

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Кемеровский государственный университет
Институт фундаментальных наук

На правах рукописи

ГАЛКИНА ЕЛЕНА ВЛАДИМИРОВНА

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ
ПЕНТАЭРИТРИТТЕТРАНИТРАТА, СОДЕРЖАЩЕГО
НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ, В ТОМ ЧИСЛЕ СО
СТРУКТУРОЙ «ЯДРО-ОБОЛОЧКА»**

специальность 1.4.4 – “Физическая химия”

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических
наук, доцент
Звеков А. А.

Кемерово 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.....	13
1.1. Экспериментальное исследование закономерностей взрывного разложения композитов на основе PETN и светопоглощающих наночастиц.....	13
1.2 Оптические свойства наночастиц металлов.....	20
1.3 Синтез и использование наночастиц металлов со структурой ядро-оболочка	25
1.4 Выводы.....	30
ГЛАВА 2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ PETN С ВКЛЮЧЕНИЯМИ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ.....	31
2.1 Микроочаговая модель теплового взрыва импульсного инициирования взрывного разложения PETN, с включением наночастиц металлов.....	31
2.2 Методика моделирования кинетики быстропротекающих процессов.....	34
2.3 Программа для расчета критических параметров инициирования взрывного разложения нанокомпозитов PETN/Me..	39
2.4 Выводы.....	41
ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ КОМПОЗИТОВ PETN/Me ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ.....	42
3.1 Моделирование быстропротекающих процессов в композитах PETN с наночастицами металла.....	42
3.2 Теплофизические радиусы наночастиц металлов в PETN.....	45
3.3 Инвариант микроочаговой модели лазерного инициирования композитов PETN – наночастицы металлов.....	54

3.4 Выводы.....	57
ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ “ЯДРО-ОБОЛОЧКА”.....	
4.1 Оптические свойства наночастиц металлов с оксидной оболочкой.....	59
4.2 Оптические свойства наночастиц алюминия с оксидной оболочкой в прозрачных средах.....	65
4.3 Факторы эффективности поглощения окисленных наночастиц алюминия.....	70
4.4 Выводы.....	72
ГЛАВА 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ PETN С НАНОЧАСТИЦАМИ МЕТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ “ЯДРО-ОБОЛОЧКА” ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ.....	
5.1 Кинетическая модель лазерного импульсного инициирования взрывного разложения композитов ВВ, содержащих наночастицы со структурой «ядро-оболочка».....	73
5.2. Кинетические закономерности нагревания композитов PETN – наночастицы алюминия с учетом оксидной оболочки.....	79
5.3. Особенности кинетических закономерностей инициирования взрывного разложения	87
5.4 Расчет критических параметров инициирования взрывного разложения композитов PETN – наночастицы алюминия с учетом оксидной оболочки.....	92
5.5 Выводы.....	98
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	99
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ.....	102
СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	104

ВВЕДЕНИЕ

Методы численного моделирования все шире используются в практических приложениях и реальном секторе экономики [1], став популярными как в сельском хозяйстве и медицине [2,3], так и в физической химии [4]. Исследование закономерностей взрывного разложения образцов под действием импульсного излучения является одной из актуальных задач физической химии.

Степень разработанности темы исследования.

Наночастицы способны не только поглощать, но и рассеивать лазерное излучение, а содержащие их вещества могут при этом проявлять существенные нелинейные оптические свойства. Особого внимания заслуживают частицы типа ядро-оболочка, так как способны комбинировать в себе свойства нескольких материалов [5].

С середины 1990-х годов исследователи в области наноматериалов отмечали особые свойства наноразмерных композитов на основе наночастиц одного материала, заключенных в оболочке другого материала. Наночастицы типа ядро-оболочка получили широкое распространение благодаря их важным физико-химическим свойствам [6]. Среди множества гибридных наночастиц, наночастицы ядро-оболочка состоят из двух или более материалов, таких как металлы и биомолекулы, причем один из них образует ядро в центре, тогда как другой материал или материалы, формируют оболочку. В качестве оболочки могут быть использованы полимеры, благородные металлы, фосфаты, оксиды и в некоторых случаях даже воздух. Наноструктуры ядро-оболочка представляют собой уникальные объекты с высокой термической и химической стабильностью. Покрытие высокотоксичных веществ оболочкой из биосовместимых материалов приводит к снижению токсичности композита и позволяет применять его в биомедицинских приложениях.

Наночастицы ряда металлов, покрытые как прозрачной, так и поглощающей оболочкой привлекают внимание ученых возможностью сочетания различных свойств (электрических, магнитных, адсорбционных, оптических) в одной

наночастице путем изменения состава и числа составляющих компонентов [6-8]. Свойства подобных нанокомпозитов могут варьироваться в весьма больших пределах из-за разнообразных вариантов материала ядра и оболочки, а также их размера и структурных составляющих.

Основным недостатком электродетонаторов и оптических детонаторов (ОД) на основе инициирующих взрывчатых веществ (ВВ) (в том числе азидов серебра и свинца) [8-10] является высокая вероятность случайных взрывов.

Хорошая чувствительность к лазерному импульсу уже созданных капсюлей ОД на основе инициирующих ВВ нивелируется опасностью взрыва к спектру возможных спонтанных воздействий, таких как удар, пробой, нагрев, трение. Следовательно, ОД на основе инициирующих ВВ имеют существенный недостаток в виде высокой вероятности несанкционированного взрыва. Возможно поэтому они пока в производстве не нашли должного применения. Существует возможность улучшения оптических детонаторов за счет создания новых взрывчатых веществ, таких, как композитов металлов с некоторыми производными тетразола [11]. В этом случае создаются селективно-чувствительные составы, пассивные к большинству спонтанных физических воздействий, кроме невозможного в природе лазерного импульсного воздействия. Задача создания капсюлей, имеющих высокие пороги взрывного разложения широким спектром воздействия, кроме импульса лазера, может быть решена введением во вторичные ВВ светочувствительных, сенсibiliзирующих добавок [12].

В [12-16] показано значительное (более чем в 10 раз) снижение критической плотности энергии (H_{cr}) за счет введения поглощающих наночастиц в матрицу пентаэритриттетранитрата (PETN). Достаточно важно, что массовая концентрация (w) необходимых наночастиц металлов очень мала (порядка 0,1%), что не приводит к принципиальному росту стоимости изделия по сравнению с электровзрывными аналогами.

Поглощение энергии лазерного импульса в металлах происходит в результате взаимодействия переменного электромагнитного поля со слабо связанными электронами проводимости. Быстрая термолизация электронов приводит к быстрому нагреванию наночастиц металлов. Действие лазерного излучения на композиты прозрачная матрица – наночастицы металлов приводит к локальному разогреву, которые могут стать очагами инициирования взрывного разложения [12]. В отличие от закономерностей инициирования взрывного разложения инициирующих ВВ, (где возможны механизмы как теплового, так и цепного взрыва), лазерное импульсное инициирование композитов на основе вторичных ВВ с наночастицами металлов определяется преимущественно развитием теплового взрыва. Инициирование реакции взрывного разложения происходит вблизи нагретых лазерным излучением сенсibiliзирующих наночастиц [17, 18].

В начальном варианте микроочаговой модели инициирования взрывного разложения инициирующих ВВ [17, 18] коэффициент (в отдельных источниках – фактор [4]) эффективности поглощения света (Q_{abs}) не учитывался, то есть не зависел от размера наночастицы, температуры, длины волны, показателя преломления матрицы и, следовательно, приравнивался единице. Учет особенностей и закономерностей поглощения лазерного излучения наночастицами, помещенными в прозрачные матрицы проведено в [19, 20]. Микроочаговая модель теплового взрыва существенно модернизирована учетом дополнительных процессов, определяющих взрывное разложение, параметры которых могут быть независимо оценены, или определены экспериментально: факторы эффективности поглощения в зависимости от радиуса наночастицы (R) [21-24], показатель преломления матрицы (m_a) [23], длина волны излучения лазера [23-29], начальной температуры образца (T) [29-32].

В цикле работ [19-34] оценены Q_{abs} , определены $Q_{abs \max}$ – максимальные значения Q_{abs} при варьировании радиуса наночастиц. Показано, что $Q_{abs \max}$ может изменяться в десятки раз в зависимости от длины волны лазерного излучения,

материала включения, показателя преломления матрицы, температуры. Разработаны и получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, предназначенные для моделирования кинетических закономерностей и расчета критических параметров лазерного импульсного взрывного разложения ВВ, содержащих сенсibiliзирующие наночастицы [35-40]. Рассчитана зависимость H_{cr} азидов свинца с включением наночастиц свинца различного радиуса от длительности импульса [41]. Получены аналитические выражения для величины радиуса наиболее прогретой наночастицы показано, что H_{cr} для ансамбля включений не зависит от длительности импульса (в асимптотическом приближении длительности импульса к нулю) [41, 42].

В [19, 20] оценены $Q_{abs\ max}$ на длине волны основной гармоники неодимового лазера (1064 нм) для наночастиц 12 металлов в нескольких прозрачных ВВ (азиды серебра и свинца, PETN). Экспериментально показано, что взрывное свечение прессованных таблеток PETN – с добавками наночастиц алюминия, под действием импульсом основной гармоники неодимового лазера (длительность 14 нс) начинается практически во время действия импульса, индукционный период – отсутствует [43, 44]. Рассчитаны пространственные и кинетические закономерности эволюции поля температур образца [44].

В [45-47] предложена методика оценки комплексного показателя преломления (m_i) наночастиц металла на основе измерения коэффициентов полного пропускания и отражения монохроматического излучения композитов PETN – наночастицы алюминия. Однако в методике не учитывается оксидная плёнка, всегда присутствующая на наночастицах алюминия, которая защищает ее от полного окисления [48]. Оксидная пленка влияет на оптические свойства наночастиц, так увеличение ее толщины приводит к красному смещению положения максимума коэффициента эффективности рассеяния нанодисков алюминия [49]. Наночастицы алюминия благодаря стабильности, низкой цене и плотности рассматриваются элемент композитных материалов плазмоники [49]. В работе [48] экспериментально исследована зависимость H_{cr} композитов на основе

пентаэритриттетранитрата с наночастицами алюминия, покрытых оксидной оболочкой ($\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{PETN}$) при действии импульсом основной гармоники неодимового лазера (1064 нм) от массовой концентрации алюминия в наночастице ($\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$). Показано увеличение в 12,5 раза $H_{\text{ст}}$ при уменьшении w в диапазоне от 74 до 13 %. Следовательно, при моделировании как оптических, так и взрывных характеристик композитных материалов на основе ВВ, включающих наночастицы металлов, необходимо учитывать оксидную плёнку.

Актуальность темы исследования определяется модернизацией микроочаговой модели теплового взрыва, развитием теоретических представлений о закономерностях процесса инициирования взрывного разложения лазерным импульсным излучением композитов на основе взрывчатых веществ и светопоглощающих наночастиц, необходимых для разработки и оптимизации состава капсулей ОД.

Цели и задачи:

Цель работы – модернизация микроочаговой модели инициирования ВВ лазерным импульсным излучением, позволяющая интерпретировать экспериментальные закономерности инициирования вторичных взрывчатых веществ, содержащих сенсibiliзирующие наночастицы, в том числе со структурой ядро-оболочка.

Задачи:

1) Разработать и зарегистрировать программу для ЭВМ для расчета кинетических закономерностей и критических параметров взрывного разложения, инициируемого в композитах на основе ВВ и наночастиц металлов, инициируемого импульсным лазерным излучением.

2) Рассчитать в широком диапазоне R зависимости H_c PETN , сенсibiliзированного наночастицами различных металлов (при значении $Q_{\text{abs}} = 1$) и различных длительностях импульсов. Определить в этих условиях рядовые и аналитические зависимости оптимальных радиусов наночастиц от физико-химических характеристик металлов.

3) Разработать и зарегистрировать программу для ЭВМ, провести расчет оптических характеристик наночастиц алюминия со структурой ядро-оболочка ($\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$) в различных матрицах.

4) Провести в рамках микроочаговой модели теплового взрыва учет непоглощающей оболочки наночастицы в ВВ. Рассчитать в широком диапазоне радиусов наночастицы и толщин оксидной оболочки критические параметры и кинетические зависимости инициирования взрывного химического разложения композита $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{PETN}$.

5) Получить аналитическое выражение зависимости H_c композита $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{PETN}$ от радиуса наночастицы и толщины оксидной оболочки, сравнить результаты.

Научная новизна:

С относительной погрешностью 10^{-12} в широком диапазоне изменения радиуса сенсibiliзирующих наночастиц 12 металлов рассчитаны зависимости H_c PETN (при $Q_{abs} = 1$). Определены рядовые и функциональные зависимости оптимальных радиусов наночастиц 12 металлов в PETN от физико-химических характеристик включений, получен инвариант модели.

Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, предназначенные для расчета оптических характеристик наночастиц со структурой “ядро-оболочка” и моделирования кинетики и расчета H_c PETN, содержащего поглощающие наночастицы. Получены численно и аналитически зависимости H_c PETN от толщины оксидной оболочки и радиуса сенсibiliзирующих наночастиц алюминия.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость работы определяется развитием теоретических представлений о закономерностях процесса инициирования взрывного разложения лазерным импульсным излучением композитов на основе взрывчатых веществ и светопоглощающих наночастиц, модернизацией микроочагового варианта модели теплового взрыва с учетом прозрачной оболочки поглощающей

наночастицы, установлением рядовых и функциональных зависимостей оптимальных радиусов наночастиц 12 металлов в PETN от физико-химических характеристик металлов.

Практическая значимость работы заключается в создании программ для ЭВМ, предназначенных для расчета оптических характеристик наночастиц со структурой “ядро-оболочка” и моделирования кинетики и расчета H_c PETN, содержащего поглощающие наночастицы; исследовании оптических и взрывных характеристик материалов, которые могут быть использованы в качестве капсюля ОД.

Методология и методы исследования. Начальными этапами работы является разработка и регистрация программы для ЭВМ для расчета актуальных физико-химических характеристик исследуемых процессов. Анализ полученных данных позволил вывести аналитические выражения связывающие критические параметры, форм размерные и физико-химические параметры систем 12 металлов в PETN. Учет в микроочаговой модели теплового взрыва возможного наличия прозрачной инертной оболочки позволил исследовать эволюцию системы методами кинетического анализа сложных физико-химических процессов, провести сравнение рассчитанных и экспериментальных данных. Таким образом, в работе использованы в основном теоретические методы исследования (анализ, классификация, синтез, дедукция, индукция, абстрагирование, конкретизация, обобщение и самое главное – моделирование), дополненные статистическим методом обработки больших массивов информации.

Основные положения, выносимые на защиту:

1) Результаты расчетов критических параметров и кинетических закономерностей лазерного инициирования взрывного разложения PETN с включениями наночастиц 12 металлов при $Q_{abs} = 1$ и длительностях инициирующего импульса 12 и 14 нс.

2) Значения оптимальных радиусов наночастиц 12 металлов в PETN при длительностях инициирующего импульса 12 и 14 нс, рядовые и функциональные зависимости рассчитанных величин от теплофизических характеристик металлов.

3) Рассчитанные и аналитические зависимости критической плотности энергии инициирования $Al/Al_2O_3/PETN$ от толщины оксидной оболочки и радиуса наночастиц.

Степень достоверности и апробация результатов:

Достоверность результатов исследования основана на привлечении концепции теплового взрыва в микроочаговом варианте, принятого в научном сообществе, ее применении для исследования композитных систем PETN с включением наночастиц металлов, в том числе со структурой “ядро-оболочка”, сравнении результатов моделирования с литературными данными, применении устойчивых численных методов решения «жестких» систем дифференциальных уравнений в частных производных с переменным шагом по координате и времени. Результаты диссертации докладывались на 12 конференциях различного уровня, изложены в 36 научных работах, в том числе в 10 статьях в журналах, рекомендованных ВАК для публикации основных научных результатов диссертации, в 2 свидетельствах о государственной регистрации программ для ЭВМ. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (№ 3.5363.2017/8.9), РФФИ № № 14-03-00534А, 19-33-90261, МД-3502.2021.1.2.

Личный вклад автора. Автором изучены и проанализированы литературные данные по теме работы, получены численные результаты работы. Совместно с научным руководителем автором проведены формулировка задач, выбор методов решения, анализ полученных результатов. В опубликованных в соавторстве статьях, автору принадлежат результаты, сформулированные в положениях, выносимых на защиту, результатах и выводах работы.

Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 1.4.4 – Физическая химия (физико-математические науки) в части развития

модельных представлений о химических реакциях в реальных системах, осложненных процессами тепло-массопереноса (пп. 6, 7, 11).

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 122 страницах машинописного текста, содержит 8 таблиц и 36 рисунков. Список литературы состоит из 140 наименований.

Автор выражает благодарность научному руководителю д.ф.-м.н. доценту Звекову Александру Андреевичу, д.ф.-м.н., профессору Каленскому Александру Васильевичу, к.ф.-м.н. Ананьевой Марине Владимировне за полезные дискуссии, помощь и поддержку при проведении работы.

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Наночастицы представляют собой объекты размером от 1 до 100 нм. Их можно разделить на разные классы в зависимости от их свойств, формы или размера. Различные группы включают фуллерены, наночастицы металлов, керамические наночастицы и полимерные наночастицы [5].

Наночастицы обладают уникальными физико-химическими свойствами из-за высокой удельной площади поверхности и наноразмеров. Их оптические свойства зависят от размера. Их реакционная способность, прочность и другие свойства также зависят от их размера, формы и структуры.

Благодаря этим характеристикам они являются подходящими кандидатами для различных коммерческих и бытовых приложений, в том числе для катализа, медицины, исследований в области энергетики и защиты окружающей среды. Нанотехнологии - известная область исследований с прошлого века, в которой были сделаны различные революционные разработки. Исследователи осознали важность данных материалов, когда обнаружили, что размер может влиять на физико-химические свойства вещества, в том числе на оптические и химические характеристики [4, 5, 50-54].

1.1 Экспериментальное исследование закономерностей взрывного разложения композитов на основе PETN и светопоглощающих наночастиц

В работах [12-16, 26-28, 43, 44, 50, 51, 55-63] исследованы пороги взрывного разложения композитов на основе PETN и сенсibiliзирующих наночастиц. На рисунке 1.1 представлена структурная формула пентаэритриттетранитрата (PETN), исследованию закономерностей лазерного инициирования которого посвящена настоящая работа. В эксперименте определяются вероятностные кривые взрывного разложения PETN (то есть зависимости вероятности взрыва от

плотности энергии импульса H), полученные для композитов, содержащих наночастицы алюминия (изготовленные различными методами), никеля, кобальта, Ni-C, Al-C, при инициировании основной и второй гармоник неодимового лазера.

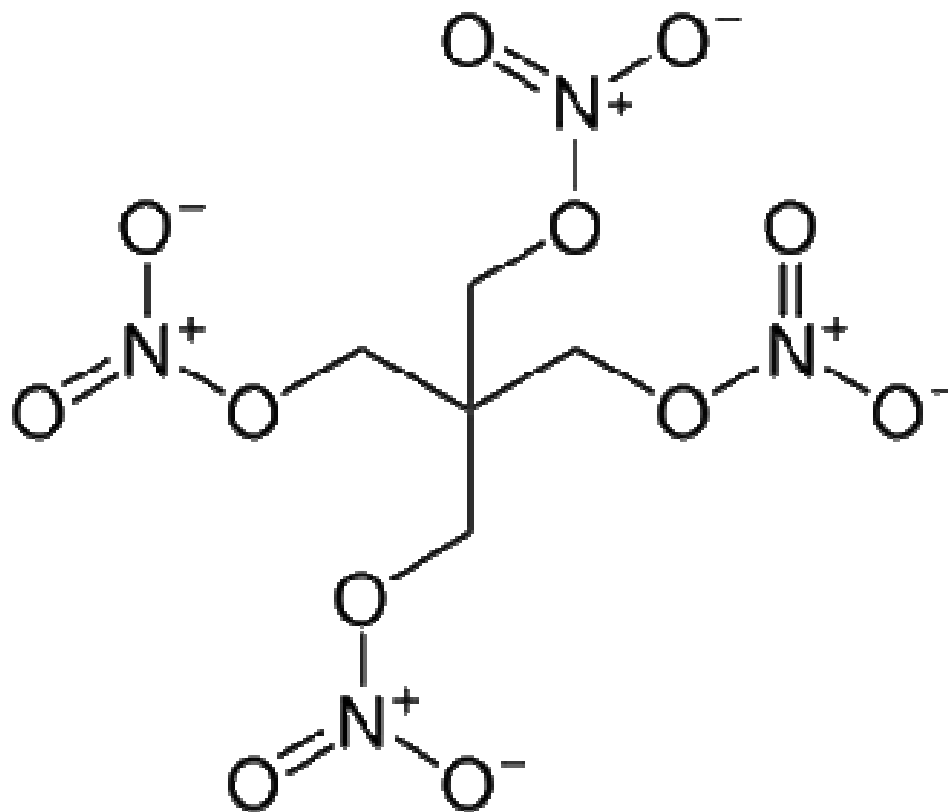


Рисунок 1.1 – Структурная формула PETN.

В работах [55, 56] представлены экспериментальные результаты инициирования композитов PETN-Al импульсом 2 гармоники неодимового лазера с $w = 0,1$ %. Показано, что инициирование взрывного разложения является следствием поглощения излучения наночастицами, нагрева до очень высокой температуры. Аргументировано отвергнута модель оптического пробоя при лазерном инициировании композитов PETN-Al [55, 56].

С целью экспериментального определения массовой концентрации сенсibiliзирующих наночастиц, при которой инициирование взрывного разложения ВВ лазерным излучением осуществляется при воздействии импульса с минимальной плотностью энергии, в работе [51] получены вероятностные кривые с различными массовыми концентрациями (w) наночастиц. На рисунке 1.2

визуализирован случай для композитов PETN-Ni: первая кривая соответствует содержанию Ni одному проценту, вторая – три десятых процента, третья – одна четвертая процента, четвертая кривая расположена левее остальных и соответствует минимальным в исследованных условиях пороговым значениям взрыва, получена при w в одну десятую процента.

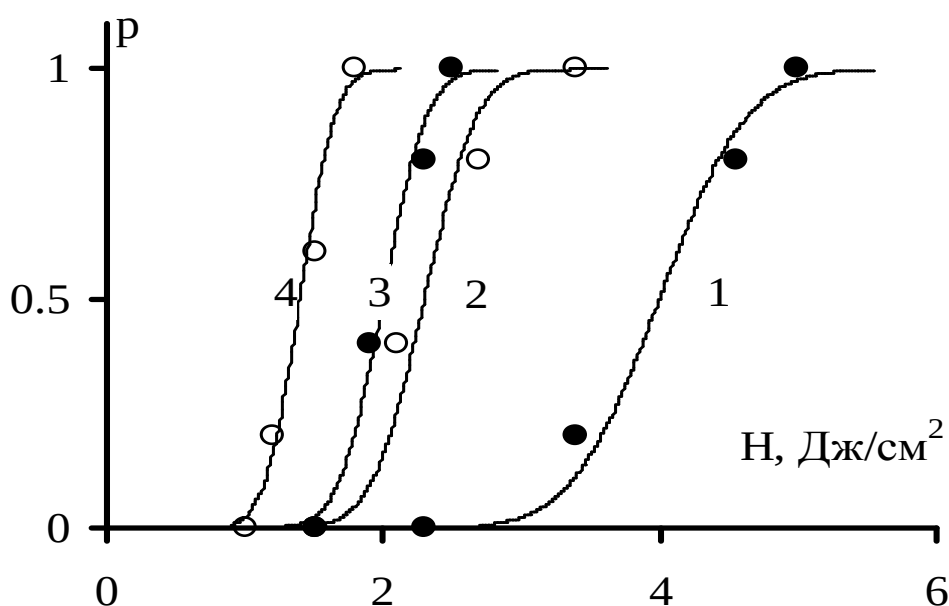


Рисунок 1.2 – Вероятностные кривые инициирования взрывного разложения PETN, сенсibilизированного наночастицами никеля. Цифрами показаны различные массовые концентрации частиц [51]

При построении вероятностной кривой взрыва наиболее точно определялась плотность энергии импульса, соответствующая 50 % вероятности взрыва, так как она принята экспериментальным порогом инициирования – критической плотности энергии инициирования взрывного разложения H_{cr} , соответствующая такой плотности энергии импульса, при которой взрыв близких по свойствам образцов происходит с вероятностью пятьдесят процентов [55-63]. Одной из фундаментальных характеристик взрыва является его стохастический характер: это видно на рисунке 1.2 вблизи порога инициирования. Зависимости H_{cr} от массовой концентрации сенсibilизирующих наночастиц различной

природы (указанной в легенде), полученные в работе [64], показаны на рисунке 1.3. Для всех образцов мы видим минимум H_{cr} , соответствующий массовой доле включений 0,1% или 0,2 %.

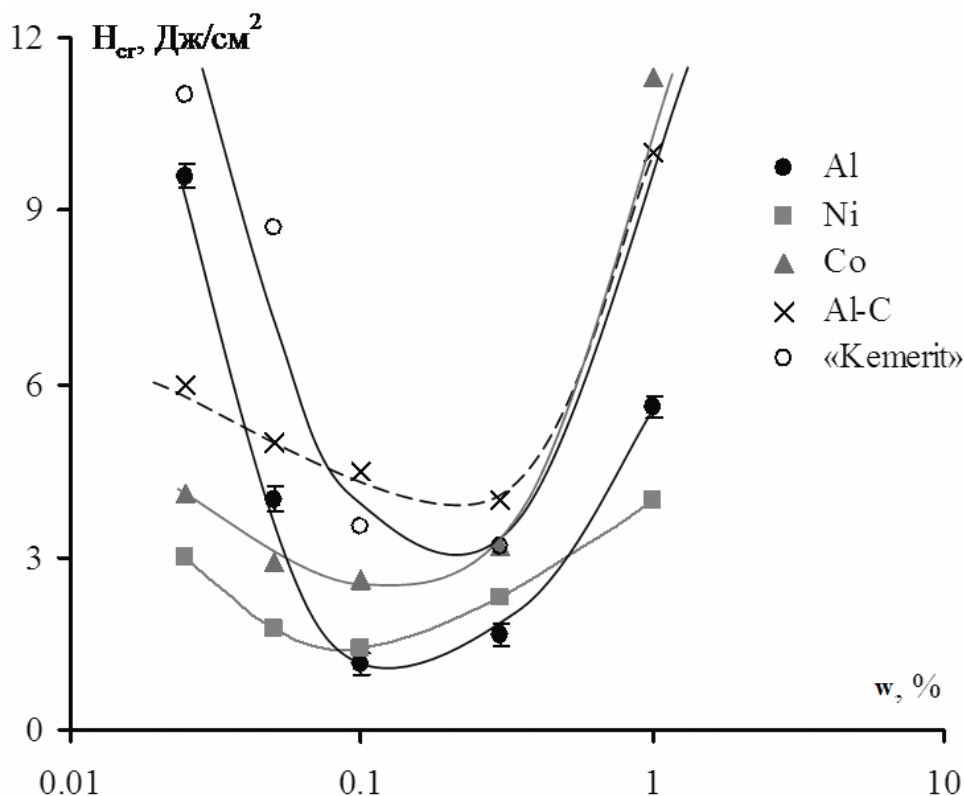


Рисунок 1.3 – Экспериментальные зависимости H_{cr} композитов PETN с включением наночастиц различной природы от величины массового содержания сенсibiliзирующих наночастиц в образце [64]

В работах [26,27] проведено экспериментальное исследование H_{cr} прессованных таблеток PETN-алюминий при воздействии основной и второй гармоник неодимового лазера (при фиксированной массовой доле наночастиц алюминия 0,1%). Рисунок 1.4 демонстрирует экспериментальную зависимость, полученную в работе [26], вероятности взрыва от плотности энергии импульса основной (круги) и второй (треугольники) гармоники неодимового лазера.

Экспериментально определенное значение $H_{cr} = 1,15 \text{ Дж/см}^2$ для основной гармонике для второй порог инициирования существенно на 39 процентов – меньше и составляет $0,7 \text{ Дж/см}^2$ [26]. 40 % это значительно больше

экспериментальной ошибки определения критической плотности энергии (10%). В работе [26] из полученных результатов исключена модель оптического пробоя из возможных механизмов низкорогового инициирования взрыва таблеток PETN- Al лазерным импульсом.

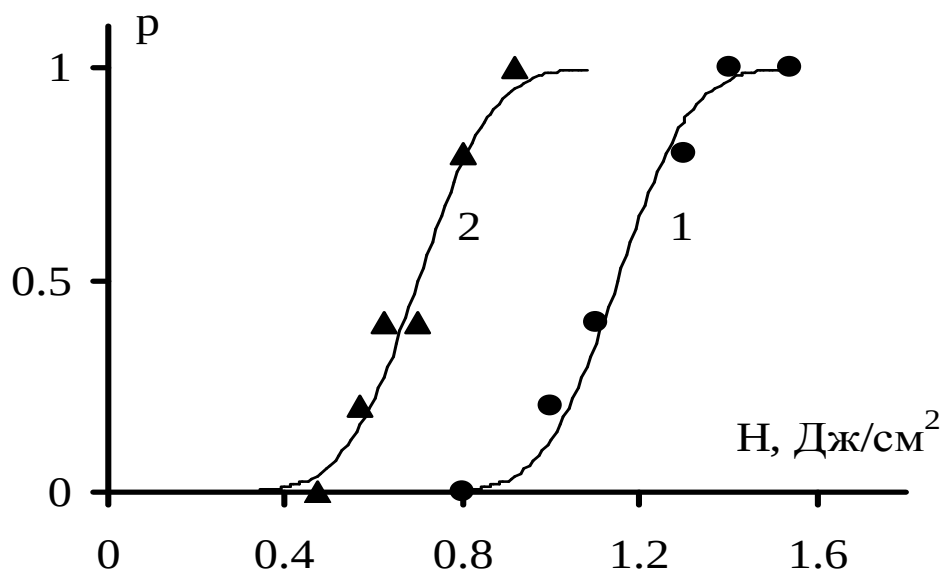


Рисунок 1.4 – Зависимости вероятности взрыва (p) от H для длин волн 1064 нм (1) и 532 нм (2) [26].

В работе [15] обнаружено, что минимальный порог для инициирования излучением 532 нм неодимового лазера наблюдается при массовой доле наночастиц алюминий 0,1%, а основной – 0,2%, что объяснялось близкими значениями показателя поглощения материала.

Наночастицы алюминия всегда имеют оксидную оболочку. В [48] проведено экспериментальное исследование зависимости H_{cr} композитов Al/Al₂O₃/PETN на длине волны 1064 нм от w в наночастице Al/Al₂O₃. При хранении и даже создании алюминиевые наночастицы частично окисляются с поверхности с созданием предохраняющей дальнейшее окисление оксидной оболочке. В этом случае содержание металлического алюминия в наночастице уменьшается. Для создания порошков с уменьшенной долей металлического алюминия использовался метод контролируемого окисления при повышенных

температурах. Порошок алюминия нагревался [48] до момента приращения массы, соответствующей необходимой убыли массовой доли алюминия. При более высокой температуре получали наночастицы с меньшей массовой концентрации Al. Исходной концентрацией являлось 74 %. Контролируемым окислением дополнительно получены еще четыре порошка с $w=13\%$, 30% , 47% и 60% [48]. Полученные наночастицы использовались для создания прессованных таблеток PETN по методике, разработанной в работах [12-14]. Для создания порошков с минимальной массовой концентрацией алюминия использовалось нагревание до температуры тысяча $^{\circ}\text{C}$, что с одной стороны значительно меньше температуры плавления оксида алюминия, но с другой - больше температуры плавления металлического алюминия [48]. Очень важным является следующий вывод работы [48]: «распределение по размерам полученных частиц на снимках электронного микроскопа отличается от исходных порошков незначительно». Это возможно, т.к. плотность оксида алюминия ($3,9 \text{ т/м}^3$), значительно выше металлического алюминия ($2,7 \text{ т/м}^3$), важно сохранение формы частиц и отсутствие макро дефектов. Частично об этой возможности, свидетельствуют результаты работы [64], где экспериментально показано, что только в случае существенного отличия соотношения молярных объемов поверхностного оксида и металла, формирующего ядро наночастицы, оксидная оболочка не образует сплошного контакта с металлом и слабо предотвращает окисление наночастиц. В случае наночастиц алюминия со структурой «ядро-оболочка» молярный объем формирующего оболочку оксида $25,6 \text{ см}^3/\text{моль}$, а объем 2-х молей алюминия для ее создания - $20 \text{ см}^3/\text{моль}$, т.е. отличие составляет всего около 20%.

Для построения зависимости $H_{\text{сг}}$ таблеток Al/Al₂O₃/PETN от w использована методика [12-16, 26-28, 43, 44, 48, 50, 51, 55-64]: на фиксированных плотностях энергии последовательно облучались 10 образцов и определялась вероятность взрыва, далее плотность энергии увеличивалась и процедура повторялась, считая, что взорвавшиеся при меньших энергиях таблетки взорвутся и при больших энергиях. С учетом этого обстоятельства строилась вероятностная кривая,

представленная на рисунке 1.5 [48], по которой определялась H_{cr} для каждой w , которая в свою очередь представлена на рисунке 1.6 [48]. Нам для дальнейшего рассмотрения понадобятся как значения H_{cr} при исследованной w , так и крайние точки зависимости: увеличение H_{cr} при уменьшении w с семидесяти четырех процентов (максимальное значение) до тринадцати процентов (минимально достигнутое значение) в 12,5 раза (рисунок 1.6) [48].

В работе [48] природа исследуемой зависимости ограничена влиянием изменения оптических характеристик наночастицы. Результаты расчета фактора эффективности наночастиц алюминия с прозрачной оксидной оболочкой (с учетом [65]) так-же представлен на рисунке 1.6 [48]. Вы можем сделать очевидный вывод, что чем больше металлического алюминия в наночастице, и чем меньше оксидная прозрачная оболочка, тем ее способность к поглощению основной гармонике неодимового лазера улучшается.

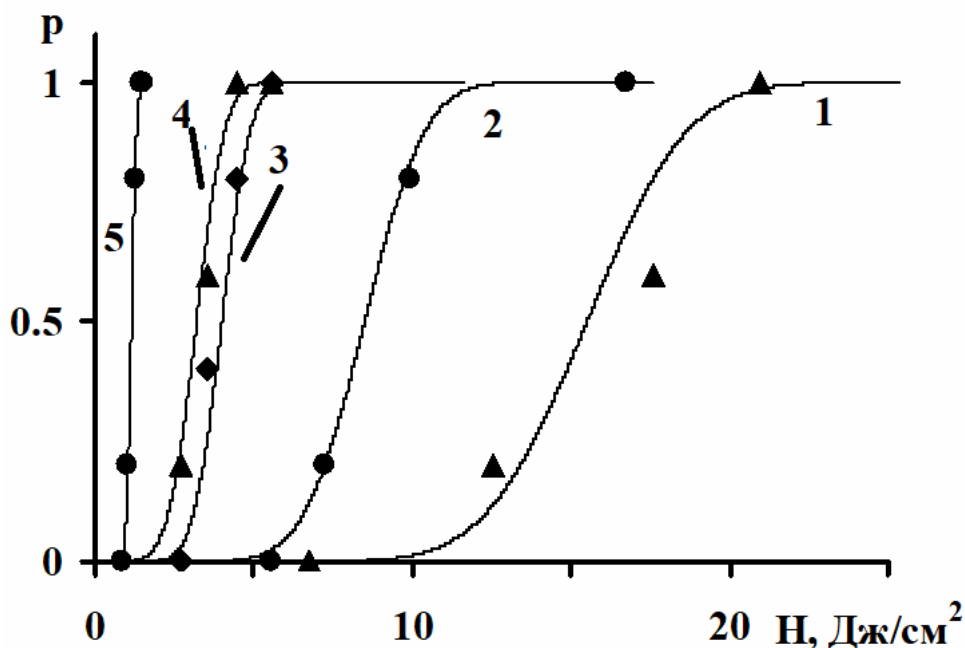


Рисунок 1.5 – Зависимость вероятности p взрыва от H прессованных таблеток $Al/Al_2O_3/PETN$ для массовой концентрации алюминия. 1 – 13%, 2 – 30%, 3 – 47%, 4 – 60%, 5 – 74% [48].

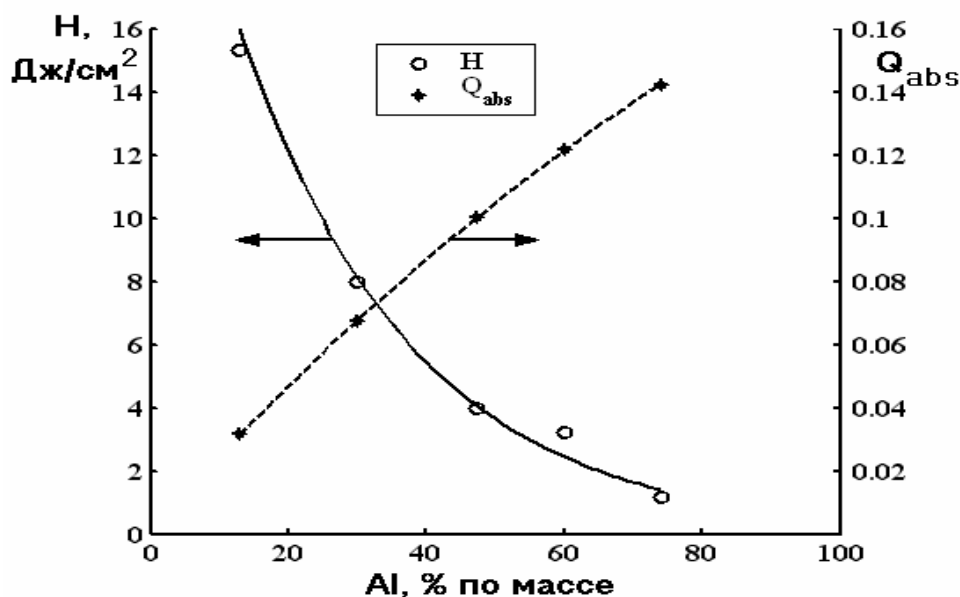


Рисунок 1.6 – Зависимости H_{cr} и Q_{abs} (по вспомогательной оси) от концентраций алюминия в наночастице [48]

Увеличение Q_{abs} очевидно влияет на H_{cr} в сторону уменьшения (рисунок 1.6). Это связано с тем, энергия, поглощаемая включением, пропорциональна Q_{abs} , и чем выше Q_{abs} , тем меньше H_{cr} . Поэтому, наблюдаемый симбатный ход зависимостей Q_{abs} и H_{cr} от w является дополнительным подтверждением микроочагового механизма лазерного инициирования PETN с включением светопоглощающих наночастиц, однако изменение Q_{abs} является не единственным фактором, влияющим на H_{cr} : Q_{abs} изменяется в 4 раза, а H_{cr} – в 12,5.

1.2 Оптические свойства наночастиц металлов

В [66] показано, что эффект плазмонного резонанса поглощения и рассеяния света наночастицами может быть интерпретирован методом решения уравнений Максвелла при взаимодействии электромагнитных волн с наночастицами [65]. В рамках данного подхода рассчитывались факторы эффективности экстинкции (Q_{ext}) и рассеяния (Q_{sca}) света с заданной длиной волны (λ) сферическим включением радиуса R . Физический смысл данных

характеристик достаточно понятен: они равны отношению сечений соответствующих процессов к геометрическому сечению шара (πR^2). Выражения для коэффициентов соответствующих величин является суммой (в точности бесконечной) вкладов электрических F^c_l и магнитных F^b_l колебаний [25, 45-47] (1.1,1.2):

$$Q_{ext} = \sum_{l=1}^{\infty} (F^c_{l\text{ext}} + F^b_{l\text{ext}}), \quad (1.1)$$

$$Q_{sca} = \sum_{l=1}^{\infty} (F^c_{l\text{sca}} + F^b_{l\text{sca}}), \quad (1.2)$$

В соответствии с законом сохранения энергии рассчитывался фактор эффективности поглощения света (Q_{abs}) (разность факторов эффективности экстинкции и рассеяния) [25, 66]. Вклады электрических F^c_l и магнитных F^b_l колебаний, имеют вид [25, 66] (1.3):

$$F^c_{l\text{ext}} = \frac{2}{\rho^2} (2l+1) \cdot |c_l|^2 \quad F^b_{l\text{ext}} = \frac{2}{\rho^2} (2l+1) \cdot |b_l|^2 \quad (1.3a)$$

$$F^c_{l\text{sca}} = \frac{2}{\rho^2} (2l+1) \cdot \text{Im } c_l \quad F^b_{l\text{sca}} = -\frac{2}{\rho^2} (2l+1) \cdot \text{Im } b_l \quad (1.3b)$$

где $\rho = 2\pi R m_0 / \lambda$ - эффективный радиус наночастицы, приведенный к актуальной длине волны, а m_0 - действительный показатель преломления прозрачной среды. При моделировании оптических характеристик наночастиц металлов в RETN использовалось значение $m_0=1,54$. При этом, m_0 других вторичных взрывчатых веществ не очень сильно отличаются (для гексогена $m_0=1,5$), неорганические инициирующие взрывчатые вещества имеют несколько большее значение m_0 , например, для азида свинца - 1,85, азида серебра 2. При этом, дополнительным ограничением на c_l и b_l в (1.3) является условие их непрерывности на границе поверхность наночастицы/ прозрачная матрица [25, 45-47, 65, 66].

Оптические характеристики наночастиц в прозрачной матрице существенно зависят от комплексного показателя преломления материала матрицы, значения

которого для широкого круга металлов, их соединений в различных частях спектра представлены в [67].

В работе [19] определены по описанной выше методике зависимости $Q_{abs}(R)$ для $\lambda = 1064$ нм. Некоторые из рассчитанных в работе [19] зависимостей представлены на рисунке 1.7, при этом под номером один показана зависимость $Q_{abs}(R)$ для серебра в азиде серебра (как продукт частичного разложения); цифрой два – наночастицы свинца в азиде свинца; третий и четвертой – это аналогичные зависимости для наночастиц свинца и алюминия, соответственно в матрице PETN [19]. Используемые параметры материалов: серебро $m_i = 0,15-6,0i$, свинец $m_i = 1,416 - 5,742i$, алюминий $m_i = 0,978 - 8,030i$, соответствуют основной гармонике неодимового лазера.

Важный вывод работы [19] касается последствий существенной зависимости Q_{abs} как от радиуса, так и природы наночастицы (более порядка) на закономерности нагревания импульсным излучением наночастиц металла и – в дальнейшем разогрев лабильной матрицы. При этом, температура разогрева начинает возрастать, во время действия импульса достигает максимального значения и потом уменьшается (без взрыва). При этом сами значения максимальной температуры разогрева также коррелируют с Q_{abs} , изменяясь на порядок величины.

В [20] рассчитаны: радиусы наночастиц 12 металлов (серебра, золота, меди, алюминия, кобальта, хрома, железа, никеля, свинца, палладия, олова и ванадия) в PETN с максимальным значением фактора эффективности поглощения ($Q_{abs\ max}$) для длины волны 1064 нм.

Показано, что $Q_{abs\ max}$ данных металлов наблюдается для наночастиц с радиусом около 95 нм и разбросом не более 5 нм, величина $Q_{abs\ max}$ определяется удельной проводимостью материала наночастицы, существенно увеличивается с ее уменьшением [20]:

1. Медь, серебро и золото среди всех исследующих металлов [20] имеют наибольшие значения величин удельные проводимости, но величины $Q_{abs\ max}$ составляют менее 0,1 [20].

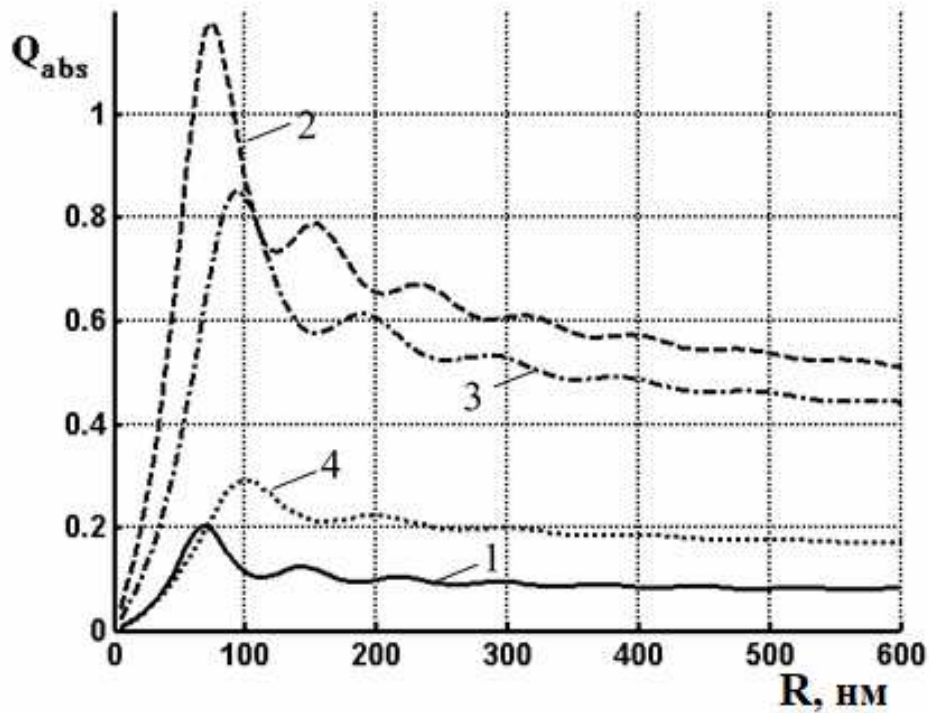


Рисунок 1.7 – Рассчитанные зависимости Q_{abs} на длине волны $\lambda = 1064$ нм от R . 1 – серебро в аэрогеле серебра, 2 – свинец в аэрогеле свинца, 3 – свинец и 4 – алюминий в матрице PETN [19].

2. Наночастицы алюминия имеют промежуточные значения удельной проводимости и значения $Q_{abs\ max} = 0,3$ [20].

3. Оставшиеся 9 металлов (хром, железо, кобальт, никель, палладий, олово, свинец и ванадий) имеют минимальные значения удельной проводимости и одновременно максимальные значения $Q_{abs\ max}$ в интервале $0,8 \div 1,7$ [20].

Анализ данных рисунка 1.7, показывает, что основные изменения Q_{abs} наблюдаются в диапазоне радиусов до 150 нм. Происходит увеличение Q_{abs} от нуля до максимума при $R = 100$ нм, и существенное дальнейшее уменьшение. В большинстве работ длина волны оставалась равной 1064 нм (основная гармоника

неодимового лазера), так как этот лазер использовался в большинстве экспериментальных работ по исследованию закономерностей взрывного разложения как инициирующих взрывчатых веществ [68], так и бризантных (вторичных) ВВ [69].

Рассчитанная зависимости коэффициента эффективности поглощения олова от радиуса наночастиц в диапазоне от 20 до 150 нм в матрице с показателем преломлений 1,54 (PETN) на основной гармонике неодимового лазера приведены на рисунке 1.8 [70]. Рассчитанная зависимость $Q_{abs}(R)$ типична для ряда металлов в прозрачной матрице. Наночастицы олова радиуса менее 20 нм поглощают менее 10 % падающего на включение излучения. Увеличение радиуса сопровождается ростом фактора эффективности поглощения, Абсолютный максимум ($Q_{abs\ max}=0,85$) наблюдается для радиусов наночастиц олова 99,8 нм [70], что соответствует [20].

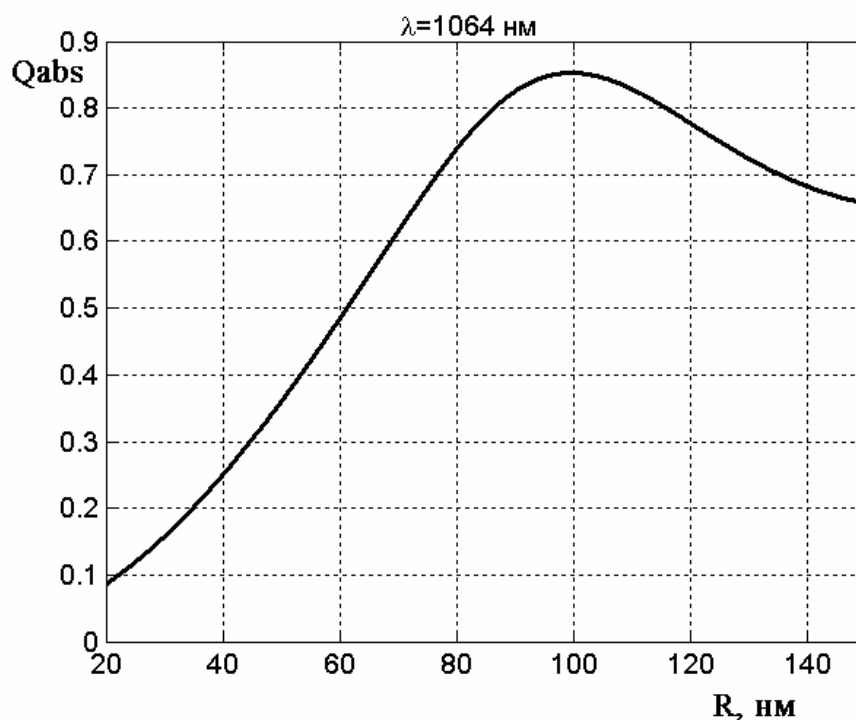


Рисунок 1.8 – Рассчитанная зависимость Q_{abs} от радиуса наночастицы Sn в матрице с $m_0 = 1,54$ (например, PETN) [70].

На основе полученных и литературных данные в работе [70] сделан вывод, что радиусы при которых наблюдаются $Q_{abs\ max}$ определяется только длиной волны и практически не зависят от m_i материала наночастицы. Так значения $Q_{abs\ max}$ в ряду риала включения. Так значения $Q_{abs\ max}$ в ряду 7 проанализированных металлов (серебро, медь, золото, алюминий, олово, кобальт, никель) изменяется в тринадцать раз, в тоже время величины радиусов наночастиц с $Q_{abs\ max}$ (максимальные для каждого металла значения факторов эффективности поглощения), варьируются от 93 нм до 100 нм всего на 7 % [70].

1.3 Синтез и использование наночастиц металлов со структурой ядро-оболочка

В работе [6] рассмотрена методика получения наночастиц золотое ядро – оболочка из оксида меди (I), которая заключалась в получении золотых ядер восстановлением золота цитратным методом с последующим нанесением оксида меди восстановлением меди из раствора хлорида гидроксиламином. Получающиеся наночастицы имеют структуру ядро-оболочка, подтвержденную методом просвечивающей электронной микроскопии. Кристалличность металла и оксида подтверждается рентгенофазовым анализом и электронной микроскопией высокого разрешения. Толщина полученной оболочки Cu_2O составляла от 9 до 25 нм, что позволило сдвинуть максимум плазмонного поглощения излучения от 527 нм (для наночастиц без оболочки) до 638 нм. Авторы отмечают, что ширина запрещенной зоны нанесенного оксида меди (I) при этом уменьшается от 2,70 до 2,35 эВ, что значительно больше величины для массивного оксида (2,17 эВ). Данный эффект объясняется с позиций квантовой механики как рост положения нижнего уровня энергии при уменьшении ширины потенциальной ямы для электронов проводимости и дырок («quantum confinement effect»). Авторы также пишут, что длина волны максимума полосы плазмонного поглощения,

прогнозируемое теорией Друде, ниже, чем экспериментально полученные значения.

Задача о рассеянии света несколькими близко расположенными наночастицами в Рэлеевском приближении была рассмотрена в [7]. Каждая частица типа ядро-оболочка (в качестве оболочки было выбрано серебро, показатель преломления ядра варьировался) рассматривалась в дипольном приближении. Приведено выражение, позволяющее при известных спектральных зависимостях диэлектрической проницаемости материалов, оценить оптимальное соотношение радиусов ядра и оболочки, которое обеспечит максимальное ослабление света наночастицей. Взаимодействие частиц учитывалось в рамках самосогласованной схемы, когда возбужденное электромагнитной волной осциллирующее поле на одной наночастице за счет диполь-дипольного взаимодействия вызывает аналогичные осцилляции в соседних наночастицах. Авторами рассчитаны распределения квадрата модуля напряженности поля в случае двух и трех наночастиц, которые соответствуют результатам моделирования в пакете COMSOL MULTIPHYSICS, при этом использованный подход считает быстрее метода конечных элементов использованного пакета.

Наночастицы типа «магнитное ядро в оболочке из благородно металла» перспективны для биомедицинских применений. В работе [71] предложено получение наночастиц магнетита (средний гидродинамический диаметр 83 нм), нанесение на их поверхность золота (средний гидродинамический диаметр 113 нм) с последующим нанесением стрептавидина (средний гидродинамический диаметр 133 нм). Все полученные частицы были стабильны (значение дзета-потенциала -47 мВ). Состав и структура были подтверждены методами просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, рентгенофлуоресцентного анализа и КР-спектроскопии. Спектр поглощения наночастиц магнетита демонстрирует монотонный рост оптической плотности при уменьшении длины волны, нанесение золота приводит к появлению плазмонной полосы с максимумом при 538,5 нм, а нанесение стрептавидина к

сдвигу полосы к 550 нм с уменьшением ее интенсивности. Показано, что напряжение насыщения для полученных наночастиц составляет $6,6 \cdot 10^{-3}$ (Гс·см³)/Г, при этом они проявляют выраженный эффект Фарадея в области низких магнитных полей (до 100 Гс).

В статье [72] приведены расчеты спектральных зависимостей Q_{abs} наносистемами железное ядро – золотая оболочка при варьировании радиусов и толщин. Также были рассмотрены случаи вытянутых и сплюснутых сфероидальных частиц и частица с прослойкой из «пустоты» между ядром и оболочкой. Для расчетов было использовано приближение дискретных диполей, которое дало неплохое согласие с теорией Ми в случае сферических частиц. Показано, что рост толщины оболочки приводит к росту коэффициента эффективности поглощения в полосе плазмонного резонанса и ее батохромному смещению, коррелируя с результатами для монометаллических золотых наночастиц. Введение прослойки «пустоты» приводит к сильному батохромному смещению полосы плазмонного резонанса (до 80 нм) и увеличению коэффициента эффективности поглощения в максимуме плазмонной полосы (до 2-х раз). Вытягивание наночастиц приводит к существенному батохромному смещению, а сплющивание – к небольшому гипсохромному смещению полосы плазмонного резонанса. При этом в случае вытянутых частиц сильно возрастает коэффициент эффективности поглощения света, а в случае сплюснутых изменения незначительны.

Оригинальный способ получения наночастиц золотое ядро – оболочка оксида алюминия был предложен в [73]. Авторы наносили на алюминиевую пластину золотую пленку толщиной 40 нм с помощью магнетронного распыления, а затем подвергали воздействию лазера непрерывного действия (40 Вт, 1064 нм, фокусное расстояние объектива 43 см) под слоем безводного этанола (1 мм), луч которого двигался вдоль поверхности со скоростью 1 см/с. В результате выяснилось, что на поверхности остаются как наночастицы, так и микрочастицы с конической впадиной. Значительная часть наночастиц переходит

в жидкую фазу, их средний диаметр 20 нм. Согласно результатам исследования дифракции отраженных электронов и рентгеноструктурного анализа, оксид алюминия и золото находятся в кристаллическом состоянии. В спектре ослабления коллоидного раствора в видимой области наблюдается небольшая плазменная полоса при 520 нм на почти постоянном фоне, связанном, вероятно с рассеянием излучения оксидом. В УФ области выраженный пик при 245 нм, оценка ширины запрещенной зоны – 2,9 нм. Авторы предложили механизм образования микрочастиц за счет вытягивания бугорка расплава с ростом шарика на конце, и предположили возможность образования газовой фазы с последующей конденсацией наночастиц.

В случае фотовольтаических приложений оксидные наночастицы, включая тип ядро-оболочка, могут вводиться в люминесцирующий полимер. В работе [74] получены наночастицы с ядрами из оксида цинка (осаждение из нитрата гидроксидом натрия в присутствии альгината натрия) с последующим прокаливанием, ультразвуковой обработкой и нанесением диоксида кремния золь-гель методом. Полученные наночастицы имели радиусы в диапазоне 10-20 нм. Их введение в люминесцирующий полимер приводит к тушению люминесценции, с концентрационной зависимостью подобной уравнению Штерна-Фольмера. Введение наночастиц уменьшает коэффициент пропускания пленки и приводит к росту эффективного показателя преломления.

В работе [75] предложена методика получения наночастиц золотое ядро – оболочка из оксида цинка, заключающаяся в абляции золотой мишени с последующей абляцией цинковой мишени в деионизованной воде. Абляция осуществлялась неодимовым лазером с длительностью импульса 9 нс (1064 нм). Затем коллоидный раствор подвергался лазерному воздействию с длиной волны 532 нм. Полученные в результате наночастицы имели структуру ядро-оболочка по данным просвечивающей электронной микроскопии и состояли из золота и оксида цинка с небольшой примесью кремния по данным рентгеноструктурного анализа. Средний диаметр наночастиц золота составлял 20 нм, оксида цинка – 30

нм, а наночастиц ядро-оболочка - 52 нм. При этом размер кристаллитов растет с 15 до 90 нм при небольшом варьировании энергии иницирующего абляцию импульсов (всего в 2 раза с 400 до 800 мДж). Зависимость оптической плотности коллоидного оксида цинка от длины волны слабая в видимой области, авторы пишут о наличии плазмонного резонанса при 410-419 нм. Судя по приводимым спектрам, содержащие золото коллоиды демонстрируют полосу плазмонного резонанса при 524-530 нм. При росте энергии импульса от 400 до 800 мДж ширина запрещенной зоны увеличивается от 3,56 до 3,63 эВ.

С использованием технологии газофазного синтеза показана возможность синтеза наночастиц на основе диоксида цинка и кремния со структурой ядро-оболочка, показана возможность его использования как УФ-адсорбента [76].

Создана технология синтеза наночастицы (строения ядро/оболочка), в которой между ядром и оболочкой помещена буферная область, полимера. Средний диаметр составил менее 250 нм [77] (что несколько превышает верхнюю границу частиц относящимся к нано). Формирование полимерного ядра выполняли в режиме нескольких последовательных загрузок мономера ядра и сшивающего агента [77]. Форм размерные характеристики межфазной области определяют из необходимости формирования актуальных физико-химических свойств для катализа или адсорбции.

В работе [78] «предложен новый метод получения наночастиц типа ядро/оболочка и получена система $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ (размер ядра Fe_3O_4 — 2,5 нм, размер оболочки CoFe_2O_4 — 1,25 нм) с узким распределением частиц по размерам». Показана возможность применения разработанного метода для создания оксидных систем состава магнитомягкий материал в качестве оболочки и магнито жесткий – ядро (или наоборот), с широким варьированием размеров для поиска актуальных результатов взаимодействия ядра и оболочки [78].

Публикаций по синтезу и свойствам наночастиц очень много, уникальные физические (в первую очередь магнитные и оптические) и химические (катализ) [79] делают эти объекты привлекательными для практического применения,

однако дальнейшее развитие тематики приводят к синтезу и исследованию еще более сложных по строению многослойных наночастиц. Например, наночастицы Ag/FeCo/Ag структуры ядро(Ag)/оболочка(FeCo)/оболочка(Ag), синтезированные плазменным методом перспективны для медицинских технологий, так как при комнатной температуре эти наночастицы проявляют суперпарамагнитные свойства, что позволяет использовать их в гипертермии [80].

1.4 Выводы

1. При воздействии излучения основной и второй гармоника неодимового лазера инициирование композитов PETN-наночастицы металлов носит стохастический характер.

2. Критическая плотность энергии инициирования PETN с включениями наночастиц Al (ядро) – Al₂O₃ (оболочка) существенно увеличивается при увеличении толщины оксидной оболочки.

3. Микроочаговая модель теплового взрыва качественно описывает экспериментальную зависимость критической плотности энергии инициирования PETN с наночастицами Al (ядро) – Al₂O₃ (оболочка) от массовой доли алюминия качественно, однако количественное описание отсутствует (Q_{abs} изменяется в 4 раза, а H_c – в 12,5).

4. На одной длине волны радиусы наночастиц с $Q_{abs \max}$ практически постоянны для широкого ряда металлов, в тоже время значения факторов эффективности поглощения наночастиц могут варьироваться более чем в десять раз.

5. Наночастицы металлов со структурой «ядро-оболочка» находят применение не только как компонент капсуля оптического детонатора, увеличивая поглощение энергии лазерного импульса, но и в современных технологиях за счет изменения оптических или магнитных характеристик наночастиц.

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ PETN С ВКЛЮЧЕНИЯМИ НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ

Моделирование эволюции температурных полей при нагревании наночастицы энергией лазерного импульса, дальнейшим прогревом прозрачной лабильной матрицы, инициировании химического разложения, при определенных условиях переходящее во взрывное разложение ВВ проведено в ряде работ [17-22, 81-82]. В этом случае система дифференциальных уравнений решается по неявной разностной схеме с переменным или постоянным шагом по времени и координате. Точность определяемых кинетических и критических параметров составляла порядка 4 %, что очевидно достаточно для качественного описания экспериментальных данных (превосходит точность экспериментального измерения плотности энергии импульса), но явно недостаточно для исследования рядовых зависимостей рассчитываемых величин. В настоящей работе относительная точность расчетов значительно увеличена для определения кинетических и критических параметров инициирования реакции взрывного разложения (до 10^{-12}), использовались общепринятые разностные схемы и современные методы решения систем дифференциальных уравнений с переменными шагами как по координате, так и по времени.

2.1 Микроочаговая модель теплового взрыва импульсного инициирования взрывного разложения PETN, с включением наночастиц металлов

Интерес к использованию оптических детонаторов связано с их применением при совершении взрывных работ, необходимость которых определяется экономической целесообразностью. Однако использование

взрывных работ повышает опасность техногенных катастроф. Компромиссом может оказаться использование относительно безопасных селективных оптических детонаторов. В ОД на основе инициирующих ВВ переход в самоускоряющийся режим осуществляется в результате реализации преимущественно цепного взрыва. Выделяющаяся в результате химического разложения лабильной матрицы энергия, в этом случае частично идет на генерацию реагентов (активных частиц) [49-53, 83-87]. Однако капсулы ОД, на основе инициирующих ВВ, являются неселективными, т.е. подвержены опасности несанкционированного взрыва в результате широкого круга внешних воздействий. Это существенный недостаток таких детонаторов, препятствующий их широкому внедрению.

Другая возможность создания селективных оптических детонаторов на основе вторичных ВВ экспериментально показано в работах [12 - 16]. Введение светочувствительных наночастиц в матрицу пентаэритритатетранитрата позволили снизить порог взрывного разложения лазерным импульсом более чем в десять раз. В работах [19 - 22] в рамках микроочаговой модели рассчитаны H_c PETN с добавками наночастиц ряда металлов, показано принципиальная возможность описания закономерностей лазерного импульсного инициирования композитов PETN-Me [70, 88].

Достаточно тонким моментом является использование в модели сферической модели вместо цилиндрической. Две группы обоснования этого прихода существуют в литературе. Первое – процессы перераспределения поглощаемой в композите энергии между наночастицей и матрицей являются значительно более медленными по сравнению с нагреванием наночастицы [17,18], так как коэффициенты температуропроводности материалов матрицы и включения α и α_m отличаются почти в тысячу раз. Второе – ВВ с включением наночастиц, наличием зерен между микрокристаллами прозрачной матрицы, является рассеивающей средой, прессованные таблетки PETN и могут иметь коэффициент диффузного отражения излучения основной гармоники

неодимового лазера до 30 % [89], поэтому проходящий в прессованную таблетку свет многократно отражается и происходит усреднение освещенности по углам сферической системы отсчета [13]. В результате и первого и второго мы можем считать практически равномерной по глубине наночастицы распределение температур, игнорируя угловое распределение и использовать сферическую симметрию с отсутствием заливистостей температуры по углам, оставляя только радиальные процессы. Основные процессы модели – нагревание наночастицы лазерным излучением, перераспределение тепла в композите с нагреванием энергетического материала и инициированием химической реакции разложения ВВ. Данные процессы соответствуют системе дифференциальных уравнений в частных производных [18, 81] (2.1):

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k_0 \frac{nQ}{c} \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), x > R \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= -k_0 n \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), x > R \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha_M \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right), x < R \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= 0, n = 0, x < R\end{aligned}\tag{2.1}$$

при $x = R$ возникает очевидное условие, связанное с поглощением лазерного излучения (2.2):

$$J - c_M \alpha_M \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow R-0} + c \alpha \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow R+0} = 0\tag{2.2}$$

где T это температура в К, c и c_M – значения теплоемкостей материалов матрицы и наночастицы в расчете на объем (в см^3), E – табличное значение энергии активации реакции химического разложения ВВ, Q – табличное значение теплового эффекта (той же реакции), k_0 - предэкспонент, n – относительная доля неразложенного ВВ, изменяется в диапазоне от одного (максимальное значение) до нуля (минимальное значение после взрыва), $J(t)$ - мгновенная плотность

мощности лазерного импульса (изменяется от 0 до максимального значения при $t=0$ и далее уменьшается до 0). Все расчеты проведены при значениях физико-химических параметров: $c = 2,22$ Дж/(см³·К) [19], $c_M = 2,7$ Дж/(см³·К) [19], $E = 165$ КДж/(моль·К), $k_0 = 1,2 \cdot 10^{16}$ с⁻¹, $\alpha = 1,1 \cdot 10^{-3}$ см²с⁻¹, $\alpha_M = 0,97$ см²с⁻¹, $Q = 9,64$ КДж/см³ [20].

Функцию временной зависимости $J(t)$ можно принять соответствующей экспериментальным комплексам (нормального распределения) [90]. При этом рационально сократить один параметр (положение максимальной мощности импульса) приняв его за ноль, соответственно начиная процесс моделирования (расчет) несколько ранее нуля (2.3):

$$J(t) = \sqrt{\pi} \cdot Q_{abs} R^2 k_i H_0 \cdot \exp(-k_i^2 t^2) \quad (2.3)$$

где k_i определяет продолжительность импульса по выражению $\tau = 2 \cdot k_i / \sqrt{\ln 2}$. Так как значение Q_{abs} определяет интенсивность поглощения, его оценки мы уделили много внимания.

Моделирование эволюции температурных полей при действии на композит на основе ВВ и поглощающих включений лазерным импульсом с переходом в самоускоряющийся режим проведено в работе [43]. Использовался метод численного решения системы дифференциальных уравнений методом прогонки с переменным шагом по координате и времени.

2.2 Методика моделирования кинетики быстропротекающих процессов

Методика моделирования кинетики быстропротекающих процессов (в том числе – взрывного разложения) разрабатывалась в Кемеровском государственном университете профессорами Кригером В.Г., Звековым А.А. и Каленским А.В. [83-87, 91, 92]. Для разработки капсуля ОД на основе инициирующего ВВ (азида серебра) [69] и моделирования процессов инициирования образцов при различной

симметрии процесса созданы точные разностные схемы в декартовых, полярных и сферических системах координат и соответствующие пакеты прикладных программ [83-86, 93, 94]. В декартовой системе координат, в которой рассматривались закономерности инициирования макрокристаллов азида серебра, объемы всех ячеек одинаковы и не зависят от расстояния до начала координат (x). В настоящей работе была использована методика моделирования кинетики быстропротекающих процессов, разработанная ранее, с существенным (на 6 порядков) уменьшением допустимой абсолютной и относительной ошибки с увеличением на 8 порядков точности расчета основных параметров взрывного разложения.

Объемы и площади соседних ячеек с номерами n и $n-1$ при постоянном размере ячейки Δx в сферической системе координат равны (2.4):

$$dV_n = \frac{4}{3} \pi [(n\Delta x)^3 - ((n-1)\Delta x)^3],$$

$$S_n = 4\pi(\Delta x n)^2, S_{n-1} = 4\pi(\Delta x(n-1))^2. \quad (2.4)$$

Скорость нагревания или охлаждения в ячейке с номером n вследствие теплопроводности из соседних ячеек определяется выражением (2.5):

$$\begin{aligned} \frac{dT_n}{dt} = & \left[-\alpha \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta x} 4\pi(\Delta x(n-1))^2 - \alpha \frac{T_n - T_{n+1}}{\Delta x} 4\pi(\Delta x n)^2 \right] \times \\ & \times \frac{1}{\frac{4}{3} \pi [(n\Delta x)^3 - ((n-1)\Delta x)^3]} = \\ & \frac{3\alpha}{\Delta x^2 [n^3 - (n-1)^3]} [(T_{n-1} - T_n)(n-1)^2 + (T_{n+1} - T_n)n^2] = \\ & \frac{3\alpha(2n^2 - 2n + 1)}{2\Delta x^2 [n^3 - (n-1)^3]} [(T_{n+1} + T_{n-1} - 2T_n) + ((2n-1)(T_{n+1} - T_{n-1}))] \end{aligned} \quad (2.5)$$

Для первой ячейки, которая соприкасается только с одной (второй по номеру) ячейкой, уравнение теплопереноса существенно упрощается (2.6):

$$\frac{dT_1}{dt} = \left[-\alpha \frac{T_1 - T_2}{\Delta x} 4\pi\Delta x^2 \right] \frac{1}{\frac{4}{3} \pi \Delta x^3} = \frac{3\alpha(T_2 - T_1)}{\Delta x^2}, \quad (2.6)$$

Для последней ячейки, граничащей с слабо проводящими средами воздуха или вакуума, принимается граничное условие постоянства температуры (граничное условие 1 рода). В связи с приближением сферической симметрии угловые функции распределения температуры являются постоянными не зависящими от углов. Даже при таких упрощениях выражения, моделирующие процессы теплопроводности (2.5 и 2.6), является достаточно сложным. Однако в данном приближении (постоянство шага по координате) мы не можем моделировать процесс инициирования взрывного разложения. Теплофизические характеристика штатных ВВ (PETN и гексогена) приводят к ограничению размера ячейки в очаге взрывного разложения $\Delta x \leq 1$ нм [21]. Элементарный расчет необходимого количества ячеек приводит к числу порядка нескольких тысяч при радиусе наночастицы 100 нм (для которых пороги инициирования взрывного разложения PETN под действием излучения 1064 нм являются минимальными). Для решения системы из нескольких тысяч жестких дифференциальных уравнений с необходимой точностью требуются специальные методы распараллеливания расчета и сохранения промежуточных данных. Любой оценочный расчет превращается в трудновыполнимую задачу для нескольких высокопроизводительных машин, связанных в один кластер. Поэтому необходимо использование расчетной сетки с существенно переменным шагом по координате. В [17, 18] предполагалось мгновенное прогревание металлической наночастицы, и поэтому первая (центральная) ячейка расчета включала всю наночастицу (иногда более 100 нм). Вторая и последующие ячейки включали слои ВВ и были в десятки раз меньше первой. Для наночастиц радиуса около 50 – 100 нм приближение постоянства температуры с мгновенным прогреванием является достаточно грубым, чтобы дальнейший расчет с повышенной точностью терял смысл. Оптимальное решение предложено в работах [33, 91 - 92] – разделить наночастицу в зависимости от радиуса. Максимальный размер ячейки в наночастице был выбран тридцать нанометров и дальнейшее уменьшение не сказывается на точности результатов. Для наночастиц с радиусами менее 45 нм

создавалась одна чисто металлическая ячейка (размером $2R/3$) и вторая комплексная ячейка, включающая как слой металла ($R/3$) так и матрицу ВВ (толщиной не более 0,5 нм) [91, 92]. При этом поглощающий слой металла в пятнадцать нанометров близок к толщине скин-слоя металлов [95]. Данная методика апробирована на ряде нанокompозитов прозрачная матрица – металлическая наночастица и позволяет успешно моделировать формирование очага взрывного разложения ВВ. Этот термин, а именно «очаг взрывного разложения», введен достаточно давно в работе [94] для описания зарождения и ускорения реакции цепного взрыва кристаллов азида серебра. Позднее, в том числе в настоящей работе, этот термин расширен для описания инициирования взрывного разложения в рамках теплового взрыва бризантных ВВ. В матрице PETN первые 50 ячеек (число можно менять как в сторону увеличения, так и уменьшения) имеют одинаковый размер. При облучении композита лазерным импульсом в этих ячейках наблюдается зарождение и развитие реакции взрывного разложения, происходит формирование очага реакции взрывного разложения. В следующих 50 ячейках происходит распространение реакции взрывного разложения по ВВ. Строго говоря, процесс распространения реакции взрывного разложения протекает с изменением давления, и необходимо учитывать уравнение состояния вещества (как в работах [96, 97]). Решение данной задачи выходит за рамки настоящей работы, поэтому акцент делался на расчет закономерностей зарождения (инициирования) реакции взрывного разложения PETN, когда ростом давления еще можно пренебречь.

Запись скорости изменения температуры в ячейке включающей границу раздела наночастица - PETN имеет вид (2.7):

$$\begin{aligned} \frac{dT_1}{dt} = & (\pi \cdot G \cdot \exp(-k_i^2 t^2) \cdot R^2 + \alpha \frac{T_2 - T_1}{\Delta x_2} 4\pi(R + \Delta x_2/2)^2 \cdot c + \\ & + \alpha_M \frac{T_{kn+1} - T_1}{\Delta x_{kn+1}} 4\pi(R - \Delta x_{kn+1}/2)^2 \cdot c_M)/c_1 \end{aligned} \quad (2.7)$$

где G – максимальная плотность мощности импульса, Δx_n – длина n -й ячейки, c_1 – теплоемкость всей первой ячейки, которая включает границу раздела металл-ВВ, и содержит материал как металлического включения, так и тонкий слой ВВ (2.8):

$$c_1 = \frac{4\pi}{3} \cdot (c_m \cdot (R^3 - (R - \Delta x(k_n + 1)/2)^3) + c \cdot ((R + \Delta x(2)/2)^3 - R^3)) \quad (2.8)$$

В выражении (2.8) в явном виде учитываются различия в величинах внутренних и внешних сторон ячеек. Эволюция температурных полей в начальных n - ячейках ВВ (как с постоянным, так и увеличивающимся шагом по координате), в которых формируется очаг взрывного разложения, рассчитывалась в цикле по (2.9):

$$\frac{dT_n}{dt} = \left(\begin{array}{l} 6 \cdot \alpha \frac{T_{n-1} - T_n}{(\Delta x_{n-1} + \Delta x_n)} \cdot (R_n - \Delta x_n/2)^2 + \\ 6 \cdot \alpha \frac{T_{n+1} - T_n}{(\Delta x_{n+1} + \Delta x_n)} \cdot (R_n - \Delta x_n/2)^2 \end{array} \right) / ((R_n + \Delta x_n/2)^3 - (R_n - \Delta x_n/2)^3) \quad (2.9)$$

В цикле, но с переменным повторением количества шагов, число которых зависит от радиуса наночастицы по представленному выше алгоритму, определялись изменения распределения температуры в наночастице (2.10):

$$\frac{dT_{k_n+i}}{dt} = \frac{3\alpha_i \cdot (T_{k_n+i+1} - T_{k_n+i}) \cdot (R_j + \Delta x_{k_n+1}/2)^2}{\Delta x_{k_n+1} \cdot ((R_j + \Delta x_{k_n+1}/2)^3 - (R_j - \Delta x_{k_n+1}/2)^3)} + \frac{3\alpha_i \cdot (T_{k_n+i-1} - T_{k_n+i}) \cdot (R_j - \Delta x_{k_n+1}/2)^2}{\Delta x_{k_n+1} \cdot ((R_j + \Delta x_{k_n+1}/2)^3 - (R_j - \Delta x_{k_n+1}/2)^3)} \quad (2.10)$$

Где R_j – координата центра ячейки, Δx_{k_n+1} – размеры ячеек в наночастице. Закономерности кинетики температуры в центре наночастицы (ячейка с номером $k_n + k_{n1}$, где k_{n1} – количество ячеек в наночастице) определяются теплопроводностью через границу раздела $k_n + k_{n1}$ и $k_n + k_{n1-1}$ ячейки (1 и 2 от центра наночастицы) (2.11):

$$\frac{dT_{k_n+k_{n1}}}{dt} = \frac{3 \cdot \alpha_m \cdot (T_{k_n+k_{n1}-1} - T_{k_n+k_{n1}})}{\Delta x_{k_n+1}^2} \quad (2.11)$$

В последней ячейке PETN граничные условия постоянства температуры (300 K), при которой разложения вещества за время взрывного разложения не наблюдается. Разбиение расчетного пространства композита Me-PETN на ячейки производится для трансформации системы дифференциальных уравнений в частных производных по уравнениям (2.4 – 2.11) в систему (порядка 500) обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Дополнительной сложностью моделирования является существенная разница в характерных временах протекающих моделируемых процессов в различных точках композита. Поэтому был выбран хорошо зарекомендовавший метод решения ОДУ (Рунге-Кутты 1-5 порядка с переменным шагом по времени).

Относительная погрешность на каждом шаге интегрирования менее 10^{-14} . Отклонение от точного баланса энергии при расчете циклов нагревание – охлаждение со взрывом – $3 \cdot 10^{-11}$, в допороговом режиме не более $3 \cdot 10^{-13}$.

2.3 Программа для расчета критических параметров инициирования взрывного разложения нанокompозитов PETN/Me

Современные научные исследования (обработка эксперимента, исследование кинетической модели процесса) практически невозможно без широкого привлечения численных методов [1-2]. В приближении равенства фактора эффективности поглощения одному, необходимо кинетическое исследование микроочаговой модели с определением точки бифуркации, при меньшем значении плотности энергии взрывное разложение не реализуется, при превышении – наблюдается очень быстрое взрывное разложение вещества. Первый этап заключается в максимально точном определении точки бифуркации, с минимально возможным различием между плотностями энергии выше которых наблюдается взрыв, а ниже которых взрыва нет. В данной работе относительная ошибка в определении точки бифуркации составляет величину 10^{-12} . На втором этапе полученное значение умножается на коэффициент, который учитывает

отражающие свойства поверхности образца, увеличения освещенности в образце вследствие процессов рассеяния и полного отражения [38-40, 52, 98-100], поглощающие свойства наночастиц (фактор эффективности поглощения) как это реализовано в работах [19-22, 27, 92, 101 - 104].

Численное исследование модели проведено на системе PETN – Sn, актуальность использования которой показано в работе [105]. В пакете прикладных программ вначале вводятся исходные данные, включающие константы используемых веществ (физико-химические характеристики), особенности расчета определяются варьированием общего количества ячеек в наночастице и лабильной матрице. Первые n ячеек матрицы одинаковые с толщиной порядка 1 нм. Толщина следующих 50 (или 75) ячеек существенно увеличивается в геометрической прогрессии со знаменателем b [105]. Если радиусы включений не очень большие (менее 35 нм) b ограничено 8% (1,08).

Полученная система ОДУ, точно соответствующая системе дифференциальных уравнений в частных производных решается методом Рунге-Кутты 1-5 порядка. Относительная (RTol) и абсолютная (ATol) точности могут изменяться пользователем (по умолчанию $RTol = 10^{-13}$; $ATol = 10^{-14}$). Для каждого задаваемого радиуса наночастицы рассчитываются два значения плотности энергии импульса. Первое (H1) является максимальной плотностью энергии импульса, при котором реакция затухает. Второе (H2) – минимальная плотность энергии импульса, при которой реализуется самоускоряющийся режим развития реакции.

В [36] апробированы самые востребованные элементы пакета прикладных программ. В нашем случае актуальным является максимально точное определение критических порогов взрывного разложения ВВ, содержащих наночастицы металла, при облучении импульсным лазерным импульсом. Дополнительными возможностями пакета прикладных программы [36] является определение зависимостей критериев инициирования (температуры вспышки и плотности энергии импульса) от радиуса наночастиц. Реализованный алгоритм решения

задачи является устойчивым и позволяет оценить оптимальные размерные характеристики наночастиц олова для достижения минимального порога срабатывания оптического детонатора [38], для чего необходимо учитывать индивидуальные оптические свойства наночастиц и корпоративные – композита. В работе [105] пакет прикладных программы [36] нами был расширен для расчета и визуализации критериев инициирования взрывного разложения композитов на основе PETN и наночастиц следующих металлов: свинец, олово, алюминий, серебро, золото, палладий, ванадий, хром, медь, железо, кобальт, никель. Различные блоки пакета прикладных программ [106 -108] посвящены расчету критической плотности энергии, температуры вспышки, времени перехода реакции в самоускоряющийся режим, различным вариантам интерполяции критериев взрыва функциональными зависимостями и инварианта модели при широком варьировании радиусов включения, длины волны и длительности импульса.

2.4 Выводы

1. Микроочаговая модель может быть применена для моделирования лазерного инициирования взрывного разложения PETN, содержащего светопоглощающие включения наночастицы металлов.

2. Адаптирована разработанная ранее методика моделирования кинетики быстропротекающих процессов для моделирования лазерного инициирования взрывного разложения PETN.

3. Для расчета кинетических и критических параметров лазерного импульсного инициирования нанокомпозитов PETN с наночастицами ряда металлов разработан и зарегистрирован пакет программ, в том числе получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ КОМПОЗИТОВ PETN/Me ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

Продemonстрируем возможности представленной выше методики на примере моделирования закономерностей импульсного лазерного инициирования взрывного разложения PETN – Sn [38].

3.1 Моделирование быстропротекающих процессов в композитах PETN/Sn

Для близких систем модель сформулирована ранее. Обновленными параметрами модели для композитов PETN с наночастицами Sn являются физико-химические характеристики олова: коэффициент температуропроводности металла $0,23 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$, теплоемкость $1,67 \text{ Дж}/(\text{см}^3\cdot\text{К})$, комплексный показатель преломления $3.44 - 7.34i$ [105, 109, 110]. Вначале рассчитаем оптические характеристики Sn по методике [25, 27, 29, 35]. В программе есть возможность расчета как поглощающих, так и рассеивающих свойств наночастицы, включая индикатрису рассеяния. В процессе расчета могут определяться максимальные и минимальные значения оптических характеристик наночастиц а также зависимости этих характеристик от R , m_o (матрицы), длины волны. Результаты расчетов могут выводиться с необходимой точностью как в виде массивов, так и двух- и трехмерных графиков. В широком диапазоне допустимо изменение величин импульса, наночастиц и ВВ, включая виртуально возможные значения, например, обнуление предэкспонента (для выяснения роли или вклада химического разложения) [101].

Далее с высокой точностью определяются пороговые значения точки бифуркации системы. Для каждого радиуса наночастиц рассчитываются $H1$ и $H2$,

методика и химический смысл которых определен выше. Для определения относительной точности расчета необходимо рассчитать выражение $(H_2 - H_1)/H_2$. В ранних работах [19-22] при использовании достаточно слабых по сегодняшним требованиям компьютеров, она составляла всего одну десятую процента, в более поздних точность повышена в десять раз [30], что вполне достаточно для не только качественной, но и во многих случаях – количественной интерпретации экспериментальных закономерностей. Однако такая точность явно мала для определения рядовых зависимостей, кроме того не позволяет даже обнаружить факт образования квазистационарного очага самоускоряющейся реакции, сопровождающиеся либо уменьшением концентрации переносчиков цепи (в иницирующих ВВ), либо обратимым изменением температуры очага непосредственно перед взрывным разложением (как в исследованных ранее цепно-тепловых моделях взрыва [111]).

Естественно, повышенная точность расчета сопровождается существенным увеличением машинного времени, поэтому как абсолютная, так и относительная точность является варьируемым параметром системы [106], конкретное значение которого определяется и вводится в программу. В очень широком классе задач она может быть на уровне 1 процента, и время расчета H_c для одного радиуса не более 20 минут. Однако определению закономерностей и кинетических особенностей эволюции очага самоускоряющейся реакции относительную точность расчета необходимо повысить в миллионы раз. В работе [105] мною опубликованы результаты расчёта пороговых характеристик точки бифуркации композитов PENT/Sn ($R = 95$ нм). Данное значение радиуса определяется результатами проведенных ранее расчетов, когда наночастицы Al, Co, Ni и ряда других металлов является оптимальными при иницировании взрывного разложения PENT импульсом длительностью 12 нс. Для радиуса девяносто пять нанометров величина Q_{abs} составила «0,846» [105]. Рассчитанные значения « $H_1 = 0,0593521594$ Дж/см², $H_2 = 0,0593521597$ Дж/см²» [105]. Рассчитанные величины H_c для импульса основной (что немаловажно) гармоники

неодимового лазера менее одной десятой джоуля на квадратный сантиметр определяет перспективы олово в составе ОД на основе вторичного ВВ.

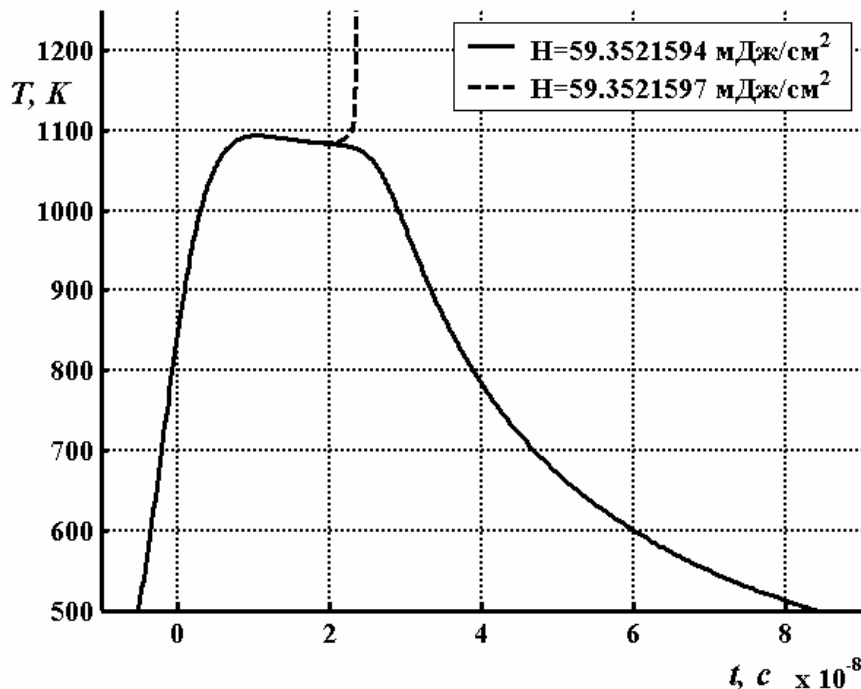


Рисунок 3.1 – «Рассчитанные температурные кинетические закономерности на границе PENT – олово при радиусе наночастицы 95 нм при энергиях лазерного импульса (12 нс), указанных в легенде» [105].

В заключение приведем рассчитанные кинетические закономерности температуры первой ячейки Sn/PENT исследуемого радиуса (рисунок 3.1). Вблизи точки бифуркации мы отчетливо видим аналог режима квазистационарного очага, обнаруженного при кинетическом анализе цепно-тепловой модели [111]. В чем особенность режима? В данном случае режим с уменьшением температуры обнаружен при исследовании модели чисто теплового взрыва, усложненного малыми размерами разогреваемой лазером очага реакции. При этом до определенного временного момента кинетические режимы инициирования взрывного разложения и оканчивающиеся остыванием образца при незначительном разложении матрицы ВВ совпадают [112, 113]. Вначале мы видим синхронное увеличение температуры почти до 1100 К. Локальный экстремум температуры достигается в момент времени десять наносекунд

(соответственно после максимума мощности импульса). Т.к. длительность импульса всего 12 нс плотность мощности импульса в этот момент всего одиннадцать процентов от максимальной [105, 113]. Не удивительно, что начинается синхронное уменьшение температуры (остывание очага). Квазистационарный характер процесса в этом случае определяется несколькими параллельно протекающими процессами: наряду с заметным уменьшением температуры (практически на 10 К), что приводит к уменьшению скорости саморазогрева за счет химического разложения ВВ, также продолжает уменьшаться интенсивность импульса, что так-же уменьшает приток энергии к очагу реакции, положительным для стабилизации очага процессом, уравнивающим и замедляющим процесс остывания очага является расширение очага реакции с увеличением энерговыделения за счет химической реакции в относительно удаленных от наночастицы частях ВВ и уменьшение градиента температуры при этом процессе. В течении десяти наносекунд очаг взрывного разложения расширяется и наступает разветвление кинетических температурных кривых. При Н2 реакция на 20 нс переходит в самоускоряющийся режим и единиц пикосекунд оказывается достаточно для полного разложения матрицы PETN непосредственно рядом с сенсibiliзирующей наночастицей. При Н1 – начинается ускоренное остывание зоны реакции. Чем точнее определена точка бифуркации – тем длительнее режим квазистационарного очага реакции. Однако превышение порога всего на один процент приводит к переходу реакции в самоускоряющийся режим непосредственно в момент действия лазерного импульса. Таким образом, анализ кинетических закономерностей процесса позволяет оценить, насколько далеко мы находимся от точки бифуркации [113].

3.2 Теплофизические радиусы наночастиц металлов в PETN

Перейдем к следующему этапу кинетического анализа модели – определению оптимальных размерных характеристик сенсibiliзирующих наночастиц при геометрическом сечении поглощения. Расчеты проведем в

лицензионном пакете MatLab (№ 824977) по модели, сформулированной в [17, 18, 81, 112]. На рисунке 3.2 показана рассчитанная зависимость $H_c(R)$ композитов Sn/PETN инициированных импульсом 12 нс, имеющая глобальный минимум (с координатами R_{min} и H_{min}) [105].

Аналогичный расчет H_c при варьировании радиусов наночастиц от 10 до 120 нм для композитом PETN с наночастицами выше перечисленных металлов (Al, Ag, Au, Co, Cr, Cu, Ni, Fe, Pb, Pd Sn V). Рассчитанные зависимости $H_c(R)$ аналогичны изображенной на рисунке 3.2: от начальной точки расчета до R_{min} H_c существенно уменьшается, достигая экстремума H_{min} , после чего происходит увеличение порога инициирования [114, 115]. Величина R_{min} определяет минимальную H_c для каждого Me при заданной продолжительности воздействия и является оптимальным теплофизическим (с геометрическим сечением поглощения наночастицы) радиусом наночастиц [114].

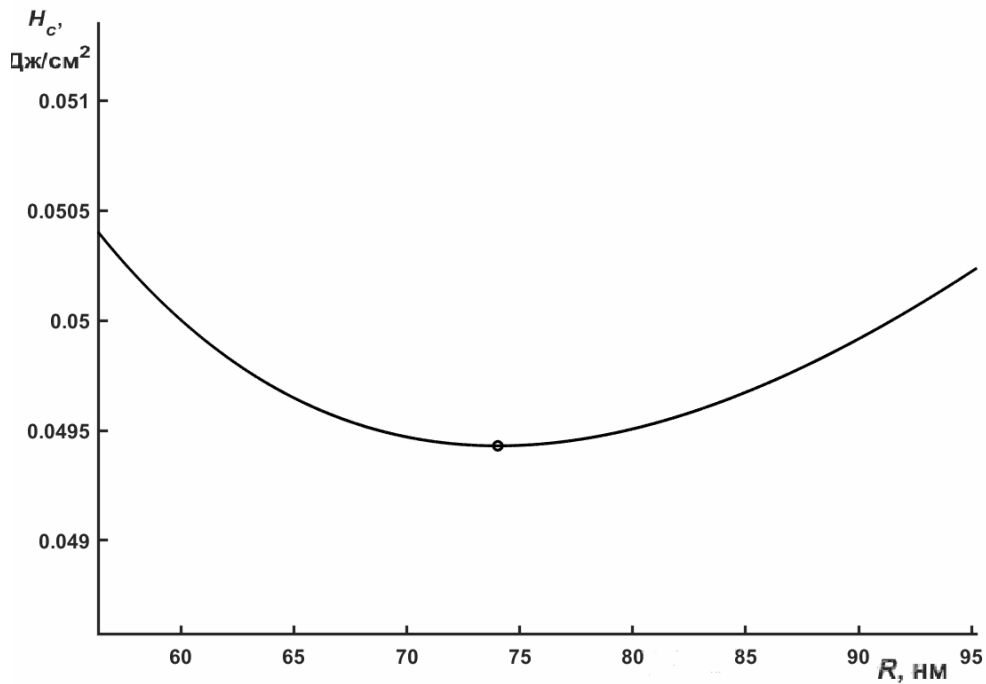


Рисунок 3.2 – Зависимость критической плотности энергии от радиуса наночастиц олова в PETN для длительности импульса 12 нс, линия – расчет, точка - минимум зависимости с координатами R_{min} и H_{min} .

Для определения вкладов лазерного разогрева и химического разложения в формирование очага взрывного разложения в работе [114, 115] нами рассчитаны временные зависимости разогрева с дополнительным фиксированием

максимальной температуры (T_{max}) центральной ячейки композита при H_c , времени формирования $T_{max} - t(T_{max})$. Для этого параллельно проводились аналогичные расчеты без учета разогрева от экзотермического разложения, для чего предэкспонент константы скорости уменьшался до нуля).

Для 12 выбранных металлов в PETN рассчитаны выбранные характеристики процесса вблизи точки бифуркации [116]. Для примера в таблице 3.1 представлены результаты расчетов H_c , T_{max} , $t(T_{max})$, T_{max0} и $t(T_{max0})$ композита Ni/PETN.

Значения H_c существенно зависят от радиуса наночастиц, но еще более удивительным результатом является существенная зависимость характерных температур процесса от радиуса наночастиц. Анализируя данные, обобщенные в таблице 3.1, мы констатируем существенный вклад саморазогрева за счет химического разложения. Это проявляется в разнице T_{max} и T_{max0} . При этом, она не постоянная, а также зависит от R уменьшаясь при увеличении R [108]. Так для композитов Ni/PETN при радиусе десять нм различия в температурах около 348 К, что означает относительный вклад саморазогрева в этих условиях – 23 %. В пределе максимальных R (120 нм) разница в температурах всего сорок К, что означает уменьшение вклада саморазогрева до 5 %. Как следует из работы [114, 116] температурные функции T_{max0} и T_{max} от R соответствуют уравнениям (3.1):

$$T_c(R) = T_\infty + \frac{r_T}{R}, \quad (3.1)$$

где основные параметры функций (T_∞ и r_T) оцениваются при использовании метода наименьших квадратов при описании соответствующих функциональных зависимостей во всем интервале аргумента. В работе [114] опубликованы полученные нами для 12 композитов T_∞ и r_T зависимости $T_{max0}(R)$, приведённые в таблице 3.2.

Таблица 3.1 – Рассчитанные при радиусах наночастиц никеля R значения H , T_{max} , $t(T_{max})$, T_{max0} , $t(T_{max0})$.

R , нм	H , Дж/см ²	$T_{max} * 1000$, К	$t(T_{max})$, нс	T_{max0} , К	$t(T_{max0})$, нс
10	0,136509	1500	4,11	1152	1,34
15	0,098326	1359	6,02	1109	1,98
20	0,0819898	1289	7,56	1090	2,56
25	0,0735288	1245	8,72	1079	3,07
30	0,0688481	1214	9,47	1072	3,59
35	0,0662040	1192	10,18	1067	4,00
40	0,0647946	1174	10,79	1063	4,38
45	0,0641871	1159	11,20	1060	4,70
50	0,0641280	1148	11,49	1058	5,07
55	0,0644595	1137	11,65	1056	5,36
60	0,0650783	1129	11,74	1054	5,60
65	0,0659141	1121	11,75	1053	5,87
70	0,0669174	1115	11,74	1051	6,08
75	0,0680525	1109	11,67	1050	6,28
80	0,0692929	1104	11,61	1049	6,43
85	0,0706188	1100	11,52	1047	6,69
90	0,0720146	1096	11,50	1046	6,88
95	0,0734685	1092	11,42	1045	6,99
100	0,0749708	1089	11,44	1045	7,12
105	0,0765140	1086	11,39	1044	7,30
110	0,0780920	1083	11,36	1043	7,43
115	0,0796995	1080	11,40	1042	7,58
120	0,0813332	1078	11,41	1041	7,69

Таблица 3.2 - Рассчитанные параметры инициирования взрывного разложения PETN с наночастицами различных металлов [114].

Металл	T_{∞} , К	r_T , К*нм	h нм	H_{min} , мДж/см ²	R_{min} , нм
Pb	1070,45	1638,38	35,03	47,712	79,2
Sn	1071,39	1644,82	34,98	49,430	74
Al	1074,31	1688,38	34,85	54,987	61,3
Ag	1074,35	1689,10	34,85	55,206	60,9
Au	1074,43	1690,08	34,85	55,352	60,6
Pd	1075,68	1703,11	34,81	58,068	56
V	1076,33	1709,01	34,79	58,559	55,2
Cr	1076,03	1704,22	34,81	59,930	53,3
Cu	1075,99	1700,82	34,83	61,145	51,6
Fe	1076,73	1702,26	34,82	61,802	50,8
Co	1076,41	1698,39	34,84	62,928	49,4
Ni	1076,51	1693,51	34,85	64,097	48,1

Анализ результатов таблицы 3.2 показывает близость определенных значений T_{∞} и r_T для 12 композитов [114-116]. Если первая характеристика отличается в максимуме всего на 6 К, а это менее половины процента, то вторая – несколько больше с экстремальным отклонением от среднего на 2%. Следовательно, критическая температура очага реакции взрывного разложения PETN практически постоянна при данной длительности импульса и двенадцати различных по химическому составу сенсibiliзирующих наночастиц. В тоже время рядовые зависимости исследованных параметров прослеживаются: минимальные значения как T_{∞} так и r_T получились для композита Pb/PETN с минимальным среди 12 металлов значением теплоемкости металла.

Рассмотрим теперь вслед за нашими работами [114-121] зависимости $H_c(R)$ двенадцати проанализированных составов ОД. Проведем кинетический анализ

модели при импульсном лазерном разогреве включений в прозрачной инертной матрице. Экстремальное значение разогрева в зависимости от радиуса наночастицы и толщины прогретого за действие импульса слоя матрицы (h) определяется уравнением (3.2) [116]:

$$\Delta T = \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{\pi R^2 H}{C_m R^3 + C((R+h)^3 - R^3)}. \quad (3.2)$$

Кратко остановимся на основных этапах вывода уравнения (3.2). Очевидно в адиабатическом приближении разогрев образца определяется как подведенной энергией, так и теплоемкостью материала. При этом численное значение увеличения температуры будет определяться частным этих двух величин. В приближении геометрического сечения поглощения, увеличения освещенности, считая, что до поверхности включения доходит плотность энергии импульса H , в числителе (3.2) получим значение именно энергии, подведенной к системе за импульс. Теплоемкость разогретой части композита складывается из теплоемкости наночастицы (не на единицу объема, а на всю) и разогретой за импульс части прозрачной матрицы. Приближением (достаточно точным как мы увидим ниже) является принятие одинаковой температуры очага реакции. Значение h при этом определяется не только длительностью импульса, но и коэффициентом температуропроводности матрицы, но не теплофизическими свойствами наночастицы (при выполняемом для всех металлов соотношении $\alpha \ll \alpha_m$). Учитывая (3.1), и пренебрегая слагаемыми, зависящими от h^3 , получим (3.3) [116]:

$$H = \frac{4}{3R} \cdot \left(T_\infty + \frac{r_T}{R} - T_0 \right) \cdot [C_m R^2 + 3Ch \cdot (R+h)]. \quad (3.3)$$

Результаты обработки зависимостей $H(R)$ для двенадцати композитов Me/PETN по выражению (3.3) с учетом определенных ранее подгоночных параметров T_∞ и r_T представлены в таблице 3.2 [114]. Так в четвертом столбце представлены

полученные эффективные толщины прогретого слоя матрицы, которые с очень хорошим приближением можно считать постоянными, как это и следует из их смысла. Величина усредненной по 12 образцам h составила 34,9 нм, при этом даже максимальное значение отклонения от средней величины составило половину процента.

Рассмотрим возможное описание рассчитанных в таблице 3.2 величин координат экстремума зависимости $H(R)$, которые сильно отличаются для исследованных композитов. В модели очевидно только два свойства включений могут определять величину R_{min} : это коэффициенты температуропроводности (a_M) и теплоемкости (c). Рассматривая ряд температуропроводностей использованных металлов. Рассматривая группы включений с различными значениями a_M (Fe, Ni и Co, для которых $0,22 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$, $0,23 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ и $0,27 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$, соответственно), мы видим практически одинаковые значения R_{min} . Для Cu коэффициент температуропроводности существенно возрос ($1,17 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$), а R_{min} осталось практически на прежнем уровне. Достаточно приведенных примеров для обоснования вывода о независимости R_{min} от коэффициентов температуропроводности. Понятна и причина этого: коэффициенты температуропроводности включений в сто – тысячу раз больше соответствующего параметра матрицы ВВ, что влечет быстрый, практически равномерный по радиусу наночастицы разогрев лазерным импульсом. Следовательно, процесс инициирования взрывного разложения определяется плотностью энергии импульса, его длительностью и скоростью отвода тепла в матрицу.

Используя значения таблицы 3.2, мы проследим зависимость от теплоемкости металла полученных величин. Температура вспышки и ее зависимость от координат достаточно слабо зависят от теплоемкости металла, но основное внимание уделим достаточно сильной зависимости от физико-химических параметров включения координат экстремума $H(R)$ 12 композитов рассмотренных металлов с PETN, представленных в таблицы 3.2 [114]. Учитывая

слабость функции $T_{max0}(R)$ при R_{min} , можно ее совсем игнорировать, считая температуру вспышки постоянной. Тогда координаты минимума $H(R)$ будут определяться величине радиуса максимально нагретого при данной длительности импульса включения, полученные в [19, 114] (3.4):

$$R_{min} = \sqrt{\frac{6\alpha k_i C}{C_m}}. \quad (3.4)$$

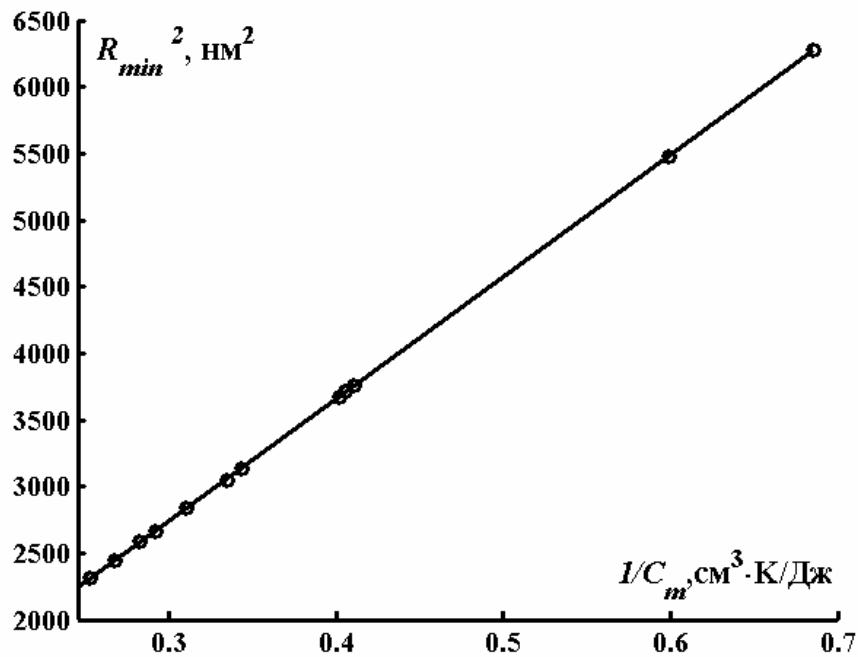


Рисунок 3.3 – Зависимость R_{min}^2 наночастицы, от $1/C_m$ металлов при ширине импульса на полувысоте 12 нс [114].

Мы видим, что существуют координаты линеаризации уравнения (3.4). Если радиус наночастицы возвести в квадрат и определить характер его зависимости от обратной величины теплоемкости металла, то мы получим линейную зависимость, проходящую через начало координат (точку 0,0). Проведя необходимые математические расчеты [122], данные таблицы 3.2 представлены на рисунке 3.3 в спрямляющих координатах (линейная корреляционная зависимость в координатах квадрата оптимального радиуса от обратной теплоемкости). Точками на рисунке показаны данные для включений,

перечисленных в первом столбце таблицы 3.2. Предварительный вывод достаточно очевидный: проведенные точные вычисления позволили практически исключить вычислительные ошибки, и мы наблюдаем практически идеальную линейную зависимость [122].

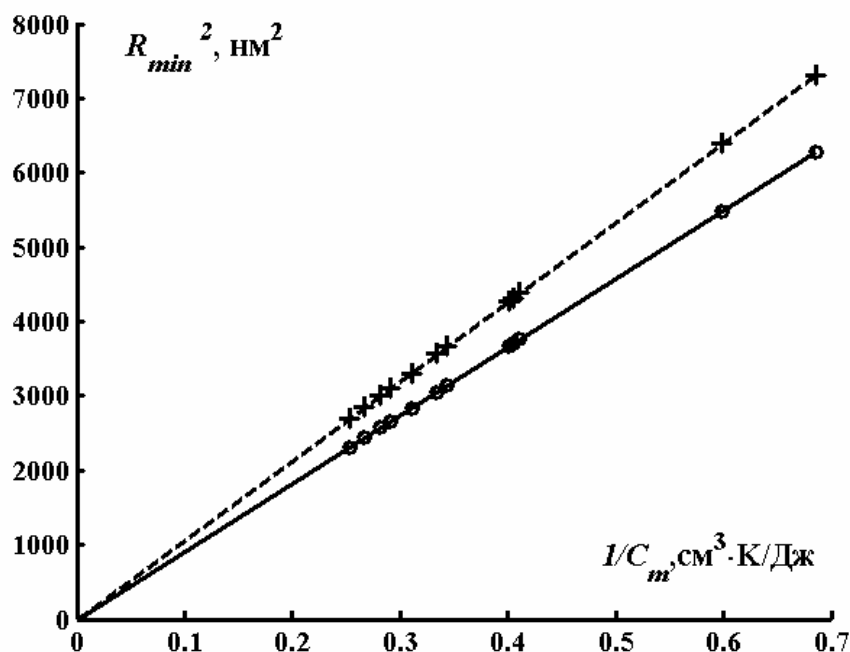


Рисунок 3.4 – Зависимости квадрата теплофизического радиуса наночастиц 12 металлов от их обратной теплоемкости для композитов на основе PETN при длительностях импульсов 12 нс (кружки – расчет, сплошная прямая – аппроксимация в рамках модели) и 14 нс (штриховая линия – аппроксимация, точки “+” – расчет)

Для проверки (3.4) полученная зависимость была экстраполирована к 0 (проходит ли через начало координат) и проведен аналогичный расчет для длительности импульса 14 нс (прямая должна иметь больший коэффициент наклона, чем при 12 нс) [114, 122].

На рисунке 3.4 приведены результаты расчета теплофизических радиусов как при 12 нс, так и рассчитанных позже 14 нс, представленные в спрямляющих координатах уравнения (3.4) [122]. Мы видим полное соответствие рассчитанных величин уравнению (3.4).

3.3 Инвариант микроочаговой модели лазерного инициирования композитов PETN – наночастицы металлов

Поиск характеристик (иногда составных), незначительно меняющихся при варьировании условий протекания процесса в широком диапазоне является актуальной задачей анализа закономерностей химических реакций [117]. Такие характеристики называются инвариантами и свидетельствуют о глубинных, может быть пока не понятых закономерностях процесса. Такими характеристиками являются, например, общая масса веществ, участвующих в химической реакции. В настоящей части работы попытаемся отыскать инвариант процесса импульсного лазерного инициирования взрывного разложения исследуемых в работе образцов. Исследования проведены на всех 12 композитах, но в работе представлены только для Sn/PETN – [105], получены в зарегистрированном пакете прикладных программ [106].

Характеристики зависимостей $T_{max0}(R)$ и $T_{max}(R)$ для нанокompозита PETN – олово представлены в [123]. В соответствии с уравнением (3.1) они плавно спадают без экстремума при увеличении радиуса, что очевидно исключает данную характеристику из кандидатов в инварианты.

Массив времени, при которой температура приобретает максимальное значение составляет: [3,8 5,5 6,8 7,7 8,6 9,4 10,1 10,6 10,8 11,1 11,1 11,1 11,0 11,0 10,9 10,8 10,7 10,6 10,6 10,5 10,5 10,5 10,4] [123]. Размер массива – 23 элемента, соответствуют радиусам наночастиц в диапазоне первого столбца таблицы 3.1. Мы видим вначале существенное увеличение, потом выход на широкий экстремум и плавное снижение величины. Аналогично ведет себя зависимость порога инициирования от радиуса, только вместо роста у нее наблюдается падение, а вместо падения – рост. Говорят, что такие величины изменяются в противофазе. Важно, что для всех композитов экстремумы зависимостей совпадают, следовательно, из их произведения можно попытаться составить

инвариант. Чтобы представить данные в одних координатах искомые функции рационально нормировать на соответствующие экстремальные зависимости. $t_n(R)$ при этом нормируется на максимальное время появления T_{max0} (11,13557 нс), а $H_n(R)$ является результатом деления H_c на минимальный порог инициирования ($0,049 \text{ Дж/см}^2$). Полученные зависимости изображены на рисунке 3.5 [123].

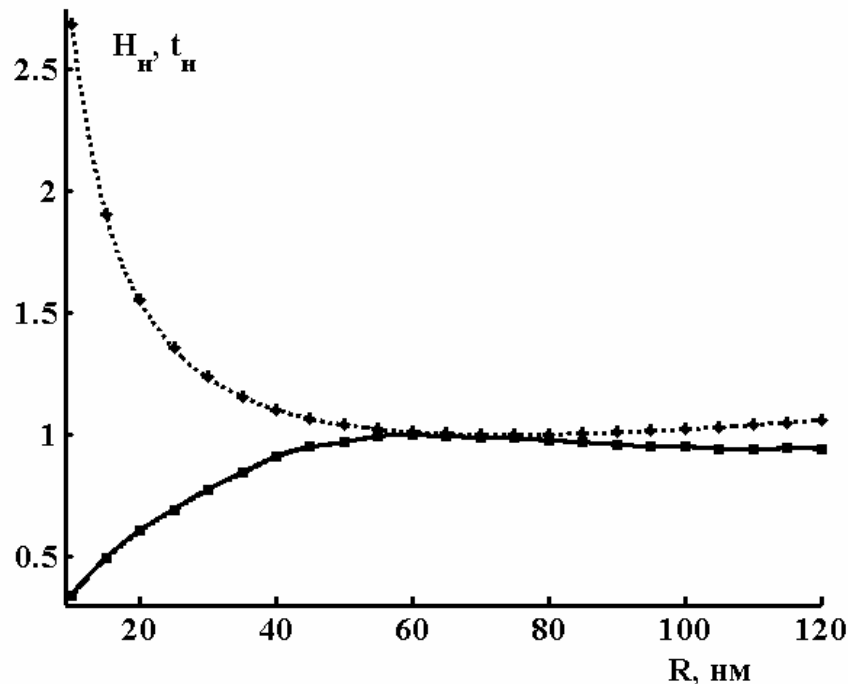


Рисунок 3.5 – Нормированные зависимости H_c (+) и t_n (*) от радиуса включений в композитах Sn/PETN. Сплошная линия - аппроксимация t_n , пунктир - H_n (сплайном) [123].

Рассмотрены различные варианты инварианта в результате произведения нормированных $t_n(R)$ и $H_n(R)$, возведенную в некоторую степень, величину которой мы определяли МНК. $\wedge X(1)$. Очевидно возведение времени в некоторую степень закореллирует искомую зависимость. Определенное значение степени с точностью около 1 % составило величину один, следовательно, инвариантом является произведение величин $t_n(R)$ и $H_n(R)$, представленное на рисунке 3.6 [123].

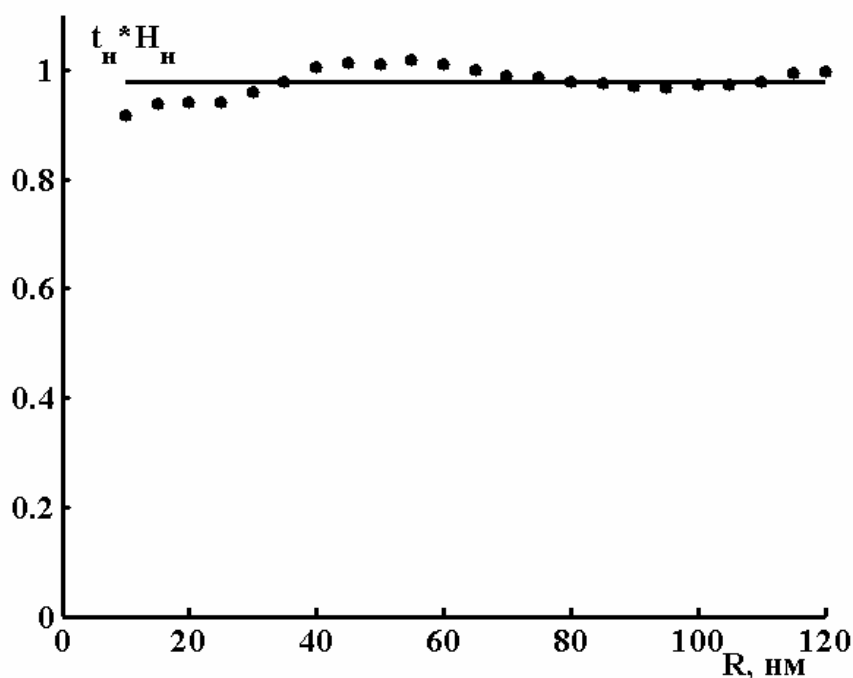


Рисунок 3.6 – Зависимость произведения t_n и H_n от R для композита Sn/PETN при инициировании лазерным импульсом (12 нс). «*» – значение инварианта для каждого радиуса, – линия – теоретическое значение инварианта [123].

Как мы видели отдельные множители в диапазоне изменяющихся радиусов отличаются почти в 3 раза. Однако инвариант (их произведение) изменяется на 2 % при максимальном отклонении в 5 %. Для всех исследуемых 12 композитах Me/PETN при двух длительностях импульса среднее отклонение составило 2%, следовательно это инвариант модели [114-123]. Строгое теоретическое обоснование полученного инварианта пока не получено. Возможный вариант его обоснования связан со временем достижения максимальной температуры, отклонение от оптимальных условий инициирования реакции за счет увеличения или уменьшения радиуса наночастицы относительно теплофизического приводит к повышению плотности энергии, большей температуре очага реакции и меньшему времени разогрева.

3.7 Выводы

1. Адаптирован пакет прикладных программ для расчетов кинетических и критических закономерностей лазерного инициирования 12 композитов Me/PETN.

2) Рассчитаны зависимости критической плотности энергии 12 композитов Me/PETN от радиусов наночастиц в диапазоне от 10 нм до 120 нм (при значении коэффициента эффективности поглощения равном 1).

3) Определены оптимальные теплофизические радиусы 12 металлов в PETN, рядовые и функциональные зависимости рассчитанных величин, сделан вывод о существовании линейной зависимости квадрата теплофизических радиусов от обратной теплоемкости.

4) Рассчитана зависимость температуры вспышки 12 композитов Me/PETN радиуса наночастицы: при уменьшении радиуса наночастицы температура вспышки увеличивается, при этом существенно возрастает вклад разогрева за счет химической реакции.

5) Сформулирован инвариант взрывного разложения композитов PETN – наночастицы металлов лазерным импульсом. Показано, что время появления максимальной температуры в системе связано с критической плотностью энергии импульса для исследуемого радиуса наночастицы.

ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОЧАСТИЦ МЕТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ “ЯДРО-ОБОЛОЧКА”

При разработке составов капсулей ОД на основе вторичных ВВ, sensibilizированных наночастицами различной природы необходимо исследовать влияние физико-химических параметров включений на энергетический порог инициирования лазерным импульсом. Выше кратко представлены результаты зависимости от материала и размера наночастицы эффективности поглощения, показано существенное изменение Q_{abs} от этих параметров [19-30, 124]. Рассмотрены [99, 125 - 128] различные варианты количественного моделирования прохождения света через диффузионно-рассеивающую среду с определением фактора усиления освещенности в образце. В [129] предложена качественная модель учета возможности пространственной флуктуации распределения зарождающихся очагов реакции взрывного разложения в ВВ, показана принципиальная возможность интерпретации стохастического (вероятностного) характера инициирования взрыва. Изменение агрегатного состояния вещества при лазерным нагреванием, ранее учтено, но без возможности диффузии или конвекции вещества, так как процесс взрывного разложения в зоне облучения заканчивается практически за время действия импульса и существенных перемещений за наносекунды не происходит. Однако в [130] сформулирован механизм с участием процесса диффузии реагентов в окрестностях нагреваемой СВЧ излучением частицы, что оправдано для относительно длительного инициирующего воздействия. Начальным этапом расчёта критической плотности энергии будет исследование оптических характеристик наночастиц со структурой “ядро-оболочка” в прозрачной матрице PETN.

4.1 Оптические свойства наночастиц металлов с оксидной оболочкой

Полупроводниковые и металлические наноматериалы и нанокомпозиты обладают интересными свойствами линейного поглощения, излучения фотолюминесценции и нелинейно-оптическими свойствами [5]. Наноматериалы с небольшими размерами частиц демонстрируют повышенное оптическое излучение, а также нелинейные оптические свойства из-за эффекта квантового ограничения. В последнее время большое внимание уделяется получению полимерных полупроводников и других нанокомпозитных материалов, имеющих потенциальное применение в различных устройствах оптоэлектроники и фотоники.

Наночастицы типа ядро-оболочка получили наибольшее распространение благодаря относительной простоте приготовления и важным физико-химическим свойствам. Во многих случаях ядро и оболочка отличаются не только физически, но и функционально. В этом случае многозадачность наночастиц реализуемая при разделении задач ядра и оболочки. Ядро этих наночастиц обычно состоит из полупроводниковой или ферромагнитной фазы. В качестве оболочки таких частиц могут выступать оксиды, благородные металлы, фосфаты, полимеры [71-80].

Особняком стоят специфические сферы использования наночастиц с выраженной оболочкой для изоляции ядра от разрушительного воздействия матрицы, в которой находится частица. Это необходимо для интенсификации процесса поглощения и испускания энергии люминесцентными частицами, для направленной доставки лекарственных препаратов и др. [11].

Оптические свойства гибридных наночастиц значительно отличаются от свойств компонентов, составляющих наночастицу [71-80]. Взаимодействие компонентов наночастицы может приводить к смещению положения пиков в сечениях поглощения, возникновению новых пиков, а также варьированию амплитуды сечений поглощения.

В работе [131] нами проведено описание зарегистрированного пакета прикладных программ для компьютерного расчета оптических характеристик наночастиц, особенностью пакета является возможность моделирования оптических характеристик включений прозрачной матрицы со структурой ядро-оболочка. Для этого была привлечена теория Адена-Керкера (продолжение подхода Ми для сферических наночастиц со структурой ядро-оболочка [25]). Фактор эффективности поглощения для таких частиц будем обозначать как и для простых наночастиц Q_{abs} . Методика расчета факторов эффективности рассеяния и экстинкции аналогична (1.1, 1.2). Однако соответствующие коэффициенты (c_l и b_l) определяются уже не уравнением (1.3), а (4.1):

$$\begin{aligned}
 c_l = i & \begin{vmatrix} 0 & -(N_2/N_1)\psi_l(N_1a) & \psi_l(N_2a) & \zeta_l(N_2a) \\ 0 & -\psi'_l(N_1a) & \psi'_l(N_2a) & \zeta'_l(N_2a) \\ N_2\psi_l(v) & 0 & \psi_l(N_2v) & \zeta_l(N_2v) \\ \psi'_l(v) & 0 & \psi'_l(N_2v) & \zeta'_l(N_2v) \end{vmatrix} \\
 & \begin{vmatrix} 0 & -(N_2/N_1)\psi_l(N_1a) & \psi_l(N_2a) & \zeta_l(N_2a) \\ 0 & -\psi'_l(N_1a) & \psi'_l(N_2a) & \zeta'_l(N_2a) \\ -N_2\zeta_l(v) & 0 & \psi_l(N_2v) & \zeta_l(N_2v) \\ -\zeta'_l(v) & 0 & \psi'_l(N_2v) & \zeta'_l(N_2v) \end{vmatrix} \\
 b_l = i & \begin{vmatrix} 0 & -(N_2/N_1)\psi'_l(N_1a) & \psi'_l(N_2a) & \zeta'_l(N_2a) \\ 0 & -\psi_l(N_1a) & \psi_l(N_2a) & \zeta_l(N_2a) \\ N_2\psi'_l(v) & 0 & \psi'_l(N_2v) & \zeta'_l(N_2v) \\ \psi_l(v) & 0 & \psi_l(N_2v) & \zeta_l(N_2v) \end{vmatrix} \\
 & \begin{vmatrix} 0 & -(N_2/N_1)\psi'_l(N_1a) & \psi'_l(N_2a) & \zeta'_l(N_2a) \\ 0 & -\psi_l(N_1a) & \psi_l(N_2a) & \zeta_l(N_2a) \\ -N_2\zeta'_l(v) & 0 & \psi'_l(N_2v) & \zeta'_l(N_2v) \\ -\zeta_l(v) & 0 & \psi_l(N_2v) & \zeta_l(N_2v) \end{vmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

где часть обозначений близка к (1.3), $N_{1,2} = m_{1,2}/m_3$ – нормированные на показатель преломления прозрачной матрицы значения комплексных показателей преломления ядра и оболочка (которая в принципе может быть прозрачной), но появляются новые характеристики, не описанные ранее, например радиус ядра, умноженный на волновое число света в среде с показателем преломления матрицы $m_3(a)$.

Пакет прикладных программ в целом напоминает структуру [25, 35] программы для вычисления оптических характеристик чистых наночастиц металлов. Также для реализации (4.1) сформированы подпрограммы [25, 131], что обеспечивает стабильность работы схемы расчета.

Программа создавалась для оценки оптических характеристик наночастиц в том числе, покрытые оболочкой их другого материала. Основные исследования выполнены для системы PETN с наночастицами алюминия и никеля. Нас интересуют в первую очередь результаты с наночастицами алюминия, как наиболее реальными составляющими капсулей.

Вслед за нашей работой [132] рассчитаем факторы эффективности поглощения различных наночастиц алюминия в воде (прозрачной матрицы с показателем преломления 1,33) при варьировании радиуса наночастиц и различных соотношениях массы ядра и всей наночастицы. Достаточно очевидно, что максимальное значение массовой концентрации – 100 %, когда оксидная оболочка отсутствует, кроме этого с шагом 20 % проведем моделирование оптических свойств наночастиц алюминия с различными массовыми долями. Результаты расчетов приведены на рисунке 4.1 [132].

При начальных радиусах наночастиц факторы эффективности поглощения возрастают с увеличением радиуса до абсолютного максимума, при дальнейшем увеличении радиуса зависимость $Q_{abs}(R)$ становится осциллирующей с общей тенденцией к понижению, что в целом подобно для систем прозрачная матрица-включения чистых наночастиц [39-43, 68, 80]. Следовательно, в этих системах также можно выделить характерный радиус наночастицы (R_m), имеющей максимальное в данных условиях значение фактора Q_{abs} . Однако есть и различия: для чистых наночастиц имеется только одна геометрическая характеристика – радиус, а вот наличие оболочки приводит к появлению сразу двух геометрических характеристик: не только радиус всей наночастицы, но и отдельно - радиус ядра. На рисунке 4.1 радиус всей наночастицы (включая оксидную оболочку) обозначен как R . В связи с двумя радиусами для каждой длины волны, матрицы и массовой

концентрации металла в наночастице использованы два радиуса r_m (ядра) и R_m (наночастицы), соответствующие максимальному в данных условиях значению оптических характеристик.

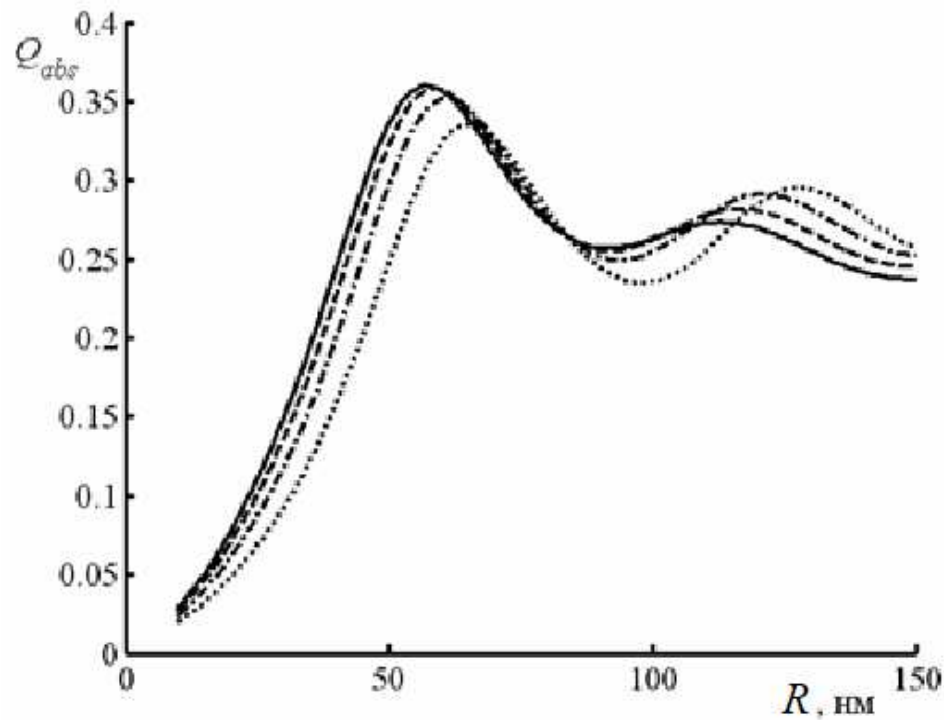


Рисунок 4.1 – Рассчитанные зависимости факторов эффективности поглощения, наночастиц алюминия от радиуса при массовой доле ядра 100% (сплошная линия), 80% (пунктирная линия), 60% (штрих-пунктирная линия) и 40% (мелкий пунктир) [132].

Максимальные значения факторов эффективности процессов поглощения и рассеяния света наночастицами с оболочкой обозначим $Q_{a\ m}$ и $Q_{s\ m}$, соответственно. В целом, зависимости $Q_{abs}(R)$ практически одинаковые, незначительное снижение амплитуды зависимостей с увеличением массовой доли металла в наночастице и увеличение при этом R_m . Это связано с двумя взаимно противоположно действующими эффектами: уменьшение Q_{abs} наночастицы при уменьшении массовой концентрации металла приводит к появлению прозрачной оболочки с большим показателем преломления, помещение наночастицы

алюминия в среду с большим показателем преломления приводит к увеличению Q_{abs} и уменьшению R_m .

Результаты расчетов $Q_{abs}(R)$ наночастиц алюминия с варьированием массовой доли металлического ядра в водной среде на длине волны второй гармонике неодимового лазера (532 нм) представлены на рисунке 4.1 и таблице 4.1 [132]. Расчеты проведены при следующих значениях показателей преломления: алюминий 0,8842-6,47i [109], оксид алюминия 1,771 [110], вода 1,337 [110].

Таблица 4.1 – Коэффициенты эффективности поглощения наночастицы Al (ядро)/Al₂O₃ (оболочка) в воде при различных значениях массовой доли металла

R , нм	Q_{abs}						
	$w=100\%$	$w=80\%$	$w=60\%$	$w=40\%$	$w=30\%$	$w=20\%$	$w=10\%$
20	0,07749	0,070481	0,061231	0,048437	0,03999	0,029551	0,016431
40	0,24499	0,227	0,20025	0,15892	0,12991	0,093399	0,048606
60	0,35713	0,35764	0,35164	0,32406	0,28896	0,22432	0,11837
80	0,27351	0,27549	0,278	0,28169	0,28311	0,27604	0,20893
100	0,26281	0,26183	0,25464	0,23559	0,22189	0,21019	0,20132
120	0,26965	0,28074	0,29117	0,28514	0,25996	0,21167	0,16704
140	0,2419	0,25119	0,2625	0,27704	0,28344	0,26615	0,17216
160	0,23979	0,25136	0,25941	0,25253	0,24505	0,24416	0,20273
180	0,2388	0,25895	0,28432	0,29704	0,27351	0,22627	0,19623
200	0,22519	0,24268	0,26332	0,28737	0,29951	0,26811	0,17231
220	0,225	0,24797	0,27162	0,27066	0,26089	0,25903	0,1701
240	0,22285	0,25157	0,29038	0,31996	0,28981	0,22774	0,17816
260	0,21496	0,24115	0,27012	0,29441	0,3075	0,25545	0,1641
280	0,2152	0,24921	0,28988	0,2875	0,26239	0,25151	0,14831
300	0,21303	0,25	0,29783	0,33779	0,29756	0,21418	0,14859

Сплошной линией на рисунке 4.1 представлена рассчитанная функция $Q_{abs}(R)$ для чистой наночастицы алюминия без оксидной оболочки, далее пунктир определяет эту зависимость при соотношении массы ядра к массе оболочки 4:1,

штрих-пунктирной линией при соотношении 3:2 и мелким пунктиром 2:3. По причине большей плотности оксида и его положения на поверхности образца даже в последнем случае толщина оболочки составляет всего 20% от радиуса наночастицы, кроме того выше показан компенсирующий эффект увеличения Q_{abs} в связи с большим показателем преломления оболочки по сравнению с матрицей (вода).

Расчёт $Q_{abs}(R)$ чистой наночастицы без оболочки позволяет сравнить результаты, полученные в работе с ранее опубликованными данными [48], где исследовались оптические свойства только чистых наночастиц. Величина и положение максимума Q_{abs} позволяет сделать вывод о корректной работе в данном вопросе использованного алгоритма расчета и созданного пакета прикладных программ.

Кроме визуализированных данных полезно использовать цифровые данные. В таблице 4.1 представлены как данные рисунка 4.1, так и дополнительные, не вошедшие на рисунок данные [132]. Значения радиусов дополнены относительно большими наночастицами со следующими радиусами: 160, 180, 200, 220, 240, 260, 280 и 300 нм. Кроме того, расчеты проведены при дополнительных значениях массовой доли ядра в 30 % от массы наночастицы, а также при 20% и 10%, что позволяет приблизиться к пониманию экспериментальных данных. Как было сказано выше при 20 % массовой доли оксидной оболочки параметры максимума изменяются в третьем знаке, при 60% массы оболочки от наночастицы Q_{abs} максимальна несколько ниже 0,33 при радиусе 65 нм. В области больших радиусов уменьшение массовой доли металла сопровождается существенным увеличением Q_{abs} и увеличению периода их осцилляций (таблица 4.1). Следовательно, учет оксидной оболочки наночастиц в матрице с относительно небольшим показателем преломления приводит к уменьшению коэффициентов эффективности поглощения в области малых радиусов и к их увеличению в области больших.

4.2 Оптические свойства наночастиц алюминия с оксидной оболочкой в прозрачных средах

Результаты Q_{abs} наночастицы алюминия с оксидной оболочкой при выбранном соотношении радиусов ядра (r) и наночастицы (R) $r/R=0,75$ при различных показателях преломления среды (m_a): 1,45, 1,6, 1,75, 1,9 - приведены на рисунке 4.2. Использованы следующие характеристики металлического алюминия $m_i=0,98-8,03i$, и оксидной оболочки $m_a=1,754$ [110].

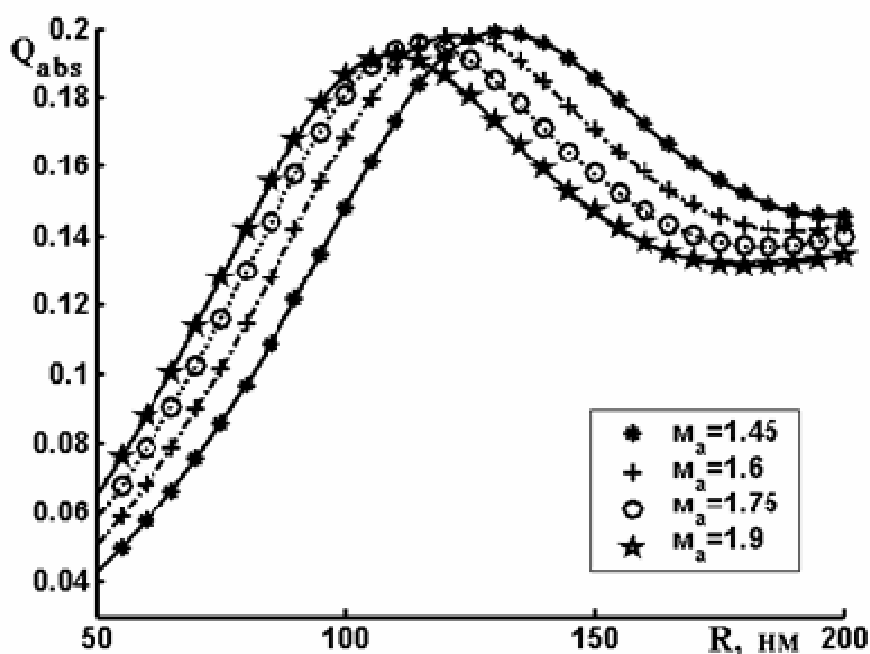


Рисунок 4.2. – Рассчитанные зависимости факторов эффективности поглощения наночастиц алюминия с оксидной оболочкой от радиуса наночастицы в матрице с показателями преломления матрицы 1,45 (сплошная кривая и снежинки), 1,6 (штрих пунктир и +), 1,75 (пунктир и кружки), 1,9 (сплошная кривая и звездочки).

Рассчитанные при различных значениях показателя преломления прозрачной матрицы (m_a) максимумы Q_{abs} ($Q_{a\ m}$) и радиусы наночастицы, при которых они наблюдаются (R_m) приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Максимальные значения фактора эффективности поглощения Q_{abs} ($Q_{a\ m}$) и соответствующего радиуса (R_m), наночастицы алюминия с оксидной оболочкой толщины в 25 % от R в прозрачных матрицах с различными показателями преломления среды (m_a).

m_a	$Q_{a\ m}$	R_m , нм
1,45	0,1994	139
1,6	0,1990	128,2
1,75	0,1974	119,8
1,9	0,1946	113,2

Исходя из полученных данных (таблица 4.2), делаем вывод, что с увеличением показателя преломления матрицы максимальные значения коэффициентов эффективности поглощения $Q_{a\ m}$ практически не изменяются, но R_m существенно уменьшается.

В тоже время для каждого радиуса наночастицы значения Q_{abs} существенно зависят от показателя преломления среды. Для наночастиц с радиусом менее 110 нм с увеличением показателя преломления среды Q_{abs} существенно увеличивается. Так для показателя преломления матрицы 1,45 $R=70$ нм а $Q_{abs}=0,075$, для показателя преломления матрицы 1,6 $Q_{abs}=0,092$, $m_a=1,75$ $Q_{abs}=0,105$, $m_a=1,9$ $Q_{abs}=0,164$, в используемом диапазоне m_a от 1,45 до 1,9 Q_{abs} увеличивается более чем в 2,2 раза. В тоже время для относительно больших наночастиц с радиусом более 120 нм наблюдается обратная зависимость: с увеличением показателя преломления среды Q_{abs} уменьшается. Результаты расчетов факторов эффективности поглощения Q_{abs} и рассеяния Q_{sca} излучения основной гармоники неодимового лазера наночастицами алюминия радиуса (R) в матрице с $m_a = 1,54$ и различными массовыми долями алюминия в наночастице приведены на рисунках 4.3а и 4.3б.

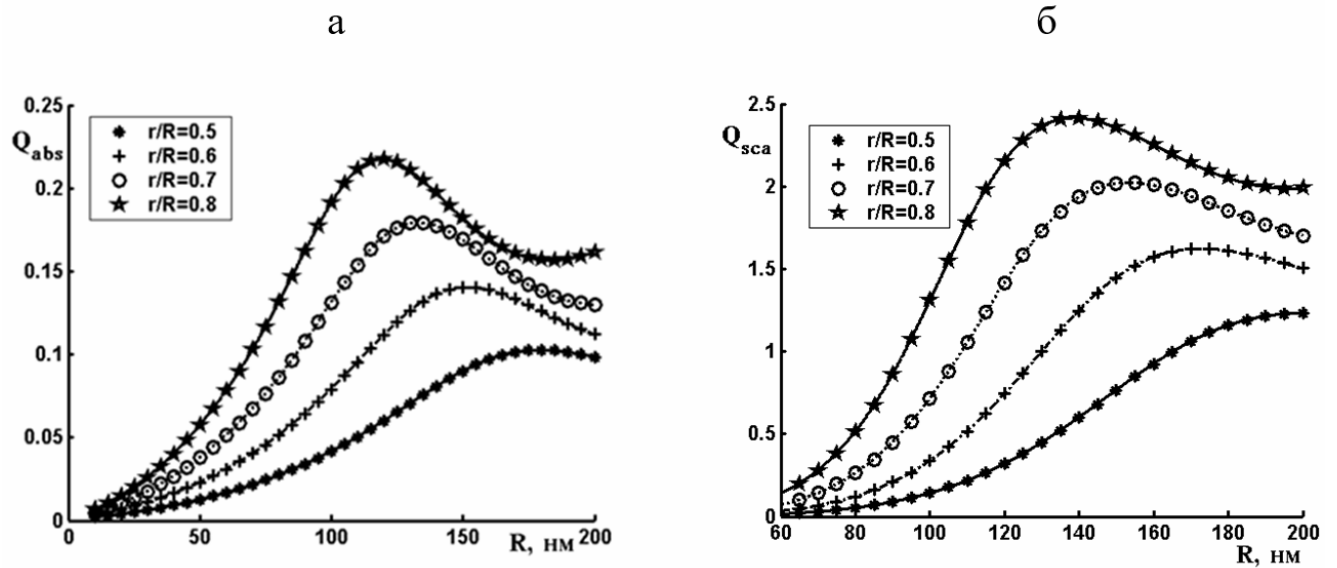


Рисунок 4.3. Рассчитанные зависимости Q_{abs} (а) и Q_{sca} (б) от R наночастиц алюминия в PETN при фиксированных соотношениях радиусов металлического ядра и всей частицы, приведенных в легенде.

С увеличением отношения радиусов коэффициенты эффективности как поглощения, так и рассеяния наночастиц в PETN значительно увеличиваются. Из этих данных были рассчитаны максимальные значения функции $Q_{abs}(R)$ (названы $Q_{a\ m}$) и $Q_{sca}(R) - (Q_{s\ m})$, приведенные на рисунке 4.4 (а и б). Существование выраженных зависимостей с увеличением в три раза $Q_{a\ m}$ и почти в два раза $Q_{s\ m}$ при относительном увеличении металлического ядра наночастицы в два раза позволяет сделать вывод, что с увеличением радиуса ядра амплитуды факторов эффективности поглощения и рассеяния существенно увеличиваются.

Рассмотрим, как влияет толщина оксидной оболочки (L) на оптические характеристики наночастиц, в том числе помещенных в различные матрицы с существенно различными показателями преломления [133]. В случае равенства показателей преломления матрицы и оксида алюминия (примерно 1,75) естественно ожидать отсутствия данной зависимости (от толщины оболочки), так как в нашем рассмотрении толщина матрицы не ограничена.

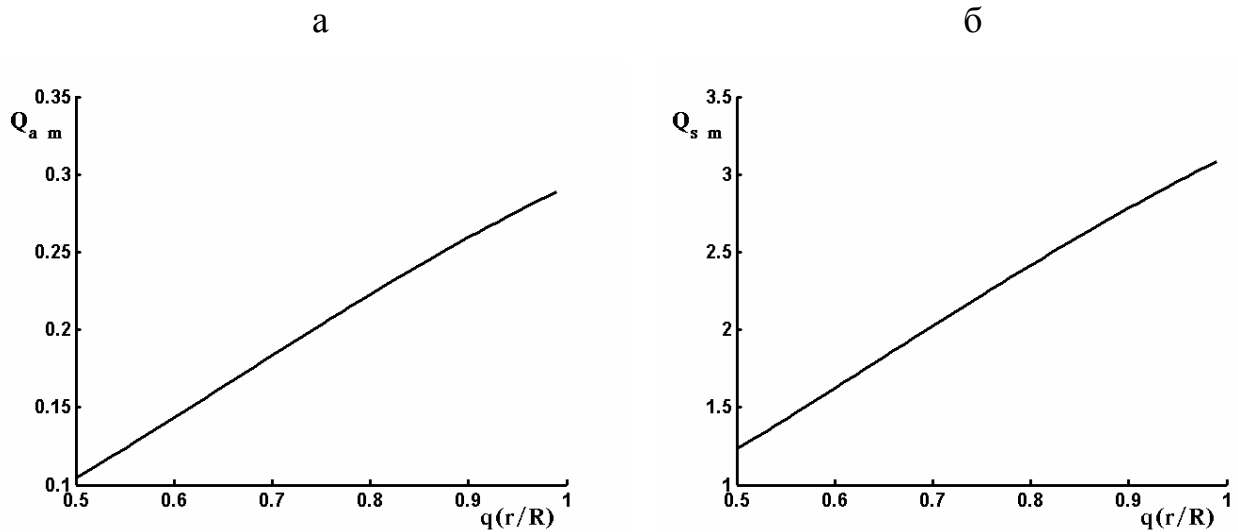


Рисунок 4.4. – Рассчитанные зависимости амплитуд факторов эффективности поглощения (а) и рассеяния (б) наночастиц алюминия в матрице с $m_a = 1,54$ от нормированной на радиус наночастицы радиус металлического алюминия.

На рисунке 4.5а приведены эти зависимости, рассчитаны Q_{abs} (факторы эффективности поглощения) излучения наночастицами алюминия с ограниченным радиусом ядра (75 нм) и варьированием толщины оболочки от 0 нм (отсутствует оболочка) до 70 нм в матрицах с $m_a = 1,33$ (сплошная линия), 1,54 (пунктир), 1,75 штрих пунктир и 2 (жирная сплошная).

Вопреки физическому смыслу фактор эффективности поглощения (как и остальные оптические свойства наночастицы) уменьшаются при увеличении толщины оксидной оболочки, в том числе и при показателе преломления матрицы 1,75 (почти как у оболочки) [134]. Причина кроется в том, что фактор эффективности поглощения рассчитывается на сечение (площадь поглощения направленного пучка) всей наночастицы (πR^2), а не на сечение реально поглощающего ядра. Сечение поглощения наночастицы (S_p), естественно не зависит от формы представления (4.4):

$$S_n = Q_a \cdot \pi R^2 = Q_{ar} \cdot \pi r^2 \quad (4.4)$$

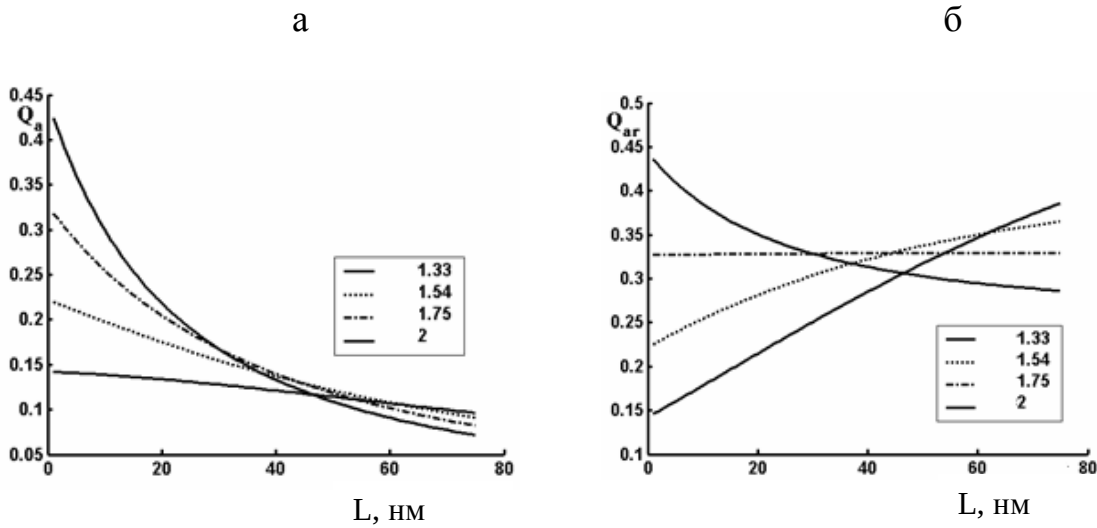


Рисунок 4.5 – Рассчитанные зависимости факторов эффективности поглощения, в расчете на наночастицу (а) и ядро наночастицы (б) от толщины оксидной оболочки (L).

Поэтому фактор эффективности поглощения ядра можно определить выражением:

$$Q_{ar} = \frac{Q_a \cdot R^2}{r^2} \quad (4.2)$$

Мы дополнили программу [131] фрагментом:

```
Q_a1(ni)=Q_abs1(ni)*(r+ h)^2/r^2;
```

На рисунке 4.5б представлена зависимость Q_{abs} металлического ядра, рассчитанного по уравнению (4.2) от толщины оксидной оболочки (L) при различных показателях преломления матрицы (1,33, 1,54, 1,75, 2). В данной форме представления результатов мы получаем естественные результаты: коэффициенты эффективности поглощения при показателях преломления матрицы меньших, чем показатель преломления оксидной оболочки, увеличиваются, так при $m_a=1,33$, Q_{ar} 0,14-0,38, при $m_a=1,54$, Q_{ar} 0,22-0,36. При показателе преломления матрицы $m_a=2$ больше, чем показатель преломления оксидной оболочки, наоборот, наблюдается уменьшение коэффициента эффективности поглощения Q_{ar} в

интервале от 0,44 до 0,29. Следовательно, на Q_{abs} металлического ядра (при одинаковых показателях преломления матрицы и оксидной оболочки) толщина оксидной оболочки не влияет [134]. На рисунке 4.5б это штрихпунктирная линия с показателем преломления матрицы 1,75. В связи с этим, для наночастиц со структурой поглощающее ядро - прозрачная оболочка рационально ввести фактор эффективности поглощения ядра (Q_{ar}) наночастицы.

4.3 Факторы эффективности поглощения окисленных наночастиц алюминия

В заключении рассчитаем Q_{abs} наночастиц алюминия (со структурой металлическое ядро – оболочка из оксида алюминия) в привычном представлении [131-135]. Результаты представлены на рисунке 4.6. С уменьшением массовой доли металла фактор эффективности поглощения наночастицы существенно уменьшается, как и в работе [48]. Но в работе [48] уменьшение фактора эффективности поглощения наночастицы (в 4 раза), только на качественном уровне определяет экспериментальное увеличение критической плотности энергии в 12,5 раз при варьировании ω от 74 до 13 %.

Значения факторов эффективности для наночастиц с массовой долей металла 13 % (минимальное значение в эксперименте [48]) и радиусами от 50 до 90 нм с шагом в 10 нм составили величины 0,02, 0,028, 0,036, 0,046 и 0,0575, соответственно. Для наночастиц с массовой долей металла 74 % (максимальные значения [48]) величины факторов эффективности поглощения излучения наночастицами с исследованными значениями радиусов (от 50 до 90 нм) соответственно составили 0,092, 0,126, 0,165, 0,206 и 0,243. Увеличение фактора эффективности поглощения наночастиц с увеличением массовой долей с 13 % до 74 % и исследованными радиусами составили величины 4,73, 4,83, 4,87, 4,81 и 4,56, соответственно, вначале немного увеличиваясь, потом незначительно уменьшаясь, оставаясь существенно менее 12,5 (экспериментальное увеличение порога инициирования).

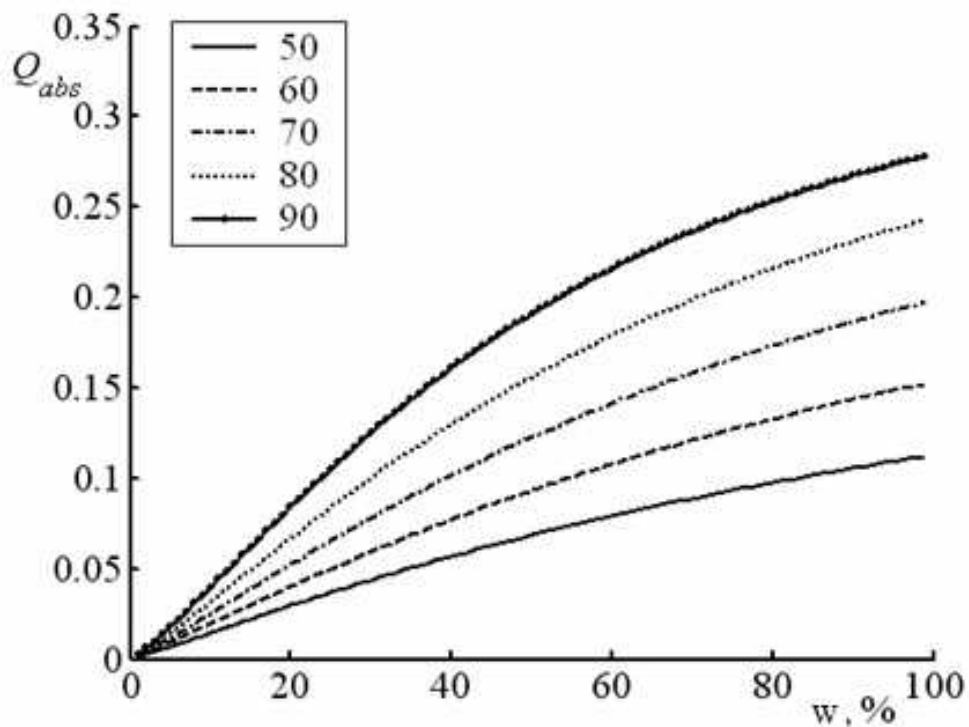


Рисунок 4.6 – Рассчитанные зависимости Q_{abs} наночастиц алюминия со структурой ядро-оболочка от массовой доли металла (w).

Поэтому, для количественного объяснения экспериментальной зависимости порога инициирования от массовой доли (толщины оксидной оболочки) недостаточно учитывать изменение Q_{abs} . Необходимо оценить изменение критической плотности энергии при значении фактора эффективности поглощения 1 из-за ухудшения условий нагревания металлическим ядром наночастицы матрицы PETN вследствие задержки тепла и необходимости нагревания непоглощающей инертной оболочки оксида алюминия.

4.4 Выводы

1. Разработана, апробирована и зарегистрирована в Российском реестре программа для ЭВМ, рассчитывающая оптические характеристики наночастиц (со структурой ядро-оболочка).

2. Исследованные свойства наночастиц алюминия со структурой ядро (метал) –оболочка (оксид) существенно зависят от длины волны излучения радиуса ядра, оболочки, показателя преломления матрицы.

3. Для наночастиц структуры поглощающее ядро - прозрачная оболочка рационально ввести фактор эффективности поглощения ядра наночастицы.

4. Для количественного объяснения экспериментальной зависимости порога инициирования PETN от массовой доли алюминия в сенсibiliзирующей наночастице недостаточно учитывать изменение Q_{abs} .

5. Необходимо модернизировать модель теплового взрыва в микроочаговом варианте учетом ухудшения условий передачи тепла от разогретого лазерным излучением металлического ядра наночастицы в матрицу PETN вследствие задержки тепла и необходимости нагревания непоглощающей инертной оболочкой.

ГЛАВА 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИНИЦИИРОВАНИЯ ВЗРЫВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ PETN С НАНОЧАСИЦАМИ МЕТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ “ЯДРО-ОБОЛОЧКА” ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

Выше показана необходимость количественно оценить изменение критической плотности энергии из-за несколько других условий нагревания лабильной матрицы PETN, для чего модернизировать кинетическую модель теплового взрыва в микроочаговом варианте, провести ее численный и аналитический анализ и сравнение с экспериментом.

5.1 Кинетическая модель лазерного импульсного инициирования взрывного разложения композитов ВВ, содержащих наночастицы со структурой «ядро-оболочка»

В случае нанокompозитов PETN, одержащих наночастицы алюминия типа ядро-оболочка, свет, падающий на образец, многократно отражается на границах зерен и наночастиц. Из-за хаотичности отражения освещенность по направлениям усредняется. Это позволяет считать включения сферическими и пользоваться при расчетах сферической системой. Как и в предыдущем случае в модели учитываются такие процессы нагрева наночастицы лазерным импульсом, отвод тепла в ВВ, его разогрев и инициирование химической реакции разложения ВВ [136-137] (5.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k_0 \frac{nQ}{c} \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) & x > R & \quad ((1)) \\ \frac{\partial n}{\partial t} &= -k_0 n \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) & x > R & \end{aligned}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_0 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad r < x < R$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_M \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad x < r$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad n=0, \quad x < R$$

с условием на границе ядро – оболочка (5.2):

$$J - c_M \alpha_M \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{(x \rightarrow r-0)} + c_0 \alpha_0 \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow r} = 0 \quad (5.2)$$

В уравнениях (5.1 - 5.2) используются обозначения (2.1) и (2.2) а также α_o - коэффициент температуропроводности оксидной оболочки, c_o - объемная теплоемкость оксидной оболочки.

Для расчётов были использованы параметры, представленные во второй главе настоящей работы, выражение для J аналогичное условию (2.3).

В настоящей работе PETN нагревается за счет сенсбилизации наночастицами ядро-оболочка. В связи с этим на границе наночастица - оболочка (при $x=R$) возникает граничное условием второго рода, отличное от базового варианта микроочаговой модели (5.3):

$$-c_0 \alpha_0 \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{(x \rightarrow R-0)} + c \alpha \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{(x \rightarrow R+0)} = 0 \quad (5.3)$$

Свяжем параметры, которые характеризуют экспериментальные образцы (массовая доля) с параметрами микроочаговой модели (радиус ядра r и радиус всей наночастицы R). Массу металлического ядра в наночастице и массу оксидной оболочки рассчитывают по выражениям (5.4-5.5):

$$m_{Al} = \rho_{Al} \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 \quad (5.4)$$

$$m_{Al_2O_3} = \rho_{Al_2O_3} \cdot \frac{4}{3} \pi (R^3 - r^3), \quad (5.5)$$

где ρ_{Al} – плотность алюминия, $\rho_{Al_2O_3}$ – плотность оксидной оболочки, R – радиус всей наночастицы, r – радиус металлического ядра наночастицы. Радиус металлического ядра (r) можно представить по выражению $r=qR$. Масса всей наночастицы рассчитывается как сумма масс металлического ядра и оксидной оболочки, а массовая доля металлического алюминия, как отношение масс металлического ядра и наночастицы (5.6):

$$-c_m \alpha_m \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{(x \rightarrow r-0)} + c_o \alpha_o \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{(x \rightarrow r+0)} = 0 \quad (5.6)$$

Одной из задач анализа модели является определение радиуса наночастицы, которая нагревается под действием импульса до максимальной температуры без учета разложения матрицы. Если величину $\sqrt{\frac{3c}{c_1}}$ обозначить K , то выражение (3.4) примет вид $R_m = Kh$, а выражение для (3.2) для значения максимальной температуры разогрева примет вид (5.7):

$$\begin{aligned} \partial T &= \frac{\pi R H}{\frac{4}{3} \pi c_1 R^2 + 4 \pi (R h + h^2)} = \\ &= \frac{\pi K h H}{\frac{4}{3} \pi \frac{3c}{K^2} h^2 K^2 + 4 \pi (h K h + h^2)} = \frac{K h H}{\frac{4}{3} \frac{3c}{K^2} h^2 K^2 + 4 c (h K h + h^2)} = \frac{K h H}{4 c h^2 + 4 c (h K h + h^2)} = \frac{K H}{4 c h + 4 c (h K + h)} = \\ &= \frac{K H}{4 c h (1 + K + 1)} = \frac{K H}{4 c h (K + 2)} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Был проведен подобный анализ модели на случай наличия у наночастицы оксидной оболочки. Для определения максимальной температуры разогрева наночастицы радиуса R алюминия с наличием оксидной оболочки толщины $(R - r)$, где радиус ядра r , h – толщина прогретого слоя PETN используем выражение $R = r \cdot Z$, тогда аналогичное (5.6) выражение для максимальной температуры разогрева примет вид (5.8):

$$\Delta T = \frac{Q}{c} = \frac{H \cdot \pi r^2}{c_A \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 + c_o \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 (Z^3 - 1) + c_m 4 \pi Z^2 r^2 h + 4 \pi c_m h^2 Z r}$$

$$\Delta T' = 0$$

$$\left(\frac{H \cdot r^2}{r^3 \left(\frac{4}{3} c_A + \frac{4}{3} c_0 \cdot (Z^3 - 1) \right) + 4c_m Z^2 r^2 h + 4c_m h^2 Z r} \right)' = 0 \quad (5.8)$$

$$R_m = \sqrt{\frac{3c_m Z h^2}{c_A - c_0 \cdot (Z^3 - 1)}}$$

Из выражения (5.8) следует, что величина радиуса максимально разогретой за время действия импульса наночастицы (R_m) не зависит от конкретной величины плотности энергии импульса, но варьируется при изменении длительности импульса, которая опосредованно входит в выражение (5.8) через толщину разогретого слоя PETN h [102]. Поэтому были проведены расчеты зависимости максимальной температуры нагрева наночастицы в PETN от радиуса наночастицы при различных длительностях импульса. Результаты расчетов представлены на рисунке 5.1 для 14 нс) и 20 нс (результаты представлены на рисунке 5.2) при различных плотностях энергии. Отношение радиуса ядра к радиусу всей наночастицы составляло 0,75, и уже традиционный диапазон изменения радиусов наночастиц - перекрывающий значения R_m для используемых длительностей импульса. В расчетах для исключения возможности перехода реакции в самоускоряющийся режим значение константы скорости химического разложения PETN принималась равной 0.

На рисунке 5.1 приведены зависимости максимальной температуры нагрева наночастицы в PETN от радиуса наночастицы алюминия при длительностях импульса 14 нс (отношение $r/R=0,75$) (аналогично [128, 138]). Использованы 3 значения плотности энергии импульса. Так для плотности энергии равной 25 мДж/см² максимальная температура увеличивается с 437 до 604 К от радиуса 10 нм до 60 нм далее от 60 нм до 120 нм происходит уменьшение температуры до 565 К.

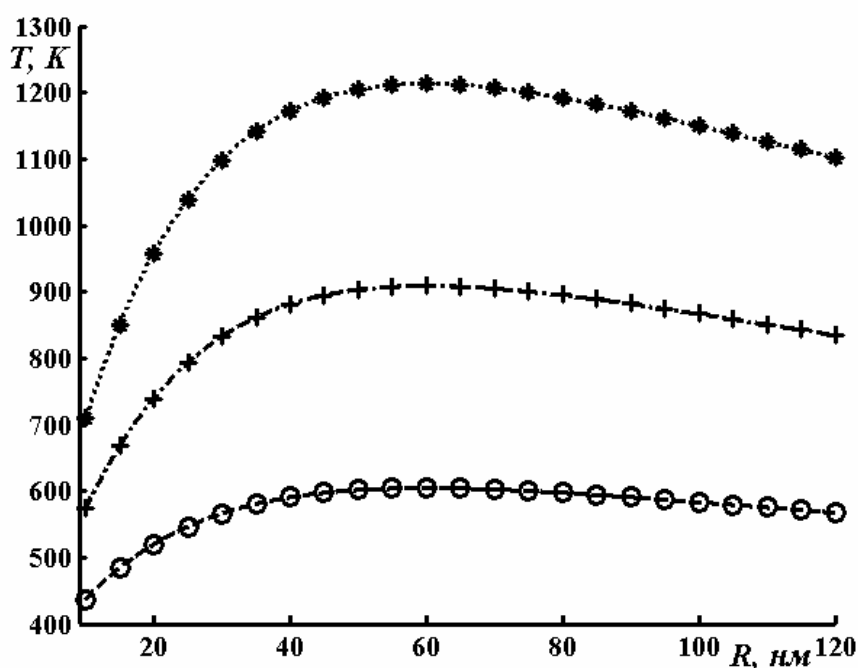


Рисунок 5.1 – Зависимость максимальной температуры нагрева наночастицы в PETN от радиуса наночастицы алюминия при отношении $r/R=0,75$ и длительностях импульса 14 нс

Максимум температуры для плотности энергии импульса 25 мДж/см^2 равен 604 К . При увеличении плотности энергии до пятидесяти мДж/см^2 температура в максимуме существенно увеличивается с 538 до 909 от радиуса 10 нм до 60 нм и далее от 60 нм до 120 нм происходит уменьшение температуры с 909 до 835 . Максимум температуры для плотности энергии 50 мДж/см^2 равен 909 К . При плотности энергии равной 75 мДж/см^2 происходит увеличение температуры с 710 до 1213 К от радиуса 10 нм до 60 нм далее от 60 нм до 120 нм уменьшение температуры с 1213 до 1102 . Максимум температуры для плотности энергии 75 мДж/см^2 равен 1213 К . При различных плотностях энергии происходит пропорциональное увеличение максимальной температуры. Максимальная температура для всех плотностей энергии достигается при радиусе частицы равном 60 нм .

На рисунке 5.2 представлены рассчитанные зависимости максимальной температуры нагрева алюминиевой наночастицы в PETN при повышенной длительности импульса (20 нс). Остальные условия расчета сохранены. Так для

плотности энергии равной 25 мДж/см^2 происходит увеличение температуры с 399 до 555 К при увеличении радиуса от 10 нм до 71,8 нм, далее максимальная температуры уменьшается до 536.

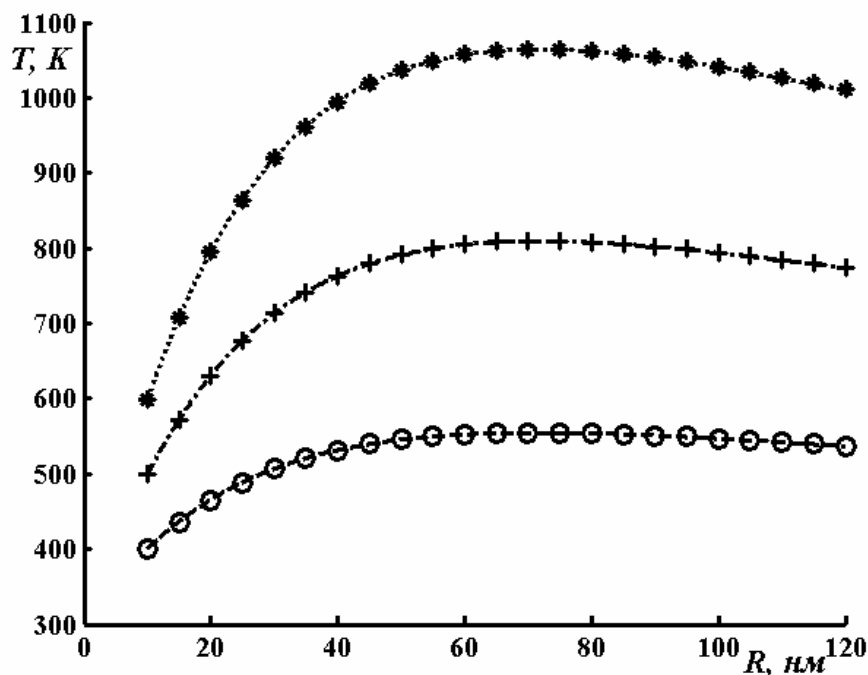


Рисунок 5.2 – Рассчитанные зависимости максимальной температуры разогрева от радиуса наночастицы в PETN при отношении $r/R=0,75$ и длительности импульса 20 нс.

Максимальное значение температуры для плотности энергии 25 мДж/см^2 составляет 555 К. При увеличении плотности энергии до пятидесяти мДж/см^2 температура увеличивается до 809 К для аналогичного радиуса 71,8 нм далее происходит уменьшение температуры до 775 К. Максимум температуры для плотности энергии пятьдесят мДж/см^2 составляет 809 К для радиуса наночастицы 71,8 нм. При плотности энергии равной 75 мДж/см^2 происходит увеличение температуры до 1064 К при радиусе 71,8 нм и далее увеличение радиуса приводит к уменьшению температуры до 1010 К. Максимум температуры для плотности энергии 75 мДж/см^2 составляет 1064 К, следовательно, максимальная температура для всех плотностей энергии достигается при одинаковом радиусе частицы

равном 71,8 нм и зависящем от длительности импульса, а не от H лазерного импульса.

5.2. Кинетические закономерности нагревания композитов PETN – наночастицы алюминия с учетом оксидной оболочки

Следующим этапом работы является исследование кинетических закономерностей температуры в композите PETN – окисленные наночастицы алюминия при варьировании как плотности энергии импульса так и геометрических параметров модели – а именно радиуса ядра и толщины оксидной оболочки. В рамках модели, записаной в виде системы дифференциальных уравнений с частными производными (5.1-5.3), рассчитаны кинетические зависимости температуры на границе PETN - наночастица. На рисунке 5.3

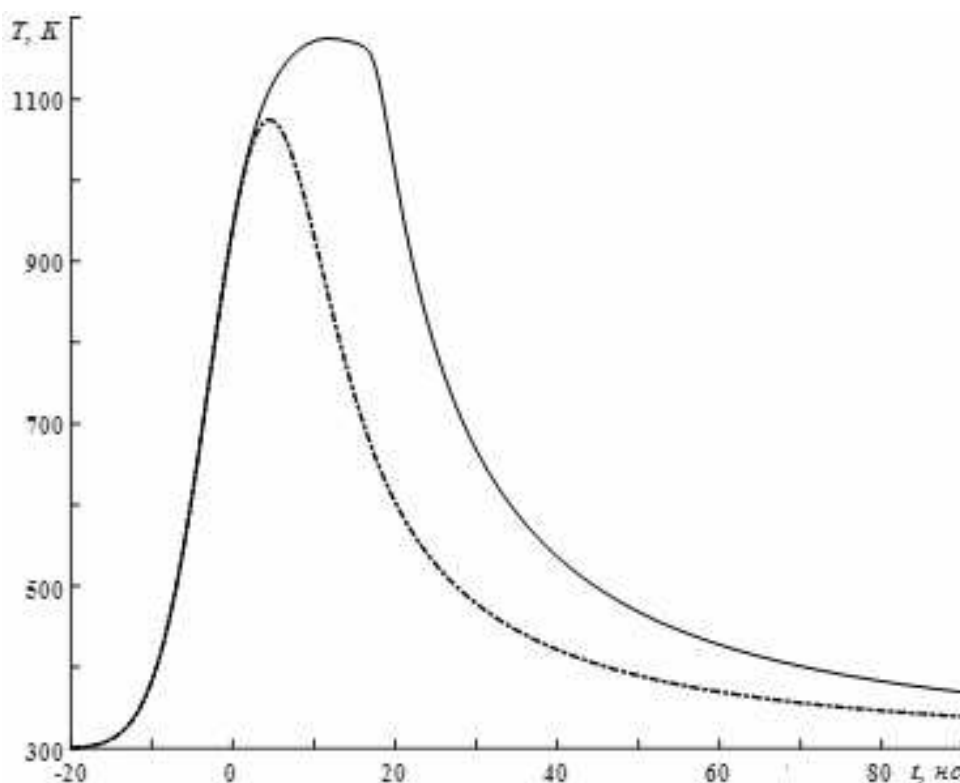


Рисунок 5.3 – Рассчитанные кинетические зависимости температуры границы наночастицы алюминия радиуса 45 нм (с оксидной оболочкой толщиной 15 нм) – PETN при импульсном нагревании, сплошная линия с учетом химического разложения PETN, пунктир – только лазерный нагрев.

представлена кинетическая зависимость температуры поверхности наночастицы алюминия (со слоем оксида) в матрице PETN (радиус ядра 30 нм; толщина оболочки 15 нм) при плотности энергии импульса $153,6 \text{ мДж/см}^2$. Пунктиром показан самопроизвольный процесс нагревания образца лазером без учета химического разложения матрицы. Первоначально температура при лазерном нагреве поднялась от 300 К до 1100 К за 8 нс, далее температура уменьшается. Слошной линией показана зависимость температуры поверхности ядра наночастицы с учетом химического разложения PETN. На начальном участке температура увеличивается индентично при нагревании лазером до 1200 К, но далее возникает область плато от 15 нс до 22 нс, после которого, температура снижается.

На рисунке 5.4 показана зависимость максимальной температуры разогрева наночастицы от относительной энергии импульса в исследуемом композите с наночастицей алюминия радиуса 45 нм при оксидной оболочке толщиной 15 нм. За единицу принята критическая плотность энергии импульса для композитов исследуемого состава. Первый участок температурной зависимости рисунка 5.4 линейный и совпадающий при учете и без учета химического разогрева. Линейновозрастающая зависимость продолжается практически до 1000 К, далее при лазерном нагреве прямая продолжает возрастать, а с учетом химического разложения PETN прямая резко возрастает до 1200 К. Это означает, что до относительной плотности энергии 0,85 (85 % от критической плотности энергии) химическое разложение практически не сказывается на закономерностях нагревания системы, и по расчету максимальной температуре разложения в допороговом режиме возможно оценить критическую плотность энергии (однако с относительно небольшой точностью).

Был выполнен цикл расчетов зависимостей максимальной температуры нагрева в допороговом режиме от плотности энергии импульса, радиуса, толщины оксидной оболочки при длительности импульса на полувысоте 14 нм. Нашей

задачей был анализ условий формирования очага взрывного разложения в исследуемых образцах.

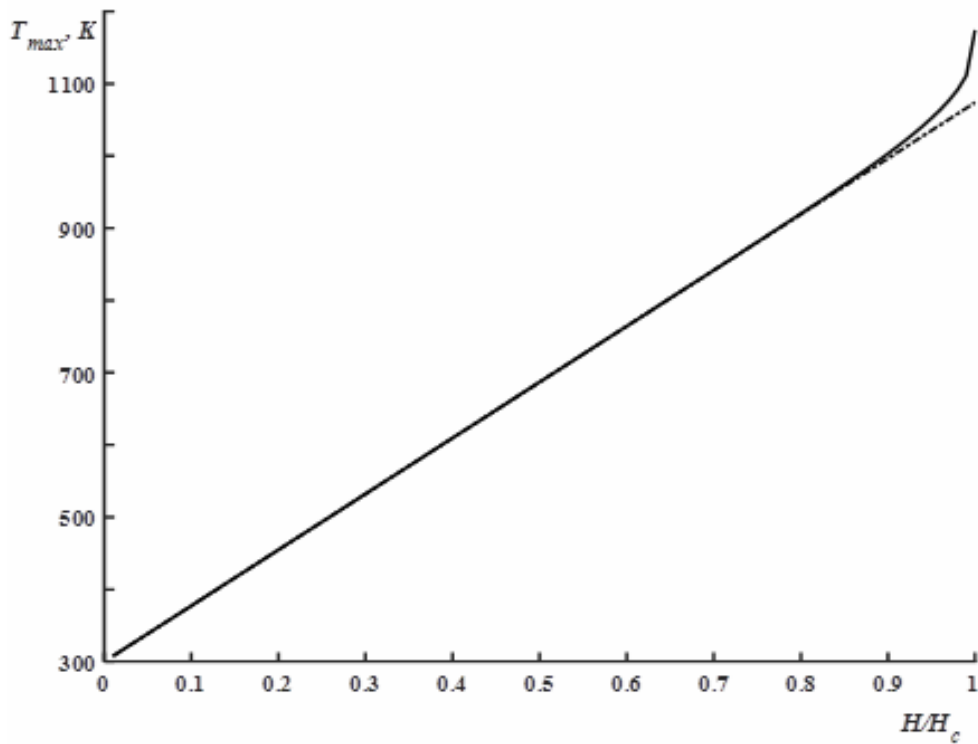


Рисунок 5.4 – Рассчитанные зависимости от относительной энергии импульса максимальной температуры наночастицы алюминия радиуса 45 нм (с оксидной оболочкой толщиной 15 нм). Сплошная линия - с учетом химического разложения PETN, пунктир - только лазерный нагрев.

На рисунке 5.5 показаны распределения температуры в различные моменты времени в наночастице радиуса 50 нм (радиус ядра алюминия 35 нм; толщина оболочки 15 нм) при плотности энергии 137 мДж/см^2 . При времени (-0,1 нс) температура в центральной ячейке составила 888,93 К, на границе ядро-оболочка составила величину 888,94 К, на границе оболочка-PETN уменьшилась до 885,37 К. При времени (0,0 нс) (максимальная мощность импульса) температура в центральной ячейке составила 898,60 К, на границе ядро-оболочка температура возрасла до 898,72 К, на границе оболочка-PETN 895,14 К, в момент времени (0,1 нс) температура в центре ядра наночастицы равна 903,42 К, на

границе ядро-оболочка температура несколько выше 903,54 К, на границе оболочка-PETN температура составляет 899,60 К.

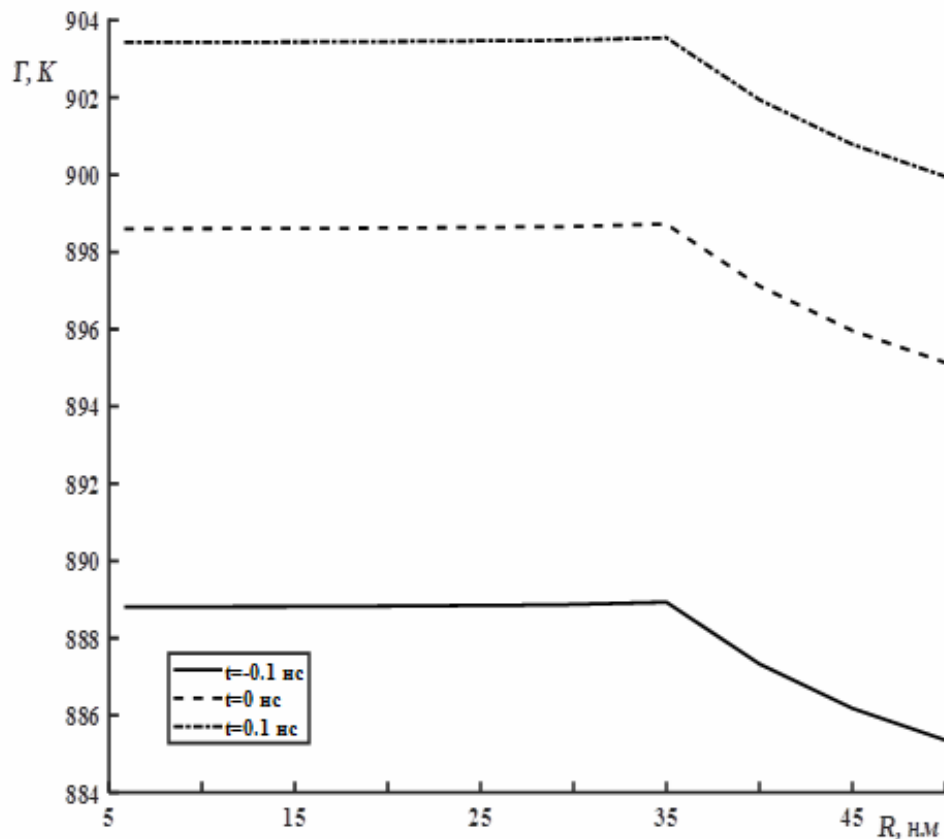


Рисунок 5.5 – Распределения температуры в различные моменты времени в наночастице радиуса 50 нм (с оксидной оболочкой толщиной 15 нм), сплошная линия при (-0,1 нс), пунктир (0 нс), пунктир с точкой (0,1 нс)

На рисунке 5.5 видно, что при нагревании температура в ядре быстро повышается и распределение температуры в ядре практически одинаковое, (распределение температуры равномерное), а на границе оболочка-PETN температура меньше, т.к. оксидная оболочка имеет существенно меньший коэффициент температуропроводности (у оксидной оболочки низкий коэффициент теплопроводности по сравнению с алюминием). Эффект особенно хорошо проявляется вблизи 0, когда плотность мощности импульса максимальная.

На рисунке 5.6 показаны распределения температуры в различные моменты времени в наночастице алюминия радиусом частицы 50 нм; радиус ядра

алюминия 35 нм; толщина оболочки 15 нм при H импульса 137 мДж/см^2 . При действии импульса в момент времени 9 нс температура ядра $1147,37 \text{ К}$, на границе ядро-оболочка несколько меньше $1146,37 \text{ К}$, а на границе оболочка-PETN составила уже $1145,17 \text{ К}$.

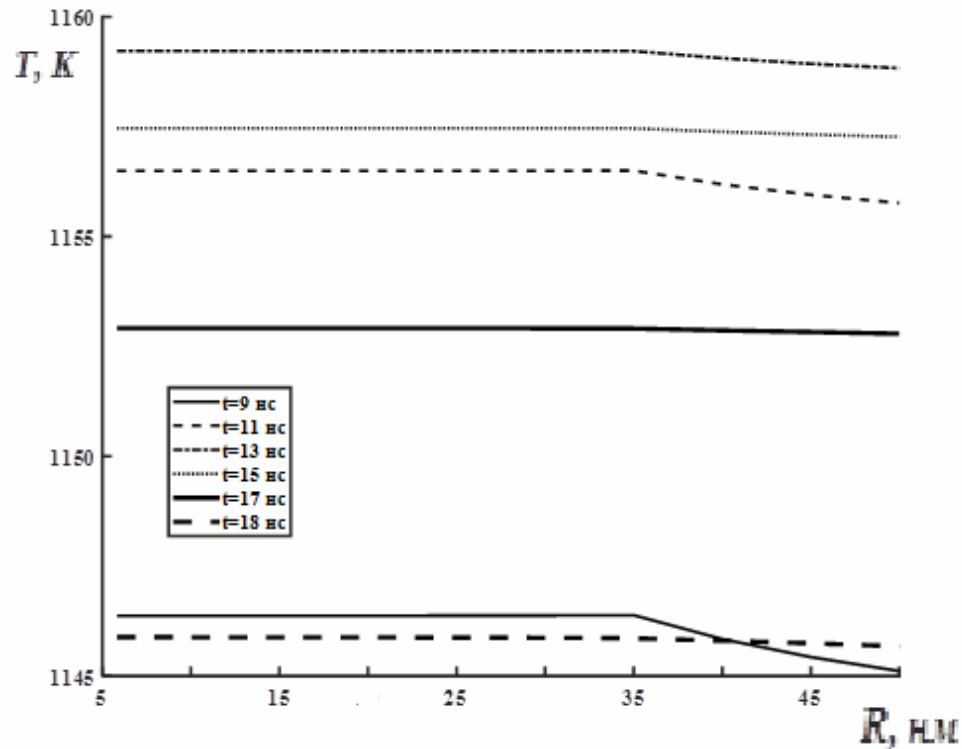


Рисунок 5.6 – Распределения температуры в различные моменты времени в наночастице радиуса 50 нм (с оксидной оболочкой толщиной 15 нм)

При уменьшении действия импульса в момент времени (11 нс) температура ядра $1156,49 \text{ К}$, на границе ядро-оболочка осталась почти такой же $1156,50 \text{ К}$, на границе оболочка-PETN уменьшилась $1155,76 \text{ К}$. При момент времени 13 нс температура в ядре $1159,22 \text{ К}$, на границе ядро-оболочка осталась такой же, на границе оболочка-PETN уменьшилась до $1158,84 \text{ К}$. В момент времени 15 нс температура в ячейке равна $1156,46 \text{ К}$, на границе ядро-оболочка составляет уже $1157,45 \text{ К}$ (увеличиваясь), на границе оболочка-PETN составила $1157,26 \text{ К}$. При достижении времени 17 нс температура в ядре уменьшилась до $1152,92 \text{ К}$, на границе ядро-оболочка температура совпадает до 2-ого знака после запятой, на границе оболочка-PETN температура составила $1152,79 \text{ К}$.

При времени (18 нс) температура в ячейке 1145,88 К, на границе ядро-оболочка температура совпадает до 2-ого знака после запятой, на границе оболочка-PETN уменьшилась до 1145,68 К.

На рисунке 5.6 видно что при моменты времени 9, 11 и 13 нс при нагревании распределение температуры в ядре и до оболочки почти одинаковая на границе оболочка-PETN температура меньше. При достижении 15, 17 и 18 нс мы видим, что распределение температуры практически выравнивается и остается практически постоянной, химическое разложение PETN практически компенсирует отток тепла за счет теплопроводности. Однако плотности энергии и как результат – температуры не хватило для перехода реакции во взрывное разложение, и как следствие начинается остывание очага.

На рисунке 5.7 представлены пространственные распределения температуры в PETN непосредственно около наночастицы (радиус 50 нм, толщина оболочки 15 нм) в промежутке времени от 9 нс до 18 нс. Плотность энергии импульса - 137 мДж/см^2 . Так же в таблице 5.1 показана интенсивность (плотность мощности) импульса в это момент времени в % от максимальной. При 9 нс времени от максимального значения импульса максимальная температура в системе 1145,1 К и ширина очага 2,7 нм (плотность мощности импульса в этот момент времени составляет всего 0,3180 % от максимальной). До 17 нс температура увеличилась до 1152,8 К и ширина очага увеличилась до 8,3 нм. При используемой длительности импульса момент времени 17 нс соответствует уже окончившемуся импульса с интенсивность менее 0,02 % от максимальной. На следующей (18) наносекунде начинается уменьшение температуры (до 1145,6 К в максимуме распределения), ширина очага также существенно уменьшилась (с 8,3 до 7,6 нм), при этом интенсивность импульса составила всего 0,01 % от максимальной.

При заданной плотности энергии с заданным радиусом взрывное разложение не произошло. Все рассчитанные данные приведены в таблице 5.1

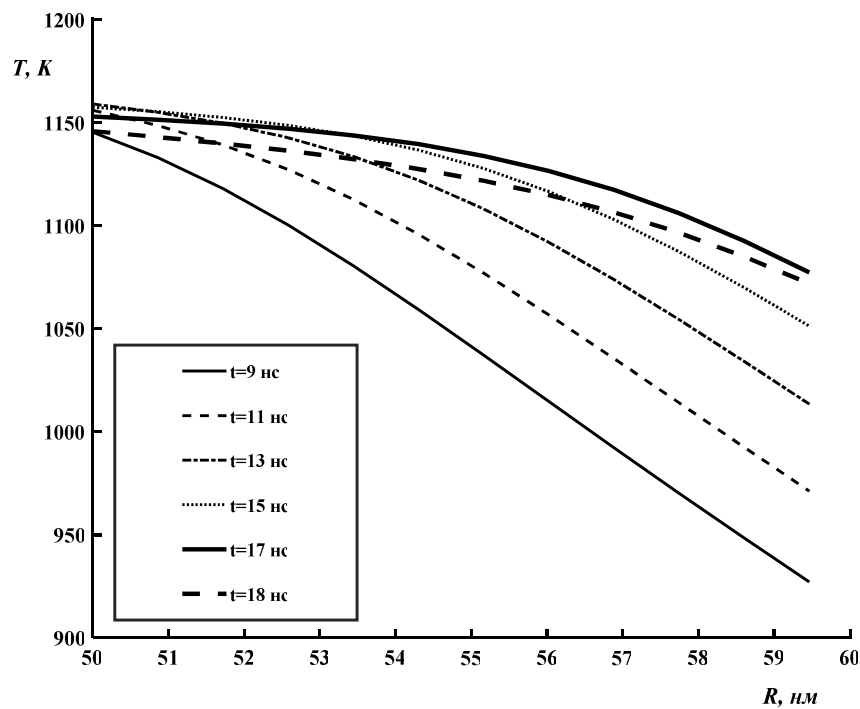


Рисунок 5.7 – Распределения температуры в PETN в различные моменты времени около наночастицы радиуса 50 нм (с оксидной оболочкой толщиной 15 нм), с учетом химического разложения PETN

Таблица 5.1

Параметры очага химической реакции в различные моменты времени после максимума интенсивности импульса

t - время, нс	плотность мощности импульса в %	Max температура, К	Ширина очага, нм
9	0,3180	1145,1	2,7
11	0,1806	1155,6	4,2
13	0,0916	1158,4	5,7
15	0,0415	1157,2	7,3
17	0,0168	1152,8	8,3
18	0,0102	1145,6	7,6

Рассчитанные пространственные распределения температуры в PETN вблизи наночастицы, полученные в результате облучения импульсом с $H =$

104 мДж/см² представлены на рисунке 5.8. Использованы наночастицы с радиусом ядра из металлического алюминия 60 нм, толщина оксидной оболочки 15 нм, временной промежуток более 9 нс. Значения плотности мощности импульса в % к максимальному значению в каждый момент времени представлены в таблице 5.1.

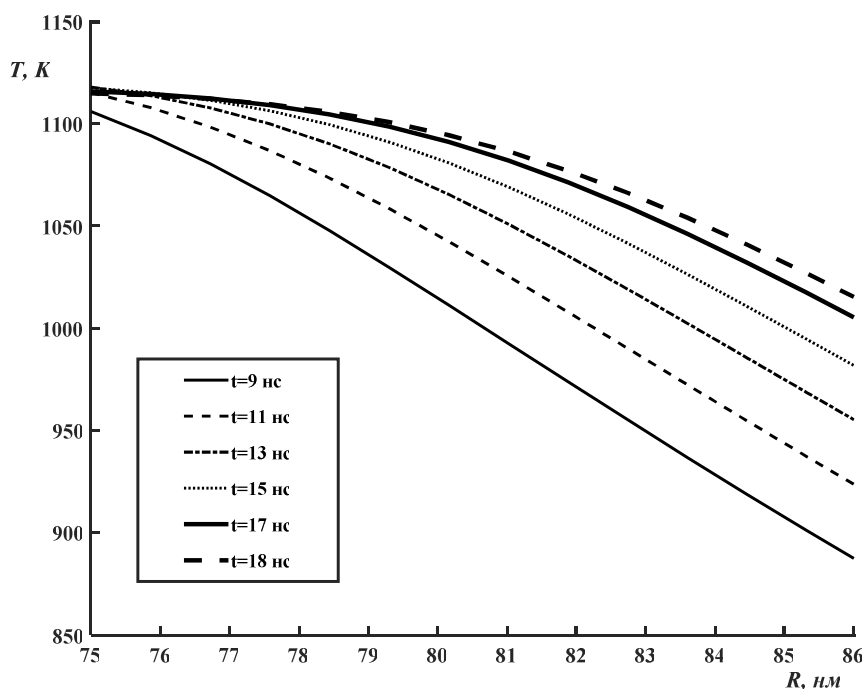


Рисунок 5.8 – Пространственные распределения температуры в образце в момент времени 9 нс (сплошная линия), 11 нс (штриховая линия), 13 нс (штрихпунктир), 15 нс (пунктир), 17 нс (сплошная толстая линия), 18 нс (штриховая толстая линия),.

При исследованных значениях плотности энергии импульса переход во взрывное разложение композитов на основе PETN не произошло. Сделаем некоторые выводы: максимальная температура в исследуемых композитах практически линейно зависит от H импульса, переход исследуемой закономерности в сверх линейное возрастание является репером близости H к H_c , где наблюдается медленное формирование очага реакции, когда медленное понижение температуры частично компенсируется увеличением ширины очага реакции.

5.3. Особенности кинетических закономерностей инициирования взрывного разложения

Рассмотрим, как изменяется температура при действии импульса на композит PETN – наночастица алюминия с оболочкой оксида алюминия с рассмотренными выше размерами, но с несколько большей плотностью энергии импульса (H_2), приводящей к инициированию взрывного разложения. Пространственные профили распределения температуры в образце при действии импульса с $H = 137 \text{ мДж/см}^2$ представлен на рисунке 5.9. Использована наночастицы радиуса 50 нм, при радиусе металлического ядра 35 нм; и толщины оксидной оболочки 15 нм. Выбран диапазон наблюдения, в котором медленно формируется очаг взрывного разложения.

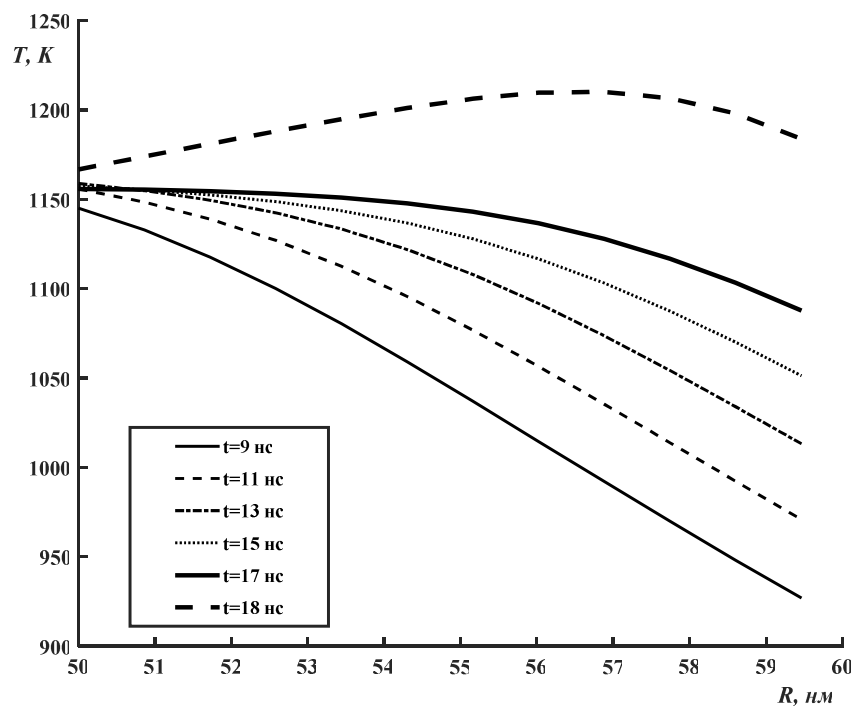


Рисунок 5.9 – Распределения температуры в PETN в различные моменты времени вблизи наночастицы радиуса 50 нм (ядро 35 нм; толщина оболочки 15 нм) в промежутки времени, указанные в легенде.

При 9 нс максимальная температура 1145,1 К и ширина очага 2,6 нм (область увеличения температуры), а интенсивность импульса в этот момент времени составляет 0,318 % от максимальной. До 17 нс температура увеличилась до 1155,8 К и ширина очага увеличилась до 8,8 нм, интенсивность импульса в момент времени уменьшился до 0,0168% от максимальной. При 18 нс происходит увеличение максимальной температуры 1170,0 К, ширина очага увеличилась до 12,5 нм, интенсивность импульса в момент времени составила 0,01 %. При заданной плотности энергии с заданным радиусом произошло взрывное разложение.

Для расчета кинетической зависимости температуры оболочки наночастицы оксида алюминия при действии импульса времени программа выглядит следующим образом:

```
for i=1:6
exp(-ki^2*tfig(i)^2)
end
```

Данные приведены в таблице 5.2

Таблица 5.2

Параметры очага взрывного разложения в различные времена после максимума интенсивности импульса

t - время, нс	Интенсивность импульса, %	Мах температура, К	Ширина очага, нм
9	0,3180	1145,1	2,6
11	0,1806	1155,6	4,1
13	0,0916	1158,6	5,6
15	0,0415	1157,3	6,5
17	0,0168	1155,8	8,8
18	0,0102	1170,0	12,5

На рисунке 5.10 приведены распределения температуры в PETN в различные моменты времени вблизи наночастицы радиуса 75 нм (ядро 50 нм; толщина оболочки 15 нм) в промежутки времени, указанные в легенде, при действии импульса с плотностью энергии $104,17 \text{ мДж/см}^2$. В моменты времени от 23 до 24 нс происходил спад температуры, но увеличение ширины разогретой области PETN, приводящее к уменьшению градиента температуры. Когда время достигло 24 нс разогрев от химического разогрева превысил отток тепла из-за теплопроводности, как следствие - началось возрастание температуры. При 24,8 нс времени от максимума мощности импульса произошел температурный скачок. При заданной плотности энергии с заданным радиусом произошло взрывное разложение.

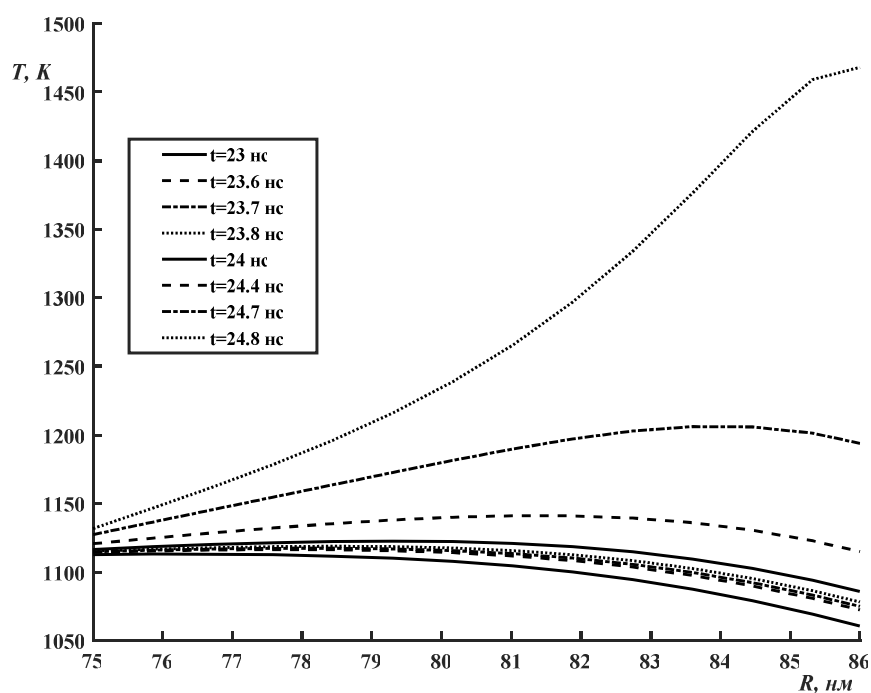


Рисунок 5.10 – Распределения температуры в PETN в различные моменты времени вблизи наночастицы радиуса 75 нм.

На рисунке 5.11 мы видим пространственные распределения температуры в образце при действии импульса с $H = 96 \text{ мДж/см}^2$. Геометрические параметры включения: $R = 100 \text{ нм}$; $r = 85 \text{ нм}$; $L = 15 \text{ нм}$. Выбранный промежуток времени соответствует формированию очага реакции. В диапазоне от 29 до 30,8 нс продолжается уменьшение температуры, при одновременном прогреве все большего слоя ВВ, что ведет к уменьшению градиента температуры и уменьшению потерь тепла на теплопроводность. Когда время от максимального импульса достигло 31 нс началось возрастание температуры. При 32 нс от максимального значения мощности импульса наблюдаем резкое увеличение температуры. При заданной плотности энергии с заданным радиусом началось взрывное разложение.

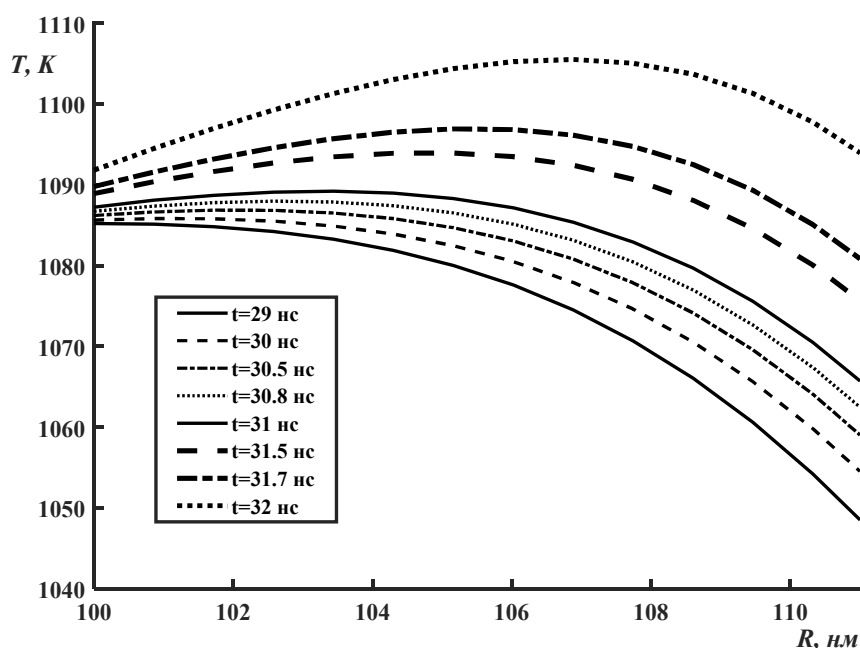


Рисунок 5.11 – Распределения температуры в PETN в различные моменты времени вблизи наночастицы радиуса 100 нм, толщина оболочки 15 нм в промежутки времени, указанные в легенде.

На рисунке 5.12 показаны зависимости нормированной концентрации PETN от плотности энергии импульса: сплошная линия в 1 ячейке, пунктирная в 5

ячейке. До относительной плотности энергии 0,7 концентрация ВВ практически не изменяется. При относительной плотности энергии 0,96 концентрация ВВ в первой ячейке (на границе наночастица – PETN) упала вдвое, произошло разложение половины исходного реагента, при это в 6 ячейке разложилось лишь 4 % исходного реагента.

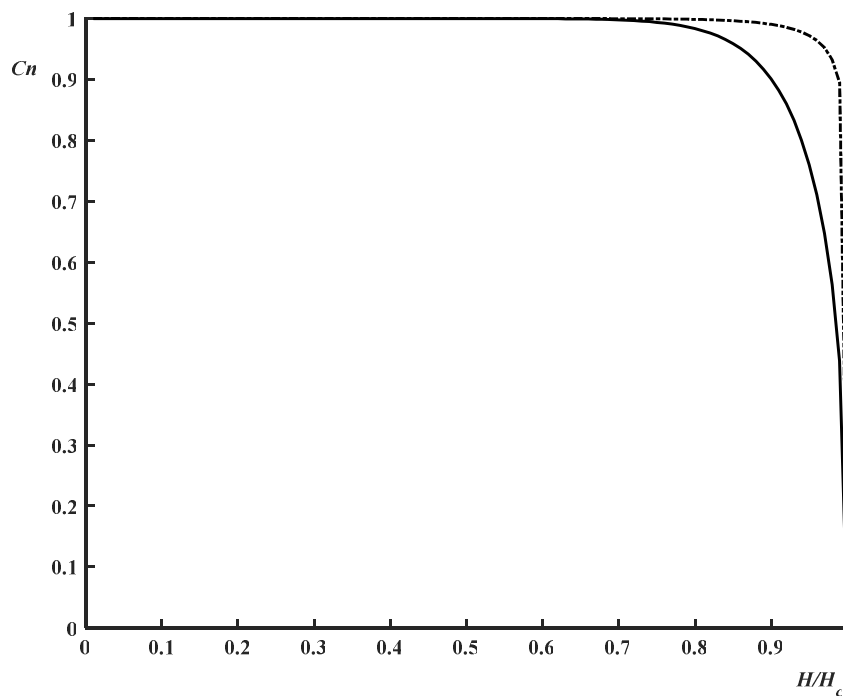


Рисунок 5.12 – Зависимость нормированной концентрации PETN от плотности энергии импульса (1 – критическая плотность, приводящая ко взрыву): сплошная линия в 1 ячейке, пунктирная в 5 ячейке.

При практически критической плотности энергии и 1 и 5 ячейки оказываются разложенными практически полностью. Разложение 80 ячейки более 90 % через 1 мкс после максимальной плотности мощности импульса является в пакете прикладных программ [115] критерием произошедшего при заданных параметрах взрывного разложения.

5.4 Расчет критических параметров инициирования взрывного разложения композитов PETN – наночастицы алюминия с учетом оксидной оболочки

Методика расчета критических параметров инициирования взрывного разложения композитов PETN – наночастицы Al с учетом оксидной оболочки аналогична описанной выше, с дополнительным учётом теплопереноса в оксидной матрице (5.1-5.3). Для расчетов была создана программа для ЭВМ. Для каждого радиуса наночастицы и толщины оксидной оболочки с хорошей точностью рассчитывалась H_c . Результаты расчет представлена на рисунке 5.13 в виде зависимостей рассчитанной в приближении геометрического сечения поглощения пороговой плотности энергии инициирования взрывного разложения композитов PETN от толщины оксидной оболочки при постоянных значениях радиуса наночастицы.

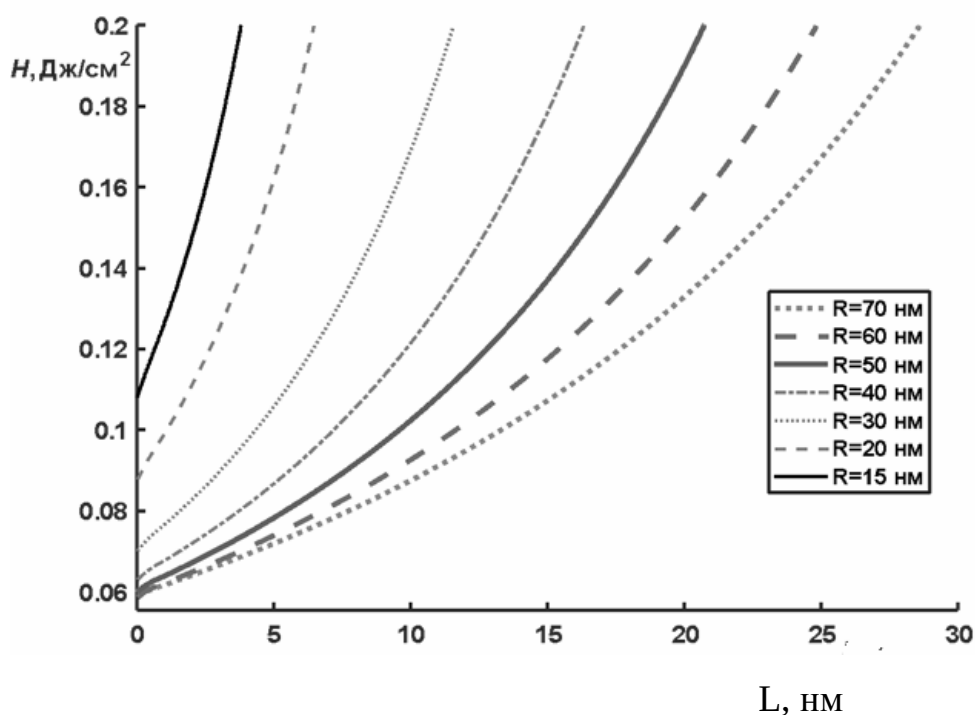


Рисунок 5.13 Рассчитанные зависимости пороговой плотности энергии инициирования композитов PETN-Al/ Al_2O_3 от толщины оболочки наночастицы. Радиусы наночастиц Al/ Al_2O_3 указаны в легенде.

Использованы результаты расчёта H_c наночастиц радиуса от 15 до 70 нм при толщинах оксидной оболочки от 10 нм до 0 нм, представленные в легенде. Зависимости однотипные: критическая плотность энергии увеличивается при всех приведенных толщинах оксидной оболочки. Так как зависимости $H_c(L)$ рисунка 5.13 возрастающие – на них не наблюдается экстремума, оптимальной толщины наночастицы с минимальной H . Если представить результаты расчета в виде функциональной зависимости $H_c(R)$, как это сделано на рисунке 5.14, мы получим экстремальные функции. Поэтому, особенностью рассматриваемой величины является выраженное значение оптимального радиуса наночастицы, соответствующая координатам минимума $H_c(R)$. На рисунке 5.14 представлены рассчитанные зависимости H_c PETN от радиуса сенсibiliзирующих наночастиц при различных толщинах оксидной оболочки. Зависимости однотипные: вначале от 15 нм до R_m критическая плотность энергии уменьшается, достигает минимума и далее – увеличивается. Увеличение толщины оксидной оболочки приводит к увеличению оптимального радиуса наночастицы.

В соответствии с уравнением (5.8), увеличение ширины оксидной оболочки приводит к смещению оптимального радиуса наночастицы. Рассчитанные параметры минимума (минимальные значения H_c и соответствующие R) при варьировании толщины инертной оболочки объединены в таблице 5.3.

Рассчитанные зависимости H_c от L и R наночастицы достаточно сильные. Поэтому получим аналитическое выражение зависимости H_c от толщины оксидной оболочки наночастицы (L), радиуса наночастицы (R), теплоемкостей алюминиевого ядра наночастицы (c_a) оксида алюминия (оболочки наночастицы c_o) и лабильной матрицы (c), из соображений баланса энергии по методике, описанной выше, (5.9) [102]:

$$H_c = T_c \cdot \left(c_a \cdot (R - L) + c_o \cdot (R^3 / (R - L)^2 - (R - L)) + \frac{3 \cdot c \cdot h \cdot R^2 + 3 \cdot c \cdot h^2 R}{(R - L)^2} \right) \quad (5.9)$$

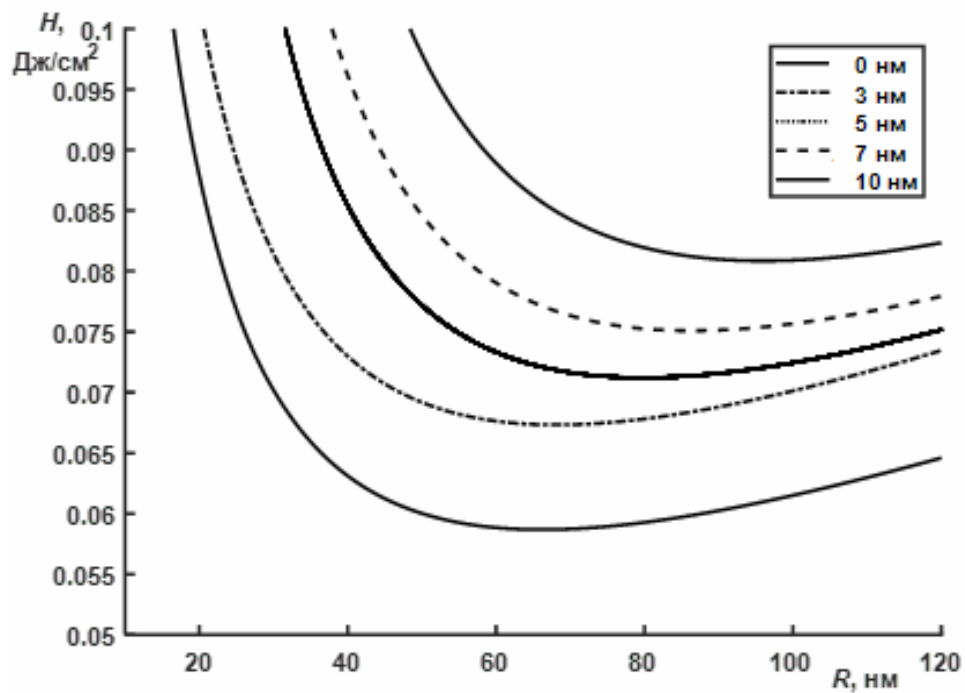


Рисунок 5.14 – Рассчитанные зависимости $H_c(R)$ для чистых частиц (сплошная кривая), при толщине оболочки 3 нм (штрихпунктирная линия), при $L=5$ нм (пунктирная линия), при $L=7$ нм (штриховая линия), при $L=10$ нм (сплошная широкая линия).

Таблица 5.3 Минимальные значения критической плотности энергии (H_c) и радиусы наночастиц алюминия, им соответствующие (R_m), при фиксированных значениях толщины оксидной оболочки L .

L , нм	0 нм	3 нм	5 нм	7 нм	10 нм
H_c , мДж/см ²	58,7	67,3	71,2	75,1	80,8
R_m , нм	66,18	68,08	79,71	86,27	96

Для проверки точности формул (5.8) (оптимальный радиус наночастицы) и (5.9) проведено сравнение рассчитанных по полной модели (5.1-5.3) значений H_c и полученных по аналитическому выражению при варьируемых параметрах – T_c (критической температуры взрыва $x(1)$ в программе) и h (толщины прогретой матрицы $x(2)$ в

программе).

Для этого программа для ЭВМ дополнена фрагментом:

```
for i = 1:length(ty)
    y=x(1)*(C_a*(R-tx(i))+C_o*(R^3/(R-tx(i))^2-(R-
tx(i))))+3*C_m*x(2)*R^2/(R-tx(i))^2+3*C_m*x(2)^2*R/(R-tx(i)));
    f= f+(ty(i)-y)^2; end
```

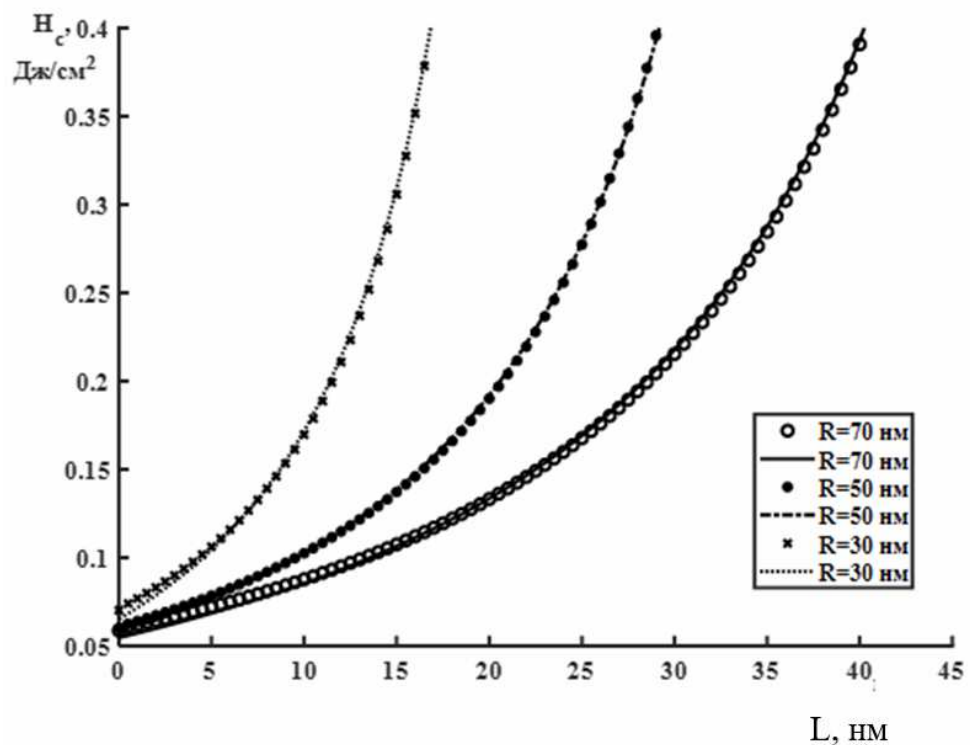


Рисунок 5.15 Зависимости H_c от толщины оксидной оболочки наночастицы (L) точки – расчет по модели, линии – по выражению (5.9). Радиусы наночастиц указаны в легенде

Полученные результаты сравнения рассчитанных по полной модели (точки на рисунке) и формуле (5.9) (сплошные линии) представлены на рисунке 5.15. Небольшие отличия мы видим только при исчезающе малых толщинах, при этом среднеквадратичное отклонение составило всего 0,27%, что свидетельствует о хорошей точности полученного аналитического выражения (5.9). В таблице 5.4.

приведены значения подгоночных параметров $x(1)$ и $x(2)$ при которых рассчитанные зависимости H от радиуса наночастицы и толщины оболочки наилучшим образом описываются полученным уравнением.

Таблица 5.4.

Значения подгоночных параметров $x(1)$ и $x(2)$ при которых рассчитанные зависимости H от радиуса (R_q) и толщины оболочки ($R_{\text{оболочки}}$) наилучшим образом описываются полученным уравнением

R_q	$R_{\text{оболочки}}$	$x_1 \cdot 1000$	x_2
70	0:0,5:50	0,279	3,08
60	0:0,5:50	0,223	2,87
50	0:0,5:30	0,374	2,39
40	0:0,5:30	0,498	2,48
30	0:0,5:20	0,78	2,57
20	0:0,5:10	1,06	2,67

Проведем сравнение расчетов по модели и имеющегося эксперимента [48]. Рассчитанные по полной системе значения H_c при заданном радиусе наночастицы (от 40 до 80 нм с шагом 10 нм) и варьируемой массовой доли алюминия в наночастице, делились на значения фактора эффективности поглощения наночастицы с заданными радиусами и массовыми концентрациями. На рисунке 5.16 приведены рассчитанные зависимости H_c от массовой доли металлического алюминия в наночастице (w), точки – эксперимент [48], линии – расчет при радиусах наночастиц 40 и 50 нм.

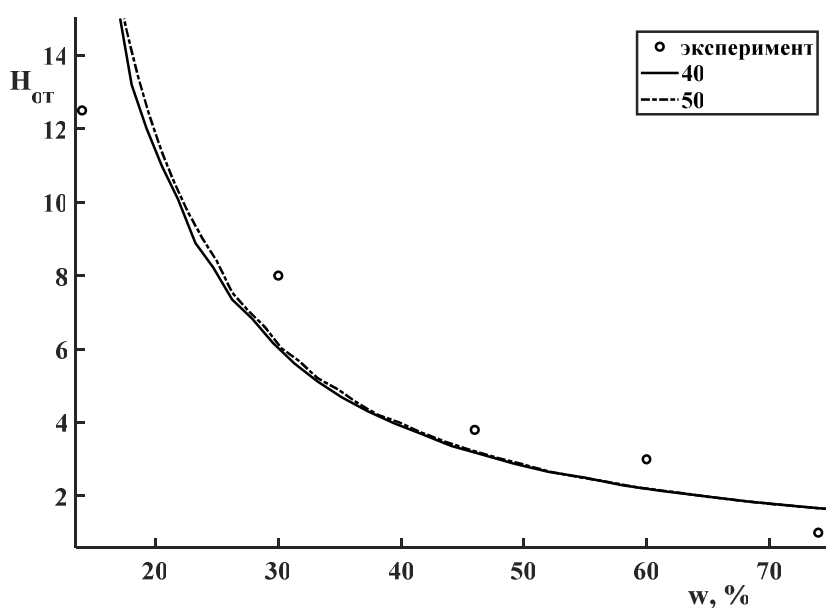


Рисунок 5.16 – Зависимости относительной плотности энергии импульса от массовой доли металлического алюминия в наночастице, точки - эксперимент [48], линии - расчет.

Мы видим достаточно хорошее описание эксперимента без использования дополнительных подгоночных параметров. Близость экспериментальных и рассчитанных параметров позволяет говорить о количественном описании зависимости критической плотности энергии инициирования лазерным импульсом PETN с включением алюминия от массовой доли металла в наночастице.

5.5 Выводы

1. Разработана и апробирована программа для расчета критических параметров и кинетических закономерностей взрывного разложения композитов на основе прозрачной матрицы ВВ и наночастиц со структурой светопоглощающее ядро – прозрачная оболочка инициированного импульсным лазерным излучением.

2. В зависимости от радиуса наночастицы в системе PETN – наночастицы со структурой ядро (Al) –оболочка (Al_2O_3) наблюдается максимальная температура лазерного разогрева, при этом значение оптимального радиуса наночастицы существенно зависит от длительности инициирующего импульса и совсем не зависит от его плотности энергии.

3. Максимальная температура в исследованных составах линейно зависит от интенсивности инициирующего импульса, при этом переход зависимости в сверх линейное состояние свидетельствует о приближении плотности энергии импульса к ее критическому значению.

4. При облучении PETN с наночастицами алюминия с оксидной оболочкой импульсом с H_c , близкой к критической, в образце наблюдается квазистационарный режим, когда медленное понижение температуры компенсируется увеличением ширины очага реакции.

5. Получено аналитическое выражение зависимости $H_c(R, L)$, показано хорошее согласие результатов численных расчетов и аналитических величин, количественно описана зависимость критической плотности энергии инициирования лазерным импульсом PETN с включением алюминия от массовой доли металла в наночастице.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанные подходы в дальнейшем были использованы для исследования физико-химических характеристик композитов прозрачная матрица – наночастицы металлов, их оксидов [139]. Так в [135] исследованы оптические свойства прессованных таблеток PETN/Al/Al₂O₃, показано, что серия интегральных характеристик образцов, такие как коэффициенты коллимированного и полного пропускания, отражения, показатели поглощения и рассеяния, определяются не только радиусом наночастиц и их количеством в образце, но и массовой долей оксида в системе. Предложен эффективный метод экспериментального определения оптических характеристик образца, радиуса наночастицы и др. При этом наиболее точно оценивается радиус наночастицы (ошибка не более 3%), а вот массовая концентрация наночастиц и массовая доля оксида в наночастице определяется с большей ошибкой до 25%.

В работе [140] экспериментально получены оптоакустические сигналы, инициируемые импульсным лазерным излучением (импульс 14 нс) с длиной волны 532 нм в прессованных композитах циклотриметилентринитрамин-ультрадисперсные частицы никеля, и определены их наблюдаемые показатели поглощения излучения при значениях среднего радиуса частиц 40, 60, 80 и 140 нм. Показано, что зависимость экспериментального показателя поглощения от радиуса частиц при постоянной массовой доле немонотонная. Результаты интерпретировались в рамках теории переноса монохроматического излучения. Показано, что согласие экспериментальных и рассчитанных значений показателя поглощения прессованных таблеток циклотриметилентринитрамин – ультрадисперсные частицы никеля различного радиуса достигается при учете остаточной пористости образца. Оценены средний радиус пор и их концентрация.

В работе [24] экспериментально исследованы оптические свойства модельного прессованного композита бромид калия – алюминий марки ALEX. Показано, что спектральные зависимости коэффициентов полного пропускания и

диффузного отражения могут быть описаны с учетом содержания в образце как отдельных наночастиц алюминия, так и их агрегатов с характерным радиусом 133 нм. Показано, что в процессе воздействия непрерывного лазерного излучения с длиной волны 1070 нм начинается нелинейное поглощение частицами алюминия, фиксируемое по изменению оптической плотности образцов. Предложена модель эффекта, основанная на нагревании образца и температурной зависимости оптических характеристик частиц алюминия.

Дальнейшее развитие тематики работы связано как с увеличением числа объектов, к которым будут применены разработанные методики, так и к расширению числа задач, при решении которых они будут использованы. Так при нагревании наночастицы лазерным импульсом с частичным проплавлением поглощающей поверхности [128], она будет менять свои оптические характеристики [29] и для более корректного описания процесса необходимо определять оптические свойства наночастицы алюминия из ее представления кристаллическое слабо поглощающее ядро – сильно поглощающая расплавленная оболочка.

В диссертационной работе сделаны следующие выводы, получены основные результаты:

1. Создан пакет прикладных программ и проведен расчет кинетических закономерностей и критических параметров процессов, инициируемых РЕТН с наночастицами 12 металлов импульсам длительностью на полувысоте 12 и 14 нс.

2. Получены значения оптимальных теплофизических радиусов наночастиц 12 металлов в РЕТН при длительностях инициирующего импульса 12 и 14 нс, спрямляющие координаты, рядовые и функциональные зависимости рассчитанных величин от теплофизических характеристик металлов, инвариант модели.

3. Разработана и зарегистрирована программа для ЭВМ, проведен расчет оптических характеристик наночастиц со структурой ядро-оболочка. Проведена

адаптация модели и расчетной программы для моделирования закономерностей инициирования взрывного разложения энергетических материалов, содержащих наночастицы со структурой «ядро-оболочка», лазерным импульсом.

4. Рассчитаны критические параметры инициирования взрывного разложения композитов PETN/Al/Al₂O₃ лазерным импульсом при варьировании в широких пределах как радиуса наночастицы, так и толщины оболочки. Определены кинетические особенности формирования очага взрывного разложения исследованных объектов.

5. Получено аналитическое выражение зависимости пороговой плотности энергии от радиуса наночастицы, толщины оксидной оболочки. Количественно описана зависимость критической плотности энергии инициирования лазерным импульсом PETN с включением алюминия от массовой доли металла в наночастице.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

- ВВ – взрывчатые вещества,
- ОД – оптический детонатор.
- PETN – пентаэритриттетранитрата,
- Q_{abs} – коэффициент (фактор) эффективности поглощения наночастицы,
- N_{cr} – экспериментальная критическая плотность энергии,
- N – экспериментальная плотность энергии импульса лазера,
- w – массовая концентрация алюминия в наночастице со структурой металлическое ядро – оболочка из оксида алюминия,
- Q_{ext} – коэффициент (фактор) эффективности экстинкции,
- Q_{sca} – коэффициент (фактор) эффективности рассеяния,
- m_a – показатель преломления прозрачной среды,
- m_i – показатель преломления поглощающей среды,
- $Q_{abs\ max}$ – наибольшее значение зависимости фактора эффективности поглощения от радиуса наночастицы,
- R – радиус наночастицы,
- R_{max} – радиус наночастицы с $Q_{abs\ ma}$,
- r – радиус ядра наночастицы со структурой ядро–оболочка,
- r_m – радиус ядра наночастицы с максимальным значением фактора эффективности поглощения,
- T – температура в Кельвинах,
- α – коэффициент температуропроводности матрицы,
- α_M – коэффициенты температуропроводности материала наночастицы,
- E – энергия активации экзотермического разложения PETN,
- Q – тепловой эффект реакции экзотермического разложения,
- k_0 – предэкспонент реакции экзотермического разложения,
- c – объемная теплоемкость PETN,
- c_M – объемная теплоемкость материала наночастиц,

- c_o – объемная теплоемкость оксидной оболочки наночастицы,
 n – нормированная концентрация взрывчатого вещества,
 k_i – параметр, характеризующий длительность лазерного импульса на полувывсоте,
 H_0 – плотность энергии лазерного импульса,
 H_1 – наибольшая плотность энергии импульса (допороговая теоретическая),
 H_2 – наименьшая взрывная плотность энергии импульса (теоретическая),
 h – толщина слоя ВВ, прогретого за лазерный импульс,
 R_{min} – радиус наночастицы, композит которой с PETN имеет минимальную рассчитанную критическую плотность энергии,
 t_n – нормированное время появления максимума температуры границы PETN – наночастицы металла,
 H_n – нормированная рассчитанная критическая плотность энергии импульса,
 L – толщины оксидной оболочки наночастицы,
 Q_{ar} – коэффициент (фактор) эффективности поглощения ядра наночастицы со структурой металлическое ядро – прозрачная оболочка.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Звонарев, С.В. Основы математического моделирования: учебное пособие / С.В. Звонарев. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2019. - 112 с.
2. Волкова, С.Н. Применение методов математического моделирования в АПК / С.Н. Волкова, Е.Е. Сивак, М.Н. Моргунов // Сборник научных статей Международной научно-технической конференции молодых ученых, аспирантов, магистров и бакалавров «Технологии, машины и оборудование для проектирования, строительства объектов АПК». — Курск, Издательство: Курская государственная сельскохозяйственная академия имени И.И.Иванова, 2023. — С. 115-119.
3. Kleinauskas, A. Superparamagnetic Magnetite Nanoparticles for Cancer Theranostics / A. Kleinauskas, J. Kim, G. Choi, H. Kim // Reviews in Nanoscience and Nanotechnology. — 2012. — Vol. 1. — N 4. — P. 271 -283.
4. Ананьева, М.В. Моделирование оптоакустических сигналов в системе с упругим рассеянием и поглощением света/ М.В. Ананьева, А.А. Звеков, А.В. Каленский // Письма в ЖТФ. 2019. Т. 45. Вып. 7. С. 45-48.
5. Наноплазмоника / В.В. Климов. – М: Физматлит, 2009. - 480 с.
6. Cong, D. S. Effect of core-shell structure on optical properties of Au-Cu₂O nanoparticles/ D. S. Cong, An B. Ngac. // Physica B 532 – 2018– С. 216 – 220. – <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.11.048>
7. Mohammad, H. R. Analytical model of plasmonic resonance from multiple core-shell nanoparticles/ H. R. Mohammad, A. K. Brandon // Optical Engineering. December 2017. – N. 56(12). – P. 121903. – DOI:10.1117/1.OE.56.12.121903.
8. Лаптев, Н.И. Капсюль-детонатор лазерного инициирования взрывчатого вещества/ Н.И. Лаптев, В.И. Мордасов, В.В. Пойлов, Н.А. Сазонникова // полезная модель РФ № 135789, дата приоритета 2013-07-25, – опубл. 20.12.2013.
9. Ховансков, В.Н. Капсюль-детонатор и инициирующий состав/ В.Н. Ховансков, Ю.Н. Соловов, В.А. Батин, К.А. Дубровский, В.Н. Зубий, О.И. Окишев, Н.Е. Которов, Н.М. Бибнев, А.И. Шумский // патент РФ № 2046275,

дата приоритета 1993-02-16, опубл. 20.10.1995.

10. Калашникова, О.Н. Детонатор на основе светочувствительного взрывчатого вещества / О.Н. Калашникова, В.Н. Герман, Д.М. Мильченко, С.А. Вахмистров, Л.В. Фомичева, Н.Г. Калашников // патент на изобретение РФ 2427786, дата приоритета 2010-02-24, опубл. 27.08.2011.

11. Torres-Lugo, M. Thermal potentiation of chemotherapy by magnetic nanoparticles/ M. Torres-Lugo, C. Rinaldi // Nanomedicine (Long). – 2013. – N. 10. – P. 1689–1707.

12. Адуев, Б.П., Влияние добавок наночастиц монокарбида никеля на чувствительность тетранитропентаэритрита к лазерному воздействию / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.В. Пузынин // Химическая физика. – 2009. – Т.28. – N 11. – С.50-53.

13. Адуев, Б.П. Лазерное инициирование композитных материалов на основе тэна и наночастиц железа / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, А.П. Никитин, Р.Ю. Ковалев // Химическая физика. – 2016. – Т. 35. – № 7. – С. 38-43.

14. Адуев, Б.П. Влияние добавок ультрадисперсных частиц Al-C на чувствительность пентаэритриттетранитрата к лазерному воздействию / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, В.П. Ципилев, Р.И. Фурега // Физика горения и взрыва. – 2013. - Т. 49. - № 2. - С. 102-105.

15. Адуев, Б.П. Особенности лазерного инициирования композитов на основе тэна с включениями ультрадисперсных частиц алюминия / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, А.П. Никитин, А.В. Каленский // Физика горения и взрыва. - 2016. - Т. 52. - № 6. - С. 104-110.

16. Aluker, E.D. Laser Initiation of Energetic Materials: Selective Photoinitiation Regime in Pentaerythritol Tetranitrate / E.D. Aluker, A.G. Krechetov, A.Y. Mitrofanov // The Journal of Physical Chemistry C. -2011. -V.115. - P.6893-6901.

17. Александров, Е.И. Инициирование азидов свинца лазерным излучением / Е.И. Александров, А.Г. Вознюк // Физика Горения и Взрыва. – 1978. – Т. 14. – №

4. – С. 86-91.

18. Александров, Е.И. Исследование влияния длительности возбуждающего импульса на чувствительность азида свинца к действию лазерного излучения / Е.И. Александров, В.П. Ципилев // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20. – № 6. – С. 104-108.

19. Кригер, В.Г. Влияние эффективности поглощения лазерного излучения на температуру разогрева включения в прозрачных средах / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков, Б.П. Адуев // Физика горения и взрыва. – 2012. – Т. 48. – № 6. – С. 54-58.

20. Ананьева, М.В. Перспективные составы для капсуля оптического детонатора / М.В. Ананьева, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков, А.В. Каленский, А.П. Никитин // Перспективные материалы. – 2014. – №7. – С. 5-12.

21. Каленский, А.В. Спектральная зависимость критической плотности энергии инициирования композитов на основе пентаэритриттетранитрата с наночастицами никеля / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11. – № 3. – С. 340-345.

22. Kalenskii, A.V. The microcenter heat explosion model modernization / A.V. Kalenskii, V.G. Kriger, A.A. Zvekov, E.A. Grishaeva, I.Yu. Zykov, A.P. Nikitin // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 11-3. – С. 62-65.

23. Каленский, А.В. Расчет коэффициентов эффективности поглощения наночастиц алюминия в прозрачных средах / А.В. Каленский, И.Ю. Зыков, А.П. Никитин // Все материалы. Энциклопедический справочник. - 2015. - N 1. - С. 15-19.

24. Зверев, А.С. Нелинейное поглощение лазерного излучения частицами алюминия в матрице бромида калия / А.С. Зверев, А.В. Каленский, Г.Е. Овчинников, А.А. Звеков, Е.В. Галкина // Квантовая электроника, – 2021, – Т. 51, – № 8, – С. 712–717.

25. Каленский, А.В. Особенности плазмонного резонанса в наночастицах различных металлов / А.В. Каленский, А.А. Звеков, А.П. Никитин, М.В. Ананьева, Б.П. Адуев // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118. - № 6. – С. 1012-1021.

26. Адуев Б.П., Взрывчатое разложение тэна с нанодобавками алюминия при воздействии импульсного лазерного излучения различной длины волны / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, Р.И. Фурега, А.А. Звеков, А.В. Каленский // Химическая физика. – 2013. – Т. 32. - № 8. - С. 39-44.

27. Каленский, А.В. Влияние длины волны лазерного излучения на критическую плотность энергии инициирования энергетических материалов / А.В. Каленский, А.А. Звеков, М.В. Ананьева и др. // Физика горения и взрыва. – 2014. – Т.50. – N 3. – С.98-104.

28. Адуев Б.П., Применение наночастиц алюминия для регулирования чувствительности энергетических материалов к лазерному воздействию / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.В. Пузынин // Изв.вузов. Физика. – 2011. – Т.54. – № 1/2. – С.7-11.

29. Каленский, А.В. Температурные зависимости оптических свойств наночастиц алюминия/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, // Письма в ЖТФ. – 2017. – Т. 43. – Вып. 11. – С. 72-80.

30. Каленский, А.В. Микроочаговая модель с учетом зависимости коэффициента эффективности поглощения лазерного импульса от температуры / А.В. Каленский, А.А. Звеков, А.П. Никитин // Химическая физика. - 2017. - Т. 36. - N 4. - С.43-50.

31. Каленский, А.В. Оптические свойства наночастиц алюминия при различных температурах / А.В. Каленский, А.П. Никитин // Nauka-Rastudent.ru. - 2015. - N 3(15). - С.22.

32. Каленский, А.В. Влияние температуры на оптические свойства наночастиц металлов/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, А.П. Никитин// В книге: Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XV Международной школы-семинара. – 2018. – С. 50-51.

33. Зыков, И. Ю. Микроочаговая модель теплового взрыва PETN-металл с учетом коэффициента эффективности поглощения лазерного излучения наночастицами: монография/ И.Ю.Зыков, А.В. Каленский, А.А. Звеков // Кемеровский Государственный Университет. Кемерово, – 2016. – 108 с. – ISBN 9785835320240

34. Каленский, А.В. Оптические свойства композитов на основе прозрачной матрицы и наночастиц меди/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, А.П. Никитин, Н.В. Газенаур// Известия высших учебных заведений. Физика. 2016. Т. 59. № 2. С. 87-94.

35. Каленский, А.В. Расчет спектральных закономерностей коэффициентов эффективности поглощения наночастиц металла/ А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.П. Боровикова, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков// свидетельства о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS, № 2015660230, 29.07.2015.

36. Каленский, А.В. Многофакторный расчет параметров термовзрыва / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков, А.П. Никитин, А.П. Боровикова // свидетельства о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS, № 2014661582, 31.10.2014.

37. Каленский, А.В. Определение пространственно-временных параметров волны экзотермической реакции из экспериментальных данных / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.П. Боровикова А.А. Звеков// свидетельство о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS. №2016661501. 12.10.2016

38. Каленский, А.В. Обработка осциллограмм быстропротекающих процессов/ А.В. Каленский, А.П. Боровикова, А.А. Звеков, В.Г. Кригер, К.А. Радченко// свидетельства о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS. №2016661313. 05.10.2016

39. Каленский, А.В. Расчет оптических характеристик композитов на основе диэлектрика и наночастиц металла / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, А.П. Боровикова, А.П. Никитин // Свидетельство о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS, №2015612260, 16.02.2015.

40. Звеков, А.А. Расчет 3D-профилей поглощения света в нанокompозитах металл-диэлектрик / А.А. Звеков, А.П. Никитин, А.В. Каленский // Свидетельство о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS, №2015661724, 06.11.2015.

41. Каленский, А.В. Парадокс малых частиц при импульсном лазерном инициировании взрывного разложения энергетических материалов / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков // Физика горения и взрыва. - 2016. - Т.52. - N 2. - С.122-129.

42. Каленский, А.В. Зависимость критической плотности энергии инициирования взрывного разложения PETN-Co от длительности лазерного импульса/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков, А. П. Никитин //Химия в интересах устойчивого развития. 2016. Т. 24. № 2. С. 245-249.

43. Каленский, А.В. Кинетические закономерности взрывчатого разложения таблеток тетранитропентаэритрит-алюминий / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков // Журнал технической физики. – 2015. – Т. 85. – № 3. – С. 119-123.

44. Адуев, Б.П. Закономерности инициирования цепного и теплового взрыва энергетических материалов импульсным лазерным излучением/ Б.П. Адуев, В.А. Ананьев, А.П. Никитин, А.А. Звеков, А.В. Каленский// Химическая физика. – 2016. – Т. 35. – № 11. – С. 26-36.

45. Адуев, Б.П. Исследование оптических свойств наночастиц алюминия в тетранитропентаэритрите с использованием фотометрического шара / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, Г.М. Белокуров, А.А. Звеков, А.В. Каленский, А.П. Никитин, И.Ю. Лисков // Журнал технической физики. – 2014. – Т. 84. - № 9. – С. 126-131.

46. Адуев, Б.П. Определение оптических свойств светорассеивающих систем с помощью фотометрического шара / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, А.П. Никитин, Н.В. Нелюбина, Г.М. Белокуров, А.В. Каленский // Приборы и техника эксперимента. – 2015. – № 6. – С. 60-66.

47. Звеков, А.А. Способ определения оптических свойств наночастиц/ А.А. Звеков, Д.Р. Нурмухаметов, Б.П. Адуев, А.В. Каленский, А.П. Боровикова

//Патент на изобретение RUS. №2586938 03.12.2014. Зарегистрирован в Государственном реестре изобретений Российской Федерации. 19.05.2016

48. Адуев, Б.П., Влияние массовой доли металлического алюминия в наночастицах на порог взрывного разложения и эффективность поглощения света в компаунде на основе тэна / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, Н.В. Нелюбина // Физика горения и взрыва. – 2014. – №5. –Т. 50. – С. 87-91.

49. Temple, T.L. Optical properties of gold and aluminium nanoparticles for silicon solar cell applications / T.L. Temple, D.M. Bagnall // Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 109. – P. 084343. – ISSN 1936-0851.

50. Адуев, Б.П. Взрывчатое разложение таблеток пентаэритриттетранитрата, содержащих наночастицы никеля различного радиуса / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, Р.П. Колмыков, А.П. Никитин, М.В. Ананьева, А.А. Звеков, А.В. Каленский // Химическая физика. - 2016. - Т. 35. - № 8. - С. 37-43.

51. Адуев, Б.П. Влияние размера включений ультрадисперсных частиц никеля на порог лазерного инициирования тэна / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, И.Ю. Лисков // Физика горения и взрыва. - 2015. - Т. 51. - № 4. - С. 82-86.

52. Звеков, А.А. Моделирование распределения интенсивности в прозрачной среде с Френелевскими границами, содержащей наночастицы алюминия / А.А. Звеков, А.В. Каленский, А.П. Никитин, Б.П. Адуев // Компьютерная оптика. 2014. Т. 38. № 4. – С. 749-756.

53. Kolwas K. Size characteristics of surface plasmons and their manifestation in scattering properties of metal particles / K. Kolwas, A. Derkachova, M. Shopa // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2009. – V. 110. № 14-16. – pp. 1490-1501.

54. Ершов, Б.Г. Наночастицы металлов в водных растворах: электронные, оптические и каталитические свойства/ Б.Г. Ершов // Российский химический журнал (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). 2001. Т. 45. № 3. С. 20-30.

55. Адуев, Б.П. Влияние добавок наночастиц алюминия на чувствительность тетранитропентаэритрита к лазерному воздействию / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов // Химическая физика. - 2011. - Т. 30. - №3. - С. 63-65.

56. Адуев, Б.П. Влияние начальной температуры на порог лазерного инициирования тетранитропентаэритрита с добавками наночастиц алюминия / Б.П. Адуев, Г.М. Белокуров, Д.Р. Нурмухаметов // Химическая физика. - 2012. - Т.31 - №7. - С. 56-61.

57. Адуев, Б.П. Температурная зависимость порога инициирования композита тетранитропентаэритрит–алюминий второй гармоникой неодимового лазера / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, И.Ю. Лисков, А.А. Звеков, А.В. Каленский // Химическая физика. - 2015. - Т. 34. - № 7. - С. 54-57.

58. Адуев, Б.П. Светочувствительный материал на основе смеси пентаэритриттетранитрата и наночастиц Al / Б.П. Адуев, Г.М. Белокуров, Д.Р. Нурмухаметов, Н.В. Нелюбина // Физика горения и взрыва. - 2012. - Т. 48. - № 3. - С. 127-132.

59. Адуев, Б.П. Регулирование чувствительности пентаэритриттетранитрата к лазерному воздействию с помощью добавок наночастиц металлов никеля и алюминия / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, Р.И. Фурега, А.А. Звеков // Химическая физика. – 2014. – Т. 33. - № 6. – С. 37–41.

60. Zverev, A.S. Probing zinc oxide as a semiconductor photosensitizer of energetic materials to laser radiation / A.S. Zverev, D.R. Nurmukhametov, Ya.V. Kraft, N.N. Ilyakova, A.Y. Mitrofanov // Optics & Laser Technology. – 2023. – Т. 158. – № Part A. С. 108904.

61. Адуев, Б.П. Иницирование взрыва тэна импульсом второй гармоники неодимового лазера / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, И.Ю. Лисков, Р.И. Фурега // Физика горения и взрыва. - 2014. - Т. 50. - № 1. - С. 124-129.

62. Aduев, B.P. RDX-Al and PETN-Al composites' glow spectral kinetics at the explosion initiated with laser pulse / B.P. Aduев, D.R. Nurmukhametov, I.Y. Liskov, A.A. Zvekov // *Combustion and Flame*. - 2021. - Т. 223. - С. 376-381.

63. Aduев, B.P. Laser pulse initiation of RDX-Al and PETN-Al composites explosion / B.P. Aduев, D.R. Nurmukhametov, I.Y. Liskov, G.M. Belokurov, A.V. Tupitsyn // *Combustion and Flame*. - 2020. - Т. 216. - С. 468-471.

64. Нурмухаметов, Д.Р. Взрывчатое разложение поликристаллов тетранитрата пентаэритрита и циклотриметилентринитрамина с включениями ультрадисперсных пассивированных металлических частиц при воздействии импульсного лазерного излучения : 01.04.17 / Нурмухаметов Денис Рамильевич. – дис. ... д-ра физ.-мат. наук.: Томск, – 2021. – 318 с.

65. Aden, A.L. Scattering of Electromagnetic Waves from Two Concentric Spheres / A.L. Aden, M. Kerker // *Journal of Applied Physics*. – 1951. – V. 22(10). – P. 1242 – 1246. – ISSN 1936-0851.

66. Kolwa, K. Size characteristics of surface plasmons and their manifestation in scattering properties of metal particles/ K. Kolwa, A. Derkachova, M. Shopa// *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. – 2009. – V. 110. – № 14-16. – pp. 1490-1501.

67. Золотарев, В.М. Оптические постоянные природных и технических сред / В.М. Золотарев, В.Н. Морозов, Е.В. Смирнова - Л.: Химия, – 1984. – 216 с.

68. Кригер, В.Г. Способ регулирования порога инициирования оптического детонатора / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.А. Звеков // Патент РФ 2538263, дата приоритета 26.06.2013, дата регистрации 18.11.2014.

69. Адуев, Б.П. Смесевое светочувствительное взрывчатое вещество для оптического детонатора./ Б.П. Адуев, Д. Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, И.Ю. Лисков, А.В. Каленский // Патент РФ 2666435, дата приоритета 14.08.2017, дата регистрации: 07.09.2018.

70. Галкина, Е.В. Коэффициенты эффективности поглощения наночастиц олова в PETN на длине волны 1064 нм // Аспирант. – 2016. – № 1. – С. 78-81.

71. Chin-Wei Lin. Magneto-optical characteristics of Streptavidin-coated $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Au}$ core-shell nanoparticles for potential Applications on Biomedical Assays/ Chin-Wei Lin, Jian-Ming Chen, You-Jun Lin, Ling-Wei Chao, Sin-Yi Wei, Chiu-Hsien Wu, Chien-Chung Jeng, Li-Min Wang, Kuen-Lin Chen// Scientific Reports. – 2019. – 9:16466 <https://doi.org/10.1038/s41598-019-52773-7>.

72. Pradeep, B. Tuning the optical properties of Fe-Au core-shell nanoparticles with spherical and spheroidal nanostructures/ B. Pradeep, S.S. Verma, M.M. Sinha// Physics Letters A. – 2019. – V. 383. – pp. 2542–2550. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.05.009>

73. Mohammad, J.E. One-step fabrication of $\text{Au}@\text{Al}_2\text{O}_3$ core-shell nanoparticles by continuouswave fiber laser ablation of thin gold layer on aluminum surface: Structural and optical properties/ J.E. Mohammad, A. Shafyei, F. Karimzadeh // Optics and Laser Technology – 2020. –V. 126 – p. 106066. – <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2020.106066>.

74. Bouchaaba, A. Optical properties enhancement of hybrid nanocomposites thin films based on P3HT matrix and $\text{ZnO}@\text{SiO}_2$ core-shell nanoparticles/ A. Bouchaaba, M.E. Hajlaoui, N. Hnainia, A.Al-Tabbakh, A. Zeinert, H. Bouchriha. // Optical Materials. – 2020. – V. 102, – p.109829.

75. Rashid, T.M. Synthesis and characterization of $\text{Au}:\text{ZnO}$ (core:shell) nanoparticles via laser ablation/ T.M. Rashid, U.M. Nayef, M.S. Jabir, F.A.-H. Mutlak// Optik. – 2021. – V. 244. – p. 167569.

76. Шамсутдинова, Р.Р. Синтез наночастиц с модификацией ядро-оболочка на основе диоксида кремния и цинка / Р.Р. Шамсутдинова, А.В. Сафина, И.Н. Газизов, А.Ф. Алиев// сборник статей II Международной научно-практической конференции «Инновационное развитие науки и образования». В 2 частях. Пенза, 20 мая 2018 г. Том Часть 1. Ответственный редактор Гуляев Герман Юрьевич. 2018 Издательство: МЦНС «Наука и Просвещение», 2018, С. 21-23.

77. Ванг, К. Полимерные наночастицы, имеющие конфигурацию "ядро-оболочка" и включающие межфазную область/ К. Ванг, Бом Г., С. Варен, К. Пан, Д. Холл // Патент на изобретение РФ 2458084С2, дата приоритета 27.07.2007, дата регистрации: 10.08.2012.

78. Балаев, Д.А. Синтез и магнитные свойства наночастиц $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ со структурой ядро/оболочка/ Д.А. Балаев, С.В. Семенов, А.А. Дубровский, А.А. Красиков, С.И. Попков, С.С. Якушкин, В.Л. Кириллов, О.Н. Мартьянов //Физика твердого тела. – 2020. – Т 62. – В. 2. – С. 235-240.

79. Kibis, L.S. Catalysts for low-temperature co oxidation based on platinum, CeO_2 , and carbon nanotubes/ L.S. Kibis, A.N. Korobova, A.V. Zadesenets, A.V. Romanenko, T.Yu. Kardash, O.A. Stonkus, S.V. Korenev, O.Yu. Podyacheva, E.M. Slavinskaya, A.I. Boronin// Doklady Physical Chemistry. – 2022. – Т. 505. – № 2. – С. 115-121.

80. Камзин, А.С. Исследования свойств наночастиц $\text{Ag}/\text{FeCo}/\text{Ag}$ типа ядро/оболочка/оболочка / А.С. Камзин, М. Takahashi, S. Maenosono, А.А. Валиуллин// Физика твердого тела. – 2017. – Т 59. – В. 10. – С. 1999-2005.

81. Буркина, Р.С. Инициирование реакционно-способного вещества потоком излучения при поглощении его неоднородностями вещества/ Р.С. Буркина, Е.Ю. Морозова, В.П. Ципилев // Физика горения и взрыва. – 2011. – Т. 47, № 5. – С. 95-105.

82. Ассовский, И. Г. Физика горения и внутренняя баллистика. // М.: Наука. – 2005. – 357 с.

83. Кригер, В.Г. Зависимость пороговой энергии инициирования монокристаллов азида серебра от диаметра зоны облучения / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, В.П. Ципилев, М.В. Ананьева // Ползуновский вестник.– № 2–1. – 2006. – С. 75-77.

84. Кригер, В.Г. Взрывное разложение монокристаллов азида серебра при различных диаметрах зоны облучения / В.Г. Кригер, В.П. Ципилев, А.В. Каленский, А.А. Звеков // Физика горения и взрыва. – 2009. - Т. 45. - № 6. - С.

105-107.

85. Каленский, А.В. Механизм твердофазной цепной реакции / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, Ю.А. Захаров, В.П. Ципилев // Материаловедение. – 2006. – №9. – С. 14-21.

86. Каленский, А.В. Закономерности разлета продуктов взрыва монокристаллов азида серебра / А.В. Каленский, В.П. Ципилев, А.П. Боровикова, А.А. Звеков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2008. - Т. 5. - № 1. - С. 11-15.

87. Кригер, В.Г. Определение начала механического разрушения кристаллов азида серебра, инициированных лазерным импульсом / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, А.А. Звеков // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46. - №1. – С. 69-72.

88. Каленский, А.В. Капсюль-детонатор на основе светочувствительного взрывчатого вещества / А.В. Каленский, А.А. Звеков, М.В. Ананьева, А.П. Никитин, А.П. Боровикова, В.Г. Кригер// Патент на полезную модель РФ 157624, дата приоритета 22.07.2015, дата регистрации: 13.11.2015.

89. Каленский, А.В. Влияние многократного рассеяния на критическую плотность энергии инициирования компаундов тэн - алюминий импульсом неодимового лазера / А.В. Каленский, А.А. Звеков, М.В. Ананьева, А.В. Никитин, Б.П. Адуев // Физика горения и взрыва. – 2017. – Т. 53. – № 1. – С. 92-104.

90. Одинцова, О.В. Временная форма импульса первой гармоники неодимового лазера / О.В. Одинцова, Г.Э. Иващенко // Современные фундаментальные и прикладные исследования. – 2015. – № 2 (17). – С. 43-48.

91. Кригер, В.Г. Процессы теплопереноса при лазерном разогреве включений в инертной матрице / В.Г. Кригер, А.В. Каленский, А.А. Звеков, И.Ю. Зыков, А.П. Никитин// Теплофизика и аэромеханика. – 2013. – Т. 20. – № 3. – С. 375-382.

92. Каленский, А.В. Теплофизические процессы при нагревании наночастиц золота в инертной матрице лазерным излучением различной

длительности / А.В. Каленский, А.А. Звеков, А.П. Никитин, Б.П. Адуев // Теплофизика и аэромеханика. - 2016. - Т. 23. - № 2 (98). - С. 271-279.

93. Ананьева М.В. Размерные эффекты разветвленных твердофазных цепных реакций: 02.00.04 / Ананьева Марина Владимировна. – дис. ... канд. физ.-мат. наук.: Кемерово, 2010. 142 с.

94. Кригер, В.Г. Размерный эффект при инициировании разложения азидов тяжелых металлов импульсным излучением / В.Г. Кригер, А.В. Каленский // Химическая Физика. – 1996. – № 3. – С. 40-47.

95. Завитаев, Э.В. Скин-эффект в тонкой цилиндрической проволоке из металла / Э.В. Завитаев, О.В. Русаков, А.А. Юшкано // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – В. 6. – С. 1041-1047.

96. Assovskiy, I.G. Direct laser initiation of open secondary explosives / I.G. Assovskiy, G.V. Melik-Gaikazov, G.P. Kuznetsov // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – V. 653. – P. 012014.

97. Мелик-Гайказов, Г.В. Лазерное инициирование энергоемких комплексных соединений ряда металлов / Г.В. Мелик-Гайказов, Г.П. Кузнецов, И.Г. Ассовский // Горение и взрыв. - 2015. - Т. 8. - № 2. - С. 250-255.

98. Кайдашев, В.Е. Усиление комбинационного рассеяния локализованными плазмонами в наночастицах серебра на поверхности наностержней оксида цинка / В.Е. Кайдашев, Н.В. Лянгузов, Ю.И. Юзюк, Е.М. Кайдашев // Журнал технической физики. - 2012. - Т 82. - № 10. - С. 85-89.

99. Звеков, А.А. Расчет оптических свойств композитов пентаэритрит тетранитрат - наночастицы кобальта / А.А. Звеков, А.В. Каленский, Б.П. Адуев, М.В. Ананьева // Журнал прикладной спектроскопии. - 2015. - Т.82. - N 2. - С.219-227.

100. Evanoff, D.D. Synthesis and Optical Properties of Silver Nanoparticles and Arrays / Jr. D.D. Evanoff Jr., Chumanov G. // ChemPhysChem. – 2005. – N. 6. – pp. 1221-1231.

101. Каленский, А.В. Влияние физических процессов на протекание быстропротекающих химических реакций / А.В. Каленский, Е.В. Галкина // Сборник статей Национальной научно-практической конференции «Проблемы и перспективы реализации междисциплинарных исследований» (Волгоград, 22.09.2020 г.). – Уфа: OMEGA SCIENCE, 2020. – с. 9-12.

102. Галкина, Е.В. Лазерное инициирование взрывчатых материалов, содержащий наночастицы «ядро-оболочка»/ Е.В. Галкина, Е.Н. Ладченко // Фундаментальные и прикладные исследования в физике, химии, математике и информатике: материалы симпозиума рамках XVI (XLVIII) Международной научной конференции студентов и молодых ученых «Образование, наука, инновации: вклад молодых исследователей», приуроченной к 300-летию Кузбасса. [Электронный ресурс] / сост. Ю.А. Степанов, С.Ю. Завозкин; Кемеровский государственный университет. – Электрон. дан. (объем 9,97 Мб).– Кемерово: КемГУ, 2021. – Вып. 22. – с. 81-83.

103. Галкина, Е.В. Математическое моделирование быстропротекающих химических процессов/ Е.В. Галкина, В.В. Галкина// В сборнике: XIV Машеровские чтения. материалы международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Витебск, – 2020. – С. 17-18.

104. Никитин, А.П., Закономерности взрывного разложения композитов PENT - наночастицы металлов/ А.П. Никитин, Е.В. Галкина, К.А. Радченко, Г.Э. Иващенко //В сборнике: Естественные и математические науки: вопросы и тенденции развития. Сборник научных трудов по итогам международной научно-практической конференции. – 2015. – С. 14-17.

105. Галкина, Е.В. Пакет прикладных программ для оптимизации состава капсуля оптического детонатора на основе нанокompозитов PETN-Sn/ Е.В. Галкина // Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2016. № 1 (20). С. 28-34.

106. Каленский, А.В. Инвариант микроочаговой модели теплового взрыва/ А.В. Каленский, М.В. Ананьева., А.П. Боровикова, Н.В. Газенаур, Е.В. Галкина, А.А. Звеков, А.П. Никитин // свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ RUS. № 2017613068. Дата приоритета 10.01.2017, дата гос. регистрации 9.03.2017.

107. Галкина, Е.В. Пакет прикладных программ для расчета теплофизических параметров взрывного разложения композитов на основе PETN /Е.В. Галкина// Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2016. № 2-2 (21). С. 26-34.

108. Никитин, А.П. Программа для расчета характеристической кривой взрывного разложения PETN - наночастицы металлов/ А.П. Никитин, К.А. Радченко, Е.В. Галкина// Современные фундаментальные и прикладные исследования. – 2016. – № 3 (22). – С. 42-48.

109. Handbook of Optical Constants of Solids. Vol. 1/ Edited by: E.D. Palik. -. Academic Press, 1998. 804 p.

110. Handbook of Optical Constants of Solids. Vol. II/ Edited by: E.D. Palik. -. Academic Press, 1998. 1096 p.

111. Кригер, В.Г. Цепно-тепловая модель взрывного разложения азидов тяжелых металлов/ В.Г. Кригер, А.В. Каленский, Е.А. Гришаева, А.А. Звеков // Известия ВУЗов. Физика. – 2009. – Т. 52. – № 8/2. –С. 289 – 291.

112. Галкина, Е.В. Модель инициирования композитов PENT-олово импульсом неодимового лазера/ Е.В. Галкина, К.А. Радченко// Nauka-Rastudent.ru. – 2015. – № 9. – С. 12.

113. Галкина, Е.В. Критерии взрывного разложения композитов PETN - наночастицы олова лазерным импульсом / Е.В. Галкина// Actualscience. – 2016. – Т. 2. – № 2. – С. 60-64.

114. Zvekov, A.A., The dependence of the critical energy density and hot-spot temperature on the radius metal nanoparticles in PETN/ A.A. Zvekov, A.P. Nikitin,

E.V. Galkina, A.V. Kalenskii// Наносистемы: физика, химия, математика. – 2016. – Т. 7. – № 6. – С. 1017-1023.

115. Каленский, А.В Сенсibilизация наночастицами металлов взрывного разложения PETN, инициированного лазерными импульсами наносекундной длительности/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина// В сборнике: Третий междисциплинарный молодежный научный форум с международным участием "Новые материалы". Сборник материалов. – 2017. – С. 582-585.

116. Каленский, А.В. Критические параметры микроочаговой модели импульсного лазерного инициирования взрывного разложения энергетических материалов/ А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Д.Р. Нурмухаметов // Химическая физика. – 2017. – Т. 36. – № 9. – С. 45-52.

117. Галкина, Е.В. Характеристическая кривая взрывного разложения композитных составов PETN - наночастицы металлов/ Е.В. Галкина// В сборнике: XIV Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов "Физико- химия и технология неорганических материалов" (с международным участием). Сборник трудов. 2017. С. 95-97.

118. Галкина, Е.В. Критические параметры микроочаговой модели теплового взрыва/ Е.В. Галкина, А.П. Никитин// В сборнике: Образование, наука, инновации: вклад молодых исследователей. материалы XI (XLIII) Международной научно-практической конференции. Кемеровский государственный университет; составитель: Ногтев Д. Ю., – 2016. – С. 683-684.

119. Боровикова, А.П. Моделирование взрывного разложения прессованных таблеток PETN-наночастицы металлов/ А.П. Боровикова, Г.Э. Иващенко, К.А. Радченко, Е.В. Галкина// Вестник науки и образования Северо-Запада России. – 2015. – Т. 1. – № 1. – С. 217-223.

120. Галкина, Е.В. Оптимальные теплофизические радиусы металлов в PETN при длительности импульса 12 нс/ Е.В. Галкина// Аспирант. – 2016. – № 3(19). – С. 119-122.

121. Kalenskii, A.V. The critical parameters of the thermal explosion micro hot-spot model dependence on the pulse duration/ A.V. Kalenskii, A.A. Zvekov, E.V. Galkina// Journal of Physics: Conference. 2017, V. 830, Issue 1, C. 012128.

122. Никитин, А.П. Связь закономерностей инициирования взрывного разложения PETN с физическими свойствами сенсibiliзирующих наночастиц/ А.П. Никитин, Г.Э. Иващенко, Е.В. Галкина, К.А. Радченко // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017, – Т. 14, – №1. – С. 64-69.

123. Галкина, Е.В. Инвариант взрывного разложения композитов PETN-наночастицы металлов лазерным импульсом/ Е.В. Галкина// Nauka-Rastudent.ru. – 2016. – № 4. – С. 25.

124. Ананьева, М.В. Методика расчета оптических свойств наночастиц золота с конечным распределением по размерам/ М.В Ананьева, Е.В. Галкина, Н.В. Газенаур // Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2017. № 1 (24). С. 19-26.

125. Guévelou, S. A simple expression for the normal spectral emittance of open-cell foams composed of optically thick and smooth struts / S. Guévelou, B. Rousseau, G. Domingues, J. Vicente. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 189. – P. 329-338. ISSN 0022-4073.

126. Hubert, P. New approach for the determination of aerosol refractive indices –Part II: Experimental set-up and application to amorphous silica particles / P. Hubert, H. Herbin , N. Visez, O. Pujol, D. Petitprez // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 200. – P. 320–327. ISSN 0022-4073.

127. Звеков, А.А. Методика расчета оптических характеристик композитов на основе прозрачной матрицы с остаточной пористостью и наночастиц металлов/ А.А. Звеков, М.В Ананьева., А.В. Каленский, Б.П. Адуев, Е.В. Галкина // Журнал прикладной спектроскопии. – 2019. – Т. 86. – № 3. – С. 438-446.

128. Ananyeva, M.V. The influence of optical properties of Au nanoparticles on their laser heating in an inert medium / M.V. Ananyeva, A.A. Zvekov, E.V. Galkina, A.V. Kalenskii // Procedia Engineering, 2017. V. 201, pp. 603-611

129. Алукер, Э.Д. Влияние микроочагового характера зарождения реакции взрывного разложения на эффективность лазерного инициирования/ Э.Д. Алукер, А.С. Зверев, А.Г. Кречетов, А.Ю. Митрофанов, А.В. Тупицын // Химическая физика. – 2014. – Т. 33, № 12. – С. 24-28.

130. Чумаков, Ю.А. Инициирование реакции в окрестности одиночной частицы, нагреваемой СВЧ-излучением/ Ю.А. Чумаков, А.Г. Князева // Физика горения и взрыва. – 2012. – Т. 48, № 2. – С. 24-30.

131. Каленский, А.В. Расчет оптических свойств наночастиц со структурой ядро-оболочка / А.В. Каленский, М.В. Аананьева, А.П. Боровикова А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Н.В. Газенаур// свидетельство о гос.регистрации программы для ЭВМ RUS. №20186643081. Дата приоритета 24.09.2018, дата гос. регистрации 14.11.2018.

132. Звеков, А.А., Программный комплекс для расчета оптических свойств наночастиц со структурой ядро-оболочка/ А.А. Звеков, Е.В. Галкина, К.А. Радченко //Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2016. № 3 (22). С. 25-31.

133. Галкина, Е.В. Комплекс прикладных программ расчета оптических свойств наночастиц алюминия с оболочкой из оксида алюминия/ Е.В. Галкина// Современные фундаментальные и прикладные исследования. – 2017. – № 3. – (26). – С. 17-22.

134. Каленский, А.В. Влияние толщины оксидной оболочки на оптические свойства наночастицы в различных матрицах/ А.В. Каленский, Е.В. Галкина, А.А. Звеков// Актуальные вопросы науки и техники: проблемы, прогнозы, перспективы: Сборник тезисов национальной конференции / под общ. ред. И.С. Морозовой и И.А. Короткого; ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет». – Кемерово, 2019. С. 26.

135. Каленский, А.В. Моделирование спектральных характеристик композитов прозрачная матрица-наночастицы со структурой ядро-оболочка/

А.В. Каленский, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, Д.Р. Нурмухаметов // Компьютерная оптика. 2018. Т. 42. № 2. С. 254-262.

136. Galkina, E.V. Micro hot-spot model of initiation of composites based on the explosives and inclusions of nanoparticles with shell-core structure / E.V. Galkina, A.V. Kalenskii, A.A. Zvekov, M.V. Anan'eva, B.P. Aduев, V.V. Galkina // 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2020 online), (19th International Conference on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter): Abstracts. Tomsk: Publishing House of IAO SB RAS, 2020. P 482.

137. Kalenskii, A.V. Micro hot-spot model of thermal explosion taking into account dielectric shell of sensitizing nanoparticle/ A.V. Kalenskii, M.V. Anan'eva, E.V. Galkina, V.G. Kriger, A.A. Zvekov // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – С. 052017.

138. Ананьева, М.В. Влияние оптических свойств наночастиц золота на их лазерный нагрев в инертной матрице/ М.В. Ананьева, А.А. Звеков, Е.В. Галкина, А.В. Каленский// В сборнике: Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2017). сборник трудов III международной конференции и молодежной школы. Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. – 2017. – С. 1358-1364.

139. Данильченко, С.С. Сенсibilизация ТЭНа наночастицами металлов и их оксидов/ С.С. Данильченко, Е.В. Галкина // В сборнике: Фундаментальные и прикладные исследования в физике, химии, математике и информатике. Материалы симпозиума XVIII (L) Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, приуроченной к 50-летию КемГУ. Сост. А.А. Звеков. Кемерово, – 2023. – С. 75-76.

140. Адуев, Б.П. Оптоакустическое исследование и моделирование оптических свойств композитов циклотриметилентринитрамин-ультрадисперсные частицы никеля / Б.П. Адуев, Д.Р. Нурмухаметов, А.А. Звеков, Н.В. Нелюбина, С.А. Созинов, А.В. Каленский, М.В. Ананьева, Е.В. Галкина // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128. – № 5. – С. 659-668.