



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”

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Кемерово — 2023

Работа выполнена на кафедре химии твердого тела и химического материаловедения Института фундаментальных наук ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

Научный руководитель: д.ф.-м.н., доцент Звеков Александр Андреевич, профессор кафедры химии твердого тела и химического материаловедения.

Официальные оппоненты: д.ф.-м. н., профессор, Ципилев Владимир Папилович, профессор Отделения материаловедения Инженерной школы новых производственных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск.

к.ф.-м.н. Лисков Игорь Юрьевич, научный сотрудник лаборатории энергетических соединений и нанокompозитов Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр угля и углехимии Сибирского отделения Российской академии наук», г. Кемерово.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», г. Томск.

Защита состоится 02 февраля 2024 года в 10:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.315.09, созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет», 650000, г. Кемерово, у. Красная, д. 6

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет» <https://kemsu.ru/science/dissertation-councils/diss-24-2-315-09/protects/55971/>

Автореферат разослан «____» _____ 2023 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
д.ф.-м.н., доцент

 А.А. Звеков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Причина многих техногенных катастроф на шахтах страны - это несанкционированное срабатывание электродетонаторов. Основным недостатком электродетонаторов и оптических детонаторов (ОД) на основе инициирующих взрывчатых веществ является высокая вероятность случайных взрывов.

Хорошая чувствительность к лазерному импульсу уже созданных капсулей ОД на основе инициирующих взрывчатых веществ (ВВ) нивелируется опасностью взрыва к спектру возможных спонтанных воздействий, таких как удар, пробой, нагрев, трение. Задача создания капсулей, имеющих высокие пороги взрывного разложения широким спектром воздействия, кроме импульса лазера, может быть решена введением во вторичные ВВ светочувствительных, сенсibiliзирующих добавок.

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

Разработанность темы исследования.

В работах профессора Адуева Б.П. показано значительное (более чем в 10 раз) снижение критической плотности энергии (H_c) 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. При синтезе алюминиевые наночастицы окисляются, появляется и растет оксидная оболочка, соотношение металл – оксид уменьшается. Это приводит к изменению физико-химических свойств композита PETN с включением наночастиц алюминия. Экспериментально в работе профессора Адуева Б.П. с сотрудниками были исследованы пороги взрывчатого разложения наночастиц алюминия в частице с разными геометрическими пропорциями «ядро-оболочка». Показано существенное изменение критической плотности энергии H_c инициирования взрывного разложения и фактора эффективности поглощения (Q_{abs}) при варьировании массового соотношения ядро-оболочка. При этом радиус наночастицы (R) практически не изменяется.

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, сенсibilизированного наночастицами различных металлов (при значении $Q_{abs} = 1$) 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 (Al/Al_2O_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 $Al/Al_2O_3/PETN$.

5) Получить аналитическое выражение зависимости H_c композита $Al/Al_2O_3/PETN$ от радиуса наночастицы и толщины оксидной оболочки, сравнить результаты.

Научная новизна:

С относительной погрешностью 10^{-12} в широком диапазоне изменения радиуса сенсibilизирующих 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 сенсibilизирующих 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 капсуля 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/Al₂O₃/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. 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).

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.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Работа изложена на 122 страницах, содержит 36 рисунков, 8 таблиц. Состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка цитируемой литературы из 140 наименований.

Во введении определена разработанность и обоснована актуальность темы работы, сформулированы цели и задачи работы, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, методология и методы исследования, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов.

В первой главе приведен краткий литературный обзор проблематики лазерного инициирования взрывчатого разложения композитов на основе ВВ, основные результаты экспериментального исследования закономерностей взрывного разложения прессованных таблеток PETN и наночастиц металлов в том числе со структурой «ядро-оболочка». Показано, что микроочаговая модель теплового взрыва качественно описывает экспериментальную зависимость критической плотности энергии инициирования PETN с наночастицами Al (ядро) – Al₂O₃ (оболочка) от массовой доли алюминия, однако количественное описание отсутствует (Q_{abs} изменяется в 4 раза, а H_c – в 12,5). Приведены основные элементы методики и результаты расчета оптических характеристик наночастиц металлов в прозрачной матрице. Приведен литературный обзор областей методов синтеза и практического применения наночастиц металлов со структурой «ядро-оболочка», сформулированы выводы по главе.

Во второй главе представлена методика моделирования закономерностей физико-химических процессов в композитах PETN – наночастицы металлов. Проанализированы основные процессы, учитываемые в сформулированной ранее микроочаговой модели лазерного инициирования взрывного химического разложения PETN, содержащего наночастицы металлов. Приведена методика моделирования кинетики и критических условий быстропротекающих процессов. Описаны основные фрагменты созданного и зарегистрированного пакета прикладных программ для расчета критических параметров инициирования взрывного разложения нанокомпозитов PETN - наночастицы металлов, сформулированы выводы.

В третьей главе приведены результаты моделирования закономерностей физико-химических процессов в композитах PETN – наночастицы металлов (при единичном значении коэффициента эффективности поглощения). Расчет проведен в рамках микроочаговой модели теплового взрыва, сформулированной

профессором Ципилевым В.П. с коллегами, учитывающей процессы кондуктивного теплопереноса в наночастице и матрице, а также тепловыделение за счет химического разложения PETN и убыль реагента. Расчет провели при длительности импульса 12 и 14 нс в зарегистрированном пакете прикладных программ. Исследование добавок 12 металлов (Al, Ag, Au, Co, Cr, Cu, Ni, Fe, Pb, Pd, Sn, V) необходимо для получения достоверных рядовых зависимостей.

На рисунке 1 представлены рассчитанные кинетические закономерности изменения температуры на границе PENT – наночастица олово радиуса 95 нм. Сплошная – при плотности энергии импульса неодимового лазера длительностью 12 нс 59,3521 мДж/см² (допороговый режим). Пунктир – при $H = 59,3522$ мДж/см² (взрыв). Анализ кинетики процесса позволяет определить критические параметры инициирования взрывного разложения с участием наночастиц данного радиуса. На рисунке 2 показана рассчитанная зависимость критической плотности энергии от радиуса наночастиц олова в PETN для длительности импульса 12 нс. Рассчитанные зависимости $H_c(R)$ аналогичны изображенной на рисунке 2: от начальной точки расчета до R_{min} H_c существенно уменьшается, достигая экстремума H_{min} , после чего происходит увеличение H_c . Показано, что для каждой длительности импульса существует минимальная критическая плотность энергии (H_{min}) при так называемом теплофизическом радиусе наночастицы (R_{min}) используемого металла.

В таблице 1 представлены рассчитанные критические параметры взрывного разложения PETN (R_{min} и H_{min}) с наночастицами 12 металлов при длительности импульса на полувысоте 12 нс.

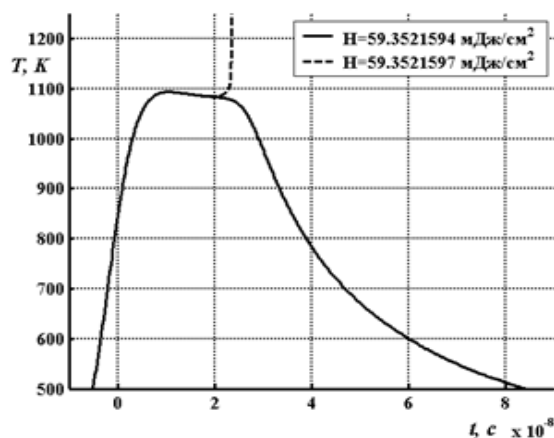


Рисунок 1 – рассчитанные кинетические закономерности изменения температуры на границе PENT – наночастица олово радиуса 95 нм. (обозначения в тексте)

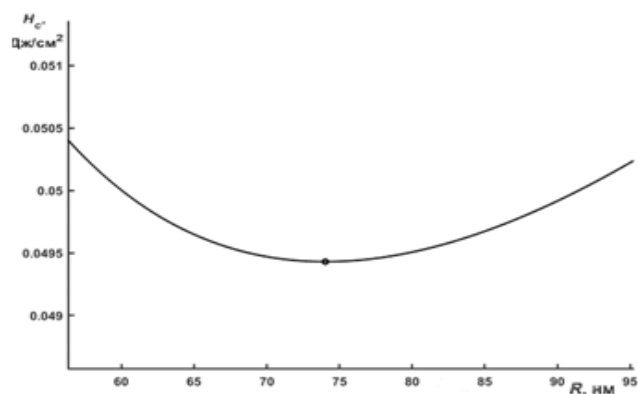


Рисунок 2 – зависимость критической плотности энергии от радиуса наночастиц олова в PETN для длительности импульса 12 нс, линия – расчет, точка - минимум зависимости с координатами R_{min} и H_{min} .

Таблица 1. Критические параметры взрывного разложения PETN с наночастицами металлов (12 нс)

Металл	H_{min} мДж/см ²	R_{min} , нм	Металл	H_{min} мДж/см ²	R_{min} , нм
Al	54,987	61,3	Ni	64,097	48,1
V	58,559	55,2	Sn	49,430	74
Fe	61,802	50,8	Pd	58,068	56
Au	55,352	60,6	Pb	47,712	79,2
Co	62,928	49,4	Cr	59,930	53,3
Cu	61,145	51,6	Ag	55,206	60,9

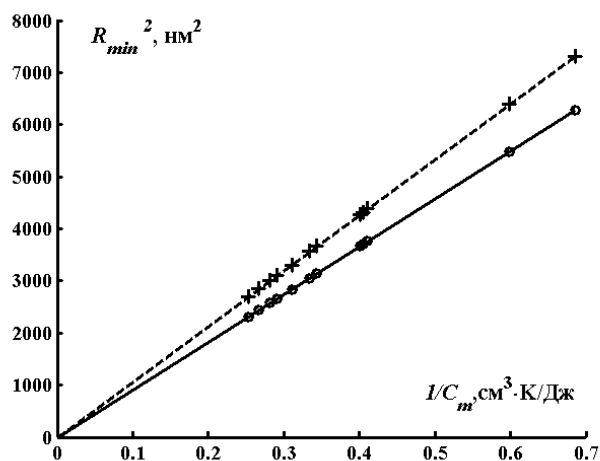


Рисунок 3 – Зависимости квадрата теплофизического радиуса наночастиц 12 металлов от их обратной теплоемкости для композитов на основе PETN (обозначения в тексте)

Для состава PETN свинец оптимальный теплофизический радиус составляет почти 80 нм, для PETN-никель менее 50 нм, т.е. существенно различаются.

Спрямыми координатами для зависимости R_{min} от теплоемкости (C_m) являются квадрат R_{min} и $1/C_m$. На рисунке 3 представлены 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 линия) и 14 нс (штриховая – прямая, точки “+” – расчет).

Поиск характеристик (иногда составных), незначительно меняющихся при варьировании условий протекания процесса в широком диапазоне является актуальной задачей при анализе закономерностей химических реакций механизмов естественных процессов. Кинетические зависимости изменения температуры в процессе инициирования взрывного разложения характеризуются временем достижения первичного максимума температуры (t_n) (рисунок 1). Для малых радиусов увеличивается время появления максимума температуры, далее для R от 55 нм до 70 нм проявляется широкий максимум, с последующим снижением параметра. Зависимость $H_c(R)$ наоборот, вначале уменьшается, достигает минимума и далее - увеличивается. Зависимости $t_n(R)$ и $H_n(R)$ для композитов PETN - Sn представлены на рисунке 4. Обе зависимости нормированы на свои характерные параметры. Для зависимости $t_n(R)$ нормировочным параметром является максимальное значение t_n (11,13557 нс). Для второй – минимальная плотность

энергии импульса $H_{min} = 49$ мДж/см². Противофазное поведение зависимостей рисунка 4 показывает, что их произведение может являться инвариантом модели. Рассмотрены различные варианты инварианта в результате произведения

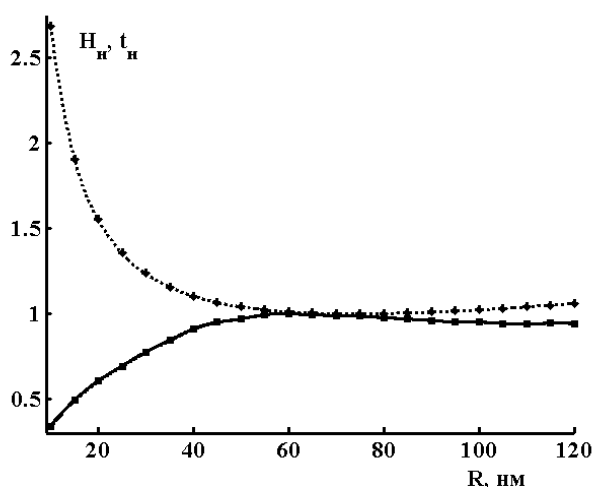


Рисунок 4 – Нормированные зависимости H_n (+) и t_n (*) от радиуса включений в композитах Sn/PETN. Сплошная линия – аппроксимация t_n , пунктир – H_n (сплайном).

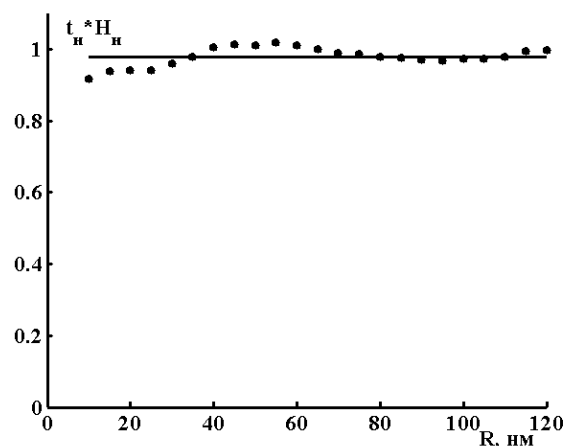


Рисунок 5 – Зависимость произведения t_n и H_n от R для композита Sn/PETN при инициировании лазерным импульсом (12 нс). «*» – значение инварианта для каждого радиуса, – линия – теоретическое значение инварианта.

нормированных t_n и H_n^X , величину степени X определяли МНК. 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 5. Точки – расчет – линия – среднее значение параметра. Отдельные множители в диапазоне изменяющихся радиусов отличаются почти в 3 раза. Однако 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%, что позволяет считать этот параметр инвариантом модели.

В четвертой главе представлены результаты моделирования оптических характеристик наночастиц металлов со структурой “ядро-оболочка”, методика и основные элементы созданного и зарегистрированного пакета прикладных программ, результаты расчетов оптических характеристик наночастиц металлов с оксидной оболочкой. Результаты расчетов коэффициентов эффективности поглощения Q_{abs} наночастиц алюминия (в матрице PETN с показателем преломления 1.54) с различными соотношениями радиусов металлического ядра и всей частицы приведены на рисунке 6.

На рисунке 6 мы видим, что с увеличением соотношения радиусов ядра и наночастицы коэффициент эффективности поглощения значительно увеличивается, смещаясь в сторону меньших радиусов.

На рисунке 7 представлены зависимости коэффициентов эффективности поглощения в расчете на наночастицу (Q_a) (а) и ядро наночастицы (Q_{ar}) (б) от толщины оксидной оболочки (L) при различных показателях преломления матрицы (1,33; 1,54; 1,75; 2).

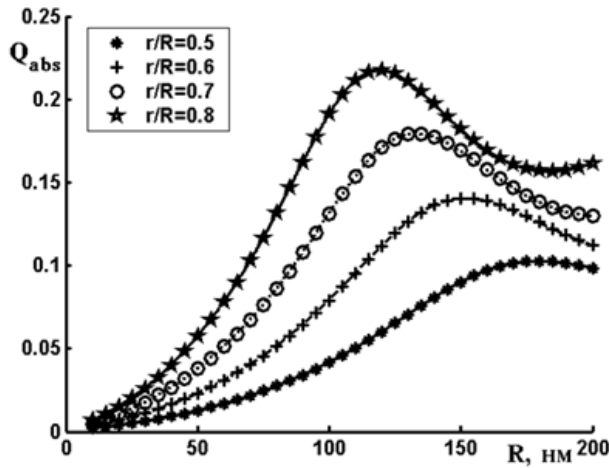


Рисунок 6 – Зависимость фактора эффективности поглощения от радиуса наночастиц алюминия в PETN при соотношениях радиусов металлического ядра и всей частицы, приведенных в легенде.

В традиционном расчете (а) величины Q_a уменьшаются, хотя присутствует матрица с показателем преломления равном оболочке. Для этого случая естественно ожидать отсутствия зависимости фактора эффективности поглощения от толщины оболочки. В представлении результатов через коэффициент эффективности поглощения в расчете на ядро наночастицы зависимости коэффициентов эффективности поглощения от толщины оксидной оболочки становятся более понятными.

При одинаковых показателях преломления оксидной оболочки и матрицы, оксидная оболочка не влияет на коэффициент

эффективности поглощения металлического ядра. На рисунке 7 б это штрихпунктирная линия с показателем преломления матрицы 1,75, соответствующей показателю преломления оксида алюминия. В связи с этим для наночастиц структуры поглощающее ядро – прозрачная оболочка рационально ввести фактор эффективности поглощения ядра (Q_{ar}) наночастицы.

а

б

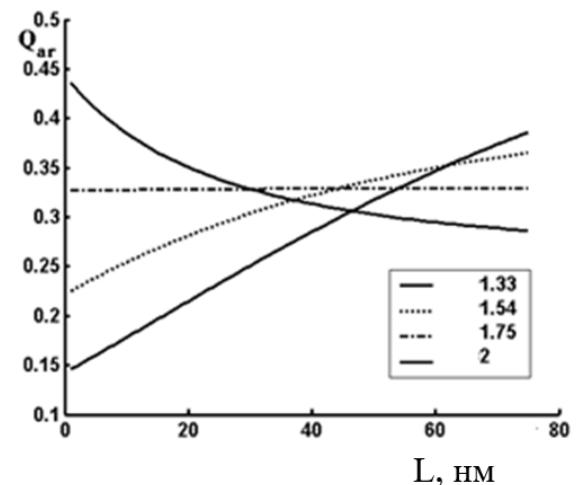
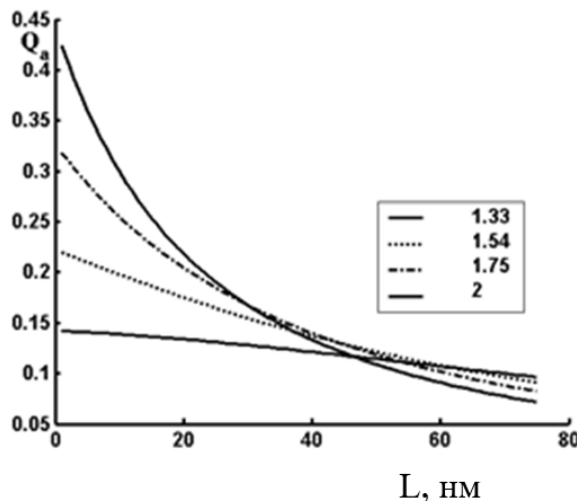


Рисунок 7 – Рассчитанные зависимости факторов эффективности поглощения, в расчете на наночастицу (а) и ядро наночастицы (б) от толщины оксидной оболочки (L).

В пятой главе представлены результаты моделирования закономерностей инициирования взрывного разложения PETN с наночастицами металлов со

структурой “ядро-оболочка” лазерным импульсом. Запись микроочаговой модели теплового взрыва в случае включений со структурой ядро-оболочка имеет вид:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k_0 \frac{nQ}{c} \cdot \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right), & x > R \\
 \frac{\partial n}{\partial t} &= -k_0 n \cdot \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right), & x > R \\
 \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha_0 \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right), & r < x < R \\
 \frac{\partial T}{\partial t} &= \alpha_M \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right), & x < r \\
 \frac{\partial n}{\partial t} &= 0, \quad n = 0, & x < R
 \end{aligned} \tag{1}$$

с граничным условием при $x=r$:

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

где индекс 0 относится к оболочке, м – ядру: α – коэффициенты температуропроводности, c – объемной теплоемкости, n – доля непрореагировавшего ВВ. В наночастицах типа «ядро-прозрачная оболочка» излучение импульса поглощается поверхностью металлического ядра, далее тепло нагревает оксидную оболочку, и только потом – ВВ с инициированием разложения.

Рассмотрим, как изменяется распределение температуры при действии лазерного импульса в композите PETN – Al с оксидной оболочкой.

На рисунке 8 приведены распределения температуры в PETN вблизи наночастицы при действии импульса в промежутке времени от 9 нс до 18 нс. Анализ кинетических закономерностей позволяет определить критическую плотность энергии.

На рисунке 9 представлены рассчитанные зависимости критической плотности энергии от толщины оксидной оболочки при радиусах 15 нм, 20 нм, 30 нм, 40 нм, 50 нм, 60 нм и 70 нм. Зависимости однотипные: критическая плотность энергии увеличивается при всех приведенных радиусах.

Существенной особенностью зависимости критической плотности энергии от радиуса наночастицы является существование оптимального радиуса наночастицы, при которой критическая плотность энергии инициирования взрывного разложения композитов на основе PETN и наночастицы такого радиуса с оксидной оболочкой одинаковой толщины минимальна. На рисунке 10 представлены рассчитанные зависимости критической плотности от радиуса наночастиц при различных толщинах оксидной оболочки. Увеличение толщины оксидной оболочки приводит к увеличению оптимального радиуса наночастицы.

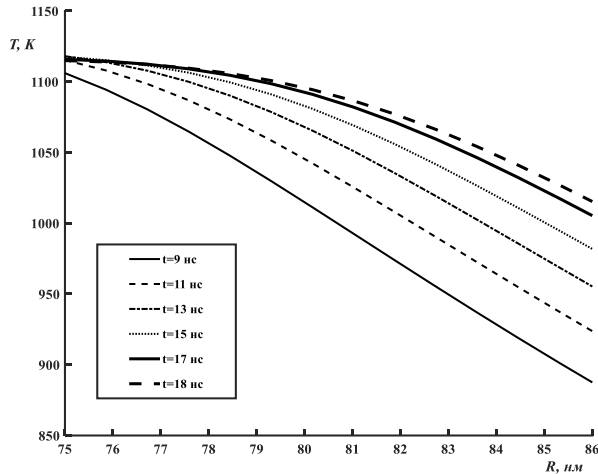


Рисунок 8 – Пространственные распределения температуры в образце в момент времени 9 нс, 11 нс, 13 нс, 15 нс, 17 нс и 18 нс

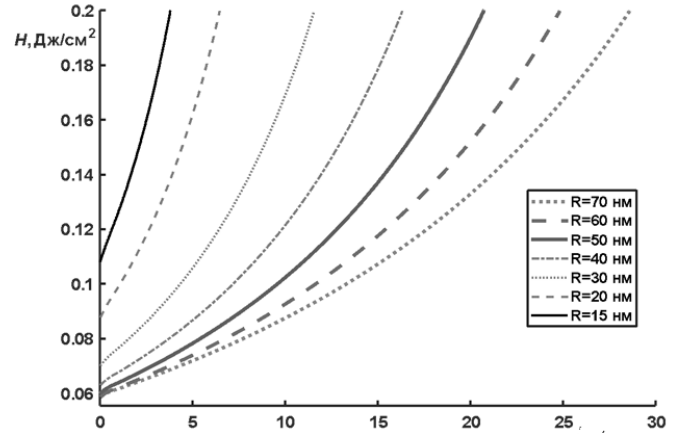


Рисунок 9 – Зависимости пороговой плотности энергии иницирования композитов PETN-Al/Al₂O₃ от толщины оболочки наночастицы. Радиусы наночастиц Al/Al₂O₃ указаны в легенде.

В Таблице 2 представлены Минимальные значения критической плотности энергии и радиусы наночастицы алюминия при указанных значениях толщины оксидной оболочки L.

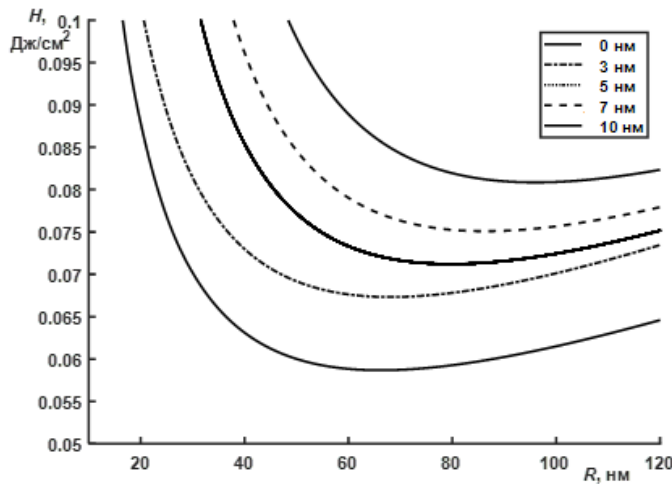


Рисунок 10 – Зависимости критической плотности энергии PETN от радиуса сенсibilизирующих наночастиц при толщинах оксидной оболочки наночастицы, указанной в легенде.

Таблица 2 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

Получены аналитические зависимости критической плотности

энергии иницирования и оптимального радиуса ядра от температуры вспышки T_c , толщины оксидной оболочки наночастицы (L), радиуса наночастицы (R), толщины прогретого слоя PETN (h),

теплоемкостей алюминиевого ядра наночастицы (c_a), оксида алюминия оболочки наночастицы (c_o) и лабильной матрицы (c):

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

Показано хорошее согласие рассчитанных по модели (1) и по выражению (2) значений критической плотности энергии, среднеквадратичное отклонение составило 0,27%.

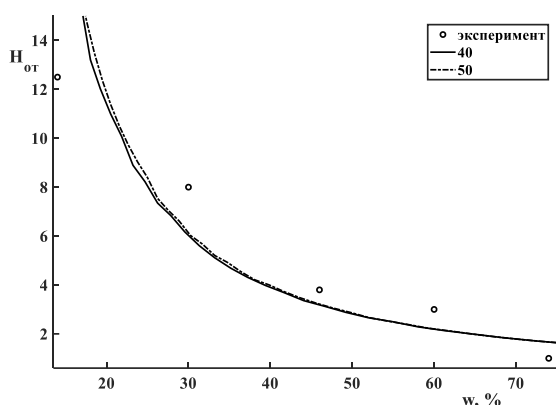


Рисунок 11 – Зависимости относительной плотности энергии импульса от массовой доли металлического алюминия в наночастице, точки - эксперимент [48], линии - расчет.

Проведено сравнение рассчитанных по модели с учетом фактора эффективности поглощения наночастиц и экспериментальных значений критической плотности энергии лазерного инициирования PETN с наночастицами алюминия с различными массовыми долями алюминия в наночастице. На рисунке 11 приведены зависимости критической плотности энергии от массовой доли металлического алюминия в наночастице точки - эксперимент, линии — расчет при радиусах наночастиц 40 и 50 нм.

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.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанные подходы использованы для исследования физико-химических характеристик композитов прозрачная матрица – наночастицы металлов, их оксидов. 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, она будет менять свои оптические характеристики 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 PETN с наночастицами 12 металлов импульсам длительностью на полувысоте 12 и 14 нс.

2. Получены значения оптимальных теплофизических радиусов наночастиц 12 металлов в PETN 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 РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Зарегистрированные программы для ЭВМ:

1. 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. Звек, А.П. Никитин // свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ RUS. № 2017613068. Дата приоритета 10.01.2017, дата гос. регистрации 9.03.2017

2. Каленский, А.В. Расчет оптических свойств наночастиц со структурой ядро-оболочка / А.В. Каленский, М.В. Ананьева, А.П. Боровикова А.А. Звек, 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.

Статьи в рецензируемых журналах из списка ВАК:

3. 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.

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

5. 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.

6. 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.

7. 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

8. 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.

9. 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.

10. 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.

11. 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.

12. 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.

Статьи в рецензируемых журналах:

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

14. 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.

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

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

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

18. 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.

19. 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.

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

21. 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.

22. 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.

23. 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.

24. 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.

Тезисы докладов конференций различного уровня:

25. 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.

26. 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.

27. 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.

28. 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.

29. 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.

30. 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.

31. 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.

32. 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.

33. 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. Aduiev, 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.

34. 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.

35. 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.

36. Данильченко С.С., Галкина Е.В. Сенсibilизация тэна наночастицами металлов и их оксидов 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.