к количеству исходного алюминиевого порошка. Можно предположить, что вследствие этого Al окисляется более интенсивно, окисленный продукт за счет резкого возрастания температуры быстро расширяется, что приводит к уменьшению концентрации паров окиси. В дальнейшем происходит рост частиц по механизму жидкокапельной коалесценции, при этом величина \bar{d} зависит от концентрации пара: с понижением исходной концентрации уменьшается и \bar{d} .

Увеличение массы метаемого порошка (в первой серии $r_{\max}/r_{\min} = 4,37$) приводит также к возрастанию концентрации паров окиси, а следовательно, и среднего размера получаемых частиц. Рост толщины слоя снижает скорость метания слоя, что приводит к уменьшению скорости окисления алюминия v . Таким образом, возрастание \bar{d} связано с уменьшением величины v , например за счет понижения концентрации кислорода внутри камеры или уменьшения скорости метания слоя.

В эксперименте с азотной атмосферой получены частицы с $\bar{d} = 143$ нм, а в аналогичном эксперименте в воздухе $\bar{d} = 200$ нм. Азот не вступает в реакцию с алюминием, и частицы окиси образуются за счет кислорода, содержащегося в ВВ и оставшегося во взрывной камере после прокачки азотом. Таким образом, окисляется только часть Al, образуется невысокая концентрация паров окиси и происходит их быстрое охлаждение в среде нейтрального газа. Следовательно, на стадии разлета существенны два фактора: нагрев разлетающихся продуктов за счет окисления Al и их охлаждение при расширении.

При использовании различных ВВ наиболее мелкие частицы образуются в случае нагружения аммонитом 6ЖВ. Это, по-видимому, связано с тем, что аммонит обладает нулевым кислородным балансом. С увеличением мощности ВВ возрастает количество испаренного в ударной волне Al. Но, вероятно, на начальной стадии разлета Al начинает реагировать с кислородом, находящимся в составе ВВ. Это приводит к возрастанию температуры в слое порошка, увеличению степени испарения, т. е. создаются более благоприятные условия для окисления алюминия кислородом, содержащимся в атмосфере камеры, что, в свою очередь, приводит к уменьшению среднего размера частиц по механизму, описанному выше.

Таким образом, можно предположить, что при нагружении слоя порошка Al контактным зарядом ВВ и последующем разлете образование и рост ультрадисперсных частиц окиси осуществляется по следующему механизму. При сжатии порошка в ударной волне происходит расплав и частичное испарение частиц алюминия, т. е. подготовка к окислению. При разлете частицы Al, встречаясь с кислородом, содержащимся в ВВ и атмосфере камеры, окисляются. При этом возрастает температура и происходит диспергирование окисла в жидкой фазе, например за счет испарения или абляции. В дальнейшем рост частиц происходит по механизму жидкокапельной коалесценции.

Авторы работы выражают благодарность Н. Э. Лямкиной за помощь в проведении электронно-графических исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Морохов И. Д. и др. Физические явления в ультрадисперсных средах.— М.: Энергоатомиздат, 1984.
2. Котов Ю. А., Яворский Н. А. Физика и химия обработки материалов, 1974, 4, 24.
3. Анискин А. И. // Детонация и ударные волны. Материалы VIII Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1986.
4. Кук М. А. Наука о промышленных взрывчатых веществах.— М.: Недра, 1980.
5. Дубинина А. И., Ахтямов Р. А., Трусов Л. И. Кристаллография, 1981, 26, 3, 637.
6. Морохов И. Д., Трусов Л. И., Лаповок В. И. и др. Докл. АН СССР, 1980, 251, 79.

г. Красноярск

Поступила в редакцию 26/VIII 1988,
после доработки — 10/VIII 1989

УДК 534.222.2

А. В. Дубовик

СПОСОБ ОПИСАНИЯ УДАРНО-ВОЛНОВОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ТВЕРДЫХ ВВ

Выполнен анализ фрикционного разогрева и воспламенения на плоскостях скольжения между частицами твердых ВВ во фронте ударной волны (УВ) и рассчитаны критические давления инициирования УВ пористых зарядов тротила, гексогена и тэна. Решающая роль механизма трения — скольжения в возбуждении взрыва в твердых ВВ при ударе подчеркивалась в работах [1—3].

Из-за случайной ориентации зерен фронт УВ в заряде пористого ВВ представляется в виде суперпозиции множества элементарных ударно-волновых возмущений, распространяющихся от зерна к зерну. Траектории этих возмущений не прямолинейны, и вызванные ими массовые движения частиц (струй) не скоррелированы между собой, по крайней мере, в течение малого времени $\sim r/U$ (r — размер частиц, U — скорость УВ в заряде ВВ).

При выходе элементарной УВ на свободную поверхность зерна последняя, а затем и все зерно целиком (или его отколовшаяся часть) приходят в движение с удвоенной скоростью массового потока u_0 . Двигаясь вдоль поры до момента столкновения с расположенным впереди зерном, струя ВВ взаимодействует боковыми сторонами с окружающими зернами вещества, часть которых в рассматриваемый момент времени может быть еще неподвижна. Максимальная сила трения на возникающих фрикционных контактах достигает предела прочности зерна на сдвиг $\sigma/\sqrt{3}$ (выполняется условие текучести Мизеса), что позволяет рассматривать эти контактные границы как плоскости скольжения, ориентированные преимущественно по нормали к фронту УВ в заряде ВВ.

В случае открытой пористости заряда продолжительность фрикционного контакта составляет $t_0 \neq r/2u_0$, при замкнутой пористости $t_0 = d/u_0$ (d — размер пор).

Температуру на плоскостях скольжения между зернами ВВ считаем по формуле Карслоу — Егера [2] с тепловым источником $2u_0\sigma(T)/\sqrt{3}$

$$T(t) = T_0 + (u_0/\sqrt{3\pi h_0}) \int_0^t \sigma(T(\tau))(t-\tau)^{-1/2} d\tau. \quad (1)$$

Здесь $h_0 = \lambda_0 \rho_0 c_v^0$ — тепловая активность ВВ.

В случае линейной связи $\sigma(T) = \sigma_0(T_{пл} - T)/(T_{пл} - T_0)$ ($T_{пл}$ — температура плавления ВВ, зависящая от давления: $T_{пл} = T_{пл}^0 + \beta p_0$) запись (1) является линейным интегральным уравнением, решение которого,