

# ЭКСПРЕСС-МЕТОД РАСЧЕТА УДЕЛЬНОЙ ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВЧАТОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ $C_nH_mN_cO_d$ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ

А.А. Трубников<sup>1</sup>, В.В. Гордеев<sup>2</sup>, А.Г. Вакутин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Федеральное государственное унитарное предприятие «Федеральный центр двойных технологий «Союз» (ФГУП «ФЦДТ «Союз»), г. Дзержинский

<sup>2</sup> Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), г. Бийск

Разработан экспресс-метод расчета теплоты взрыва  $C_nH_mN_cO_d$  конденсированных взрывчатых веществ с различным кислородным балансом от резко отрицательного до положительного. Предложенный метод использует минимальный набор входных данных, состоящих из элементного состава, плотности энтальпий образования исходного взрывчатого вещества и его продуктов детонации. Расчет теплоты взрыва основывается на корреляционной связи между минимальной и максимальной теплотами взрыва с плотностью высокоэнергетического соединения. В статье подробно приведены реакции разложения взрывчатых веществ для случаев с минимальной и максимальными теплотами взрыва. Проведены расчеты теплоты взрыва по новому способу и методу Пелекина по представленной в статье базе взрывчатых веществ, а также приведены результаты сравнения, которые показали большую точность (в 2,3 раза) предложенного метода.

*Ключевые слова:* теплота взрыва, конденсированные взрывчатые вещества, элементный состав, энтальпия образования, кислородный баланс.

## ВВЕДЕНИЕ

Удельная теплота взрывчатого превращения или теплота взрыва является одной из наиболее важных характеристик взрывчатых веществ (ВВ). Наряду со скоростью и давлением детонации, теплота взрыва характеризует работоспособность ВВ, которая складывается из фугасного и бризантного действия, а также определяет его эффективность применения при проведении буровзрывных работ, боевых действий и др. [1-4]. Удельную теплоту взрыва можно определить, используя закон Гесса (1), который основывается на первом начале термодинамики, согласно выражению:

$$Q = -\sum \Delta H_{fdp}^0 + \Delta H_{fexp}^0 \quad (1)$$

где  $\sum \Delta H_{fdp}^0$  и  $\Delta H_{fexp}^0$  – энтальпии образования продуктов детонации (ПД) и исходного ВВ при давлении 101,325 кПа и температуре 298,15 К.

Основной сложностью при расчете теплоты взрыва по формуле (1) является определение точного состава ПД. Нахождение равновесного состава ПД достаточно трудоемкий процесс, который основан на решении термодинамической системы уравнений, включающей уравнение состояния. Дополнительной сложностью при проведении термодинамических расчетов представляет выбор уравнения состояния, которых на сегодняшний день известно достаточно большое количество, наиболее известными из которых являются VLW [5], VKW [6], WCA [7], CHEQ [8], HL [9] и др. На основе этих и некоторых других уравнениях состояния разработаны

компьютерные коды для расчета параметров детонации и состава продуктов взрыва: THOR [9]; SHEETAN [10], EXPLO5 [11], TDS [12] и др.

При выполнении оценочных расчетов энергетических характеристик ВВ исследователи зачастую применяют экспресс-методы, которые обладают меньшей точностью по сравнению с термодинамическими способами, но в отличие от последних используют небольшое количество входных параметров – элементный состав, теплота или энтальпия образования ВВ и ПД. Вышеперечисленные параметры можно легко найти в справочниках или базах данных ВВ. Главным достоинством экспресс-методов является простота их практической реализации.

На сегодняшний день известно несколько экспресс-методов расчета теплоты взрыва ВВ. Иранский ученый М. Кешаварц предложил способ нахождения теплоты взрыва, основанный на законе Гесса, в котором в качестве входных параметров используются элементный состав ВВ, энтальпии образования исходного ВВ и продуктов его детонации [13, 14]. Ключевой особенностью данного метода является расчет состава продуктов разложения. Согласно формулам, предложенным Кешаварцем,  $C_nH_mN_cO_d$  конденсированные ВВ, имеющие положительный кислородный баланс, в результате взрывчатого превращения в первую очередь образуют свободные молекулы азота ( $N_2$ ), далее кислород расходуется на окисление атомов водорода до воды ( $H_2O$ ) и атомов углерода до диоксида углерода ( $CO_2$ ),

оставшийся кислород выделяется в свободном виде (O<sub>2</sub>). Для ВВ с отрицательным кислородным балансом, в зависимости от элементного состава ВВ, продукты разложения, помимо вышеперечисленных составляют СО, С, Н<sub>2</sub>. На основе полученных расчетных и экспериментальных теплот взрыва, Кешаварц выводит корреляционные зависимости.

Известен экспресс-метод расчета теплоты взрыва, разработанный в 1977 г, советскими учеными В.И. Пепекиным, М.Н. Маховым и Ю.А. Лебедевым [15]. Предложенный способ, основывается на аппроксимационных зависимостях, в которые входят корреляционные коэффициенты, плотность ВВ и его кислородный коэффициент, максимальная теплота взрыва, рассчитываемая исходя из элементного состава и энтальпии образования ВВ. В отличие от метода предложенного Кешаварцем в данном подходе используется плотность ВВ.

В настоящей статье предложен экспресс-метод расчета теплоты взрыва конденсированных ВВ, основывающейся на связи минимальной и максимальной теплоты взрыва и плотности ВВ.

Теплоту взрыва, согласно предложенному подходу, можно рассчитать с помощью выражения:

$$Q_{calc} = Q_{min}\varphi(\rho) + Q_{max}(1 - \varphi(\rho)),$$

где  $Q_{min}$ ,  $Q_{max}$  – минимальная и максимальная теплота взрыва,  $\varphi(\rho)$  – функция зависящая от плотности ВВ, которая будет определена ниже.

### ЭКСПРЕСС МЕТОД РАСЧЕТА ТЕПЛОТЫ ВЗРЫВА

Расчет минимальной и максимальной теплот взрыва производился исходя из разницы энтальпий образования исходного конденсированного ВВ и суммы энтальпий его ПД, согласно формуле (1). Для широкого класса ВВ в зависимости от кислородного баланса, варьирующегося от резко отрицательного до положительного, в состав ПД входит оксид углерода (СО), диоксид углерода (СО<sub>2</sub>), вода в газовой фазе (Н<sub>2</sub>О), диоксид азота (NO<sub>2</sub>), углерод (С), молекулы азота (N<sub>2</sub>), водорода (Н<sub>2</sub>) и кислорода (O<sub>2</sub>). Данные по энтальпиям образования, взятые из [12] приведены в табл. 1.

Табл. 1. Сведения об энтальпиях образования ПД

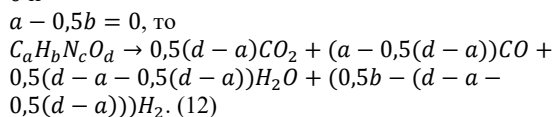
Наименование ПД	$\Delta H_{fdp}^0$ , кДж/моль
СО <sub>2</sub>	- 393,51
СО	- 110,53
Н <sub>2</sub> О (газ)	- 241,81
NO <sub>2</sub>	34,192
С	0
Н <sub>2</sub>	0
N <sub>2</sub>	0
O <sub>2</sub>	0

Исходя из вышеприведенной таблицы нами предложены способы нахождения состава ПД. Для

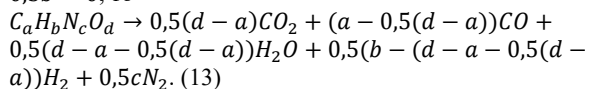
минимальной теплоты взрыва в состав ПД детонации входят СО, СО<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, С, Н<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>. В зависимости от элементного состава C<sub>a</sub>H<sub>b</sub>N<sub>c</sub>O<sub>d</sub> вещества реакции разложения могут быть записаны в следующем виде:

- Если  $d - 3a - 0,5b - 2c \geq 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + cNO_2 + 0,5(d - 2a - 0,5b - 2c)O_2$ . (2)
- Если  $d - 2a - 0,5b - 2c > 0$  и  $d - 3a - 0,5b - 2c < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + cNO_2 + 0,5(d - 2a - 0,5b - 2c)N_2$ .
- Если  $d - 3a - 0,5b - c \geq 0$  и  $d - 3a - 0,5b - 2c < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (3)
- Если  $d - 2a - 0,5b - 2c > 0$ ,  $d - 3a - 0,5b - c < 0$  и  $c - a > 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (4)
- Если  $d - a - 0,5b - 2c > 0$  и  $d - 2a - 0,5b - 2c < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (5)
- Если  $d - a - 0,5b - 2c = 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + cNO_2$ .
- Если  $d - a - 0,5b - c > 0$  и  $d - a - 0,5b - 2c < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (6)
- Если  $d - a - 0,5b > 0$ ,  $d - a - 0,5b - c \leq 0$  и  $a - b > 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (7)
- Если  $d - 3a - 0,5b \geq 0$  и  $d - 3a - 0,5b - c < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (8)
- Если  $d - 3a > 0$ ,  $d - 3a - 0,5b < 0$  и  $d - b > 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (9)
- Если  $d - 3a > 0$ ,  $d - 3a - 0,5b < 0$  и  $d - b = 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - 3a > 0$ ,  $d - 3a - 0,5b < 0$  и  $d - b < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5(d - 2a)H_2O + 0,5(b - d)H_2 + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - a - 0,5b > 0$ ,  $d - a - 0,5b - c < 0$  и  $a - 0,5b < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5(d - a)H_2O + (0,5b - 0,5(d - a))H_2 + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - a - b > 0$  и  $d - 3a = 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5(d - 2a - 0,5b)NO_2 + 0,5(c - 0,5(d - 2a - 0,5b))N_2$ . (10)
- Если  $d - a - b > 0$ ,  $d - 3a = 0$  и  $d - b > 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5bH_2O + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - a - b > 0$ ,  $d - 3a = 0$  и  $d - b = 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5(d - a)H_2O + 0,5(b - d + a)H_2 + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - a - b > 0$ ,  $d - 3a = 0$  и  $d - b < 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow aCO_2 + 0,5(d - a)H_2O + 0,5(b - 0,5(d - a))H_2 + 0,5cN_2$ .
- Если  $d - a - 0,5b - 2c > 0$ ,  $d - 2a - 0,5b - c < 0$ ,  $c - a + 0,5b > 0$  и  $a - 0,5b > 0$ , то  $C_aH_bN_cO_d \rightarrow 0,5(d - a)CO_2 + (a - 0,5(d - a))CO + 0,5bH_2O + 0,25(d - a - b)NO_2 + 0,5(c - 0,25(d - a - b))N_2$ . (11)

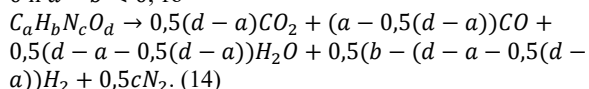
19. Если  $d - a - 0,5b - 2c > 0$ ,  $d - 2a - 0,5b - c < 0$ ,  $c = 0$  и



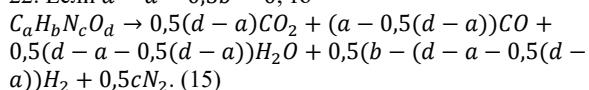
20. Если  $d - a - 0,5b > 0$ ,  $d - a - 0,5b - c < 0$  и  $a - 0,5b = 0$ , то



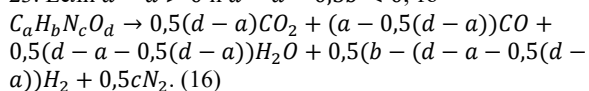
21. Если  $d - a - 0,5b > 0$ ,  $d - a - 0,5b - c < 0$ ,  $a - 0,5b > 0$  и  $a - b < 0$ , то



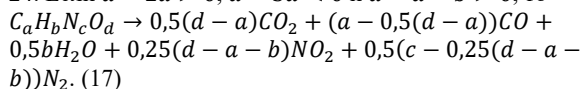
22. Если  $d - a - 0,5b = 0$ , то



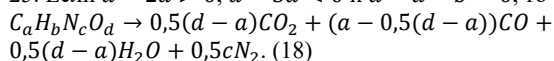
23. Если  $d - a > 0$  и  $d - a - 0,5b < 0$ , то



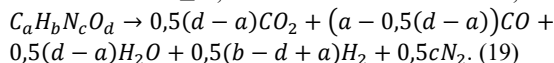
24. Если  $d - 2a > 0$ ,  $d - 3a < 0$  и  $d - a - b > 0$ , то



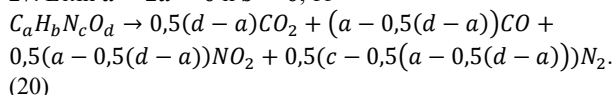
25. Если  $d - 2a > 0$ ,  $d - 3a < 0$  и  $d - a - b = 0$ , то



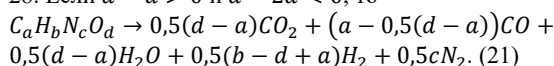
26. Если  $d - 2a \geq 0$ ,  $d - 3a < 0$  и  $d - a - b < 0$ , то



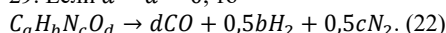
27. Если  $d - 2a = 0$  и  $b = 0$ , то



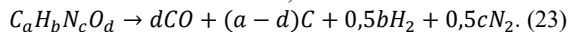
28. Если  $d - a > 0$  и  $d - 2a < 0$ , то



29. Если  $d - a = 0$ , то

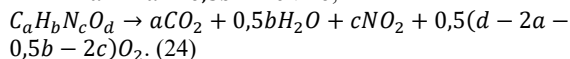


30. Если  $d > 0$  и  $d - a < 0$ , то

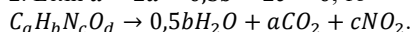


Для максимальной теплоты взрыва в состав ПД входят  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $NO_2$ ,  $C$ ,  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ . В зависимости от элементного состава  $C_aH_bN_cO_d$  вещества реакции разложения могут быть записаны в следующем виде:

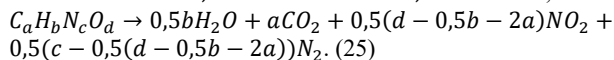
1. Если  $d - 2a - 0,5b - 2c > 0$ , то



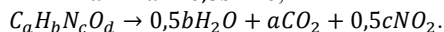
2. Если  $d - 2a - 0,5b - 2c = 0$ , то



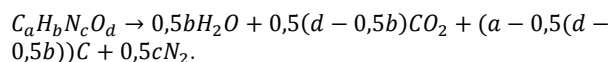
3. Если  $d - 2a - 0,5b > 0$  и  $d - 2a - 0,5b - 2c < 0$ , то



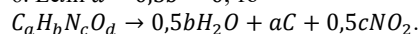
4. Если  $d - 2a - 0,5b = 0$ , то



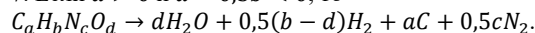
5. Если  $d - 0,5b > 0$  и  $d - 2a - 0,5b < 0$ , то



6. Если  $d - 0,5b = 0$ , то



7. Если  $d > 0$  и  $d - 0,5b < 0$ , то



Из приведенных формул видно, что для ВВ с избыточным содержанием кислорода продукты разложения, составляют  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $NO_2$ ,  $O_2$ , расчет минимальной и максимальной теплот взрыва идентичен (формулы 2 и 24,3-9 и 25). С уменьшением содержания кислорода в исходном ВВ изменяется состав ПД.

При расчете минимальной теплоты взрыва кислород, содержащийся в ВВ, расходуется в первую очередь на окисление углерода до  $CO$  и  $CO_2$ , далее на окисление атомов водорода до  $H_2O$ , и в последнюю очередь атомов азота до  $NO_2$ . При условии, когда содержание кислорода в ВВ недостаточно для полного окисления  $C$  до  $CO_2$  перераспределение атомов кислорода производится по следующему принципу. Кислород окисляет полностью весь содержащийся в ВВ углерод до  $CO$ , затем идет перераспределение углерода: оставшийся в ВВ кислород идет на окисление  $C$  до  $CO_2$ , а свободный углерод до  $CO$ . Далее в зависимости от содержания оставшегося кислорода могут выделяться следующие ПД:  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $N_2$  (формулы 11-21). Для ВВ с резко отрицательным кислородным балансом ПД (содержание кислорода в ВВ настолько малое, что не позволяет получить в ПД  $CO_2$ ) составляют  $CO$ ,  $C$ ,  $H_2$ ,  $N_2$  (формулы 22, 23).

При расчете максимальной теплоты взрыва кислород, содержащийся в ВВ, расходуется на образование продуктов в следующей последовательности:  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $NO_2$ .

Для веществ с отрицательным кислородным балансом при расчете минимальной теплоты взрыва основу ПД составляют  $CO$  и  $CO_2$ , в то время как для максимальной –  $H_2O$  и  $CO_2$ . Из таблицы 1 видно, что энтальпии образования  $CO$  ниже чем у  $H_2O$ , вследствие чего соответственно возникает разница между теплотами взрыва.

Следующим шагом по определению теплоты взрыва  $Q_{calc}$  является установление связи между минимальными и максимальными теплотами взрыва и функцией  $\varphi$ , зависящей от плотности ВВ, согласно выражению (2). Для определения функции  $\varphi(\rho)$  были использованы экспериментальные данные для ВВ, взятые из работ [15-22], которые приведены в таблице 2.

Табл. 2. Экспериментальные свойства ВВ

Наименование, брутто-формула	$\Delta$ , кДж/моль	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\varphi$ , кДж/кг	ссылка
HNB (гексанитробензол), $C_6N_6O_{12}$	200,0	916	916	[16]
BTNEN (бистринитроэтилнитрамин), $C_4H_4N_8O_{14}$	27,2	600	230	[15]
BTNEN (бистринитроэтилнитрамин), $C_4H_4N_8O_{14}$	27,2	000	188	[15]

	NG (нитроглицерин), C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>9</sub>	370,7	-	600	402	17]
	PETN (пентаэритриттетранитрат (ТЭН), C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>12</sub> )	523,0	-	730	730	18]
	PETN (пентаэритриттетранитрат (ТЭН), C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>12</sub> )	523,0	-	700	648	15]
	PETN (пентаэритриттетранитрат (ТЭН), C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>12</sub> )	523,0	-	00	439	15]
	TNAZ (тринитроазитидин), C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	36,4	-	830	777	19]
	RDX (циклотриметилентринитрам ин (гексоген)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	0,3	7	780	941	20]
0	RDX (циклотриметилентринитрам ин (гексоген)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	0,3	7	760	611	21]
1	RDX (циклотриметилентринитрам ин (гексоген)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	0,3	7	700	397	15]
2	RDX (циклотриметилентринитрам ин (гексоген)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	0,3	7	100	979	15]
3	HMX (циклотетраметилентетранит рамин (октоген)), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	4,9	7	890	758	16]
4	HMX (циклотетраметилентетранит рамин (октоген)), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	4,9	7	800	439	15]
5	HMX (циклотетраметилентетранит рамин (октоген)), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	4,9	7	300	063	15]
6	HMX (циклотетраметилентетранит рамин (октоген)), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	4,9	7	200	149	16]
7	HMX (циклотетраметилентетранит рамин (октоген)), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	4,9	7	30	066	16]
8	DINA (бис-(2- нитроксизид)-нитрамин), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>8</sub>	326,8	-	550	895	15]
9	DINA (бис-(2- нитроксизид)-нитрамин), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>8</sub>	326,8	-	00	477	15]
0	NQ (нитрогуанидин), C <sub>1</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	94,1	-	580	431	15]
1	NQ (нитрогуанидин), C <sub>1</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	94,1	-	080	054	15]
2	BTF (бензотрифуроксан), C <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	80,7	5	860	887	16]
3	BTF (бензотрифуроксан), C <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	80,7	5	760	397	15]
4	BTF (бензотрифуроксан), C <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	80,7	5	50	853	15]
5	ТТТ (NSRDX (ци клотриметилентринитрозо- амин)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	82,0	2	510	021	15]
6	ТТТ (NSRDX (ци клотриметилентринитрозо- амин)), C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	82,0	2	20	100	15]
7	DATB (диаминотринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>6</sub>	98,7	-	500	891	15]
8	DATB (диаминотринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>6</sub>	98,7	-	70	845	15]

9	РА (2,4,6- тринитрофенол (пикриновая кислота)), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	216,3	-	700	226	17]
0	РА (2,4,6- тринитрофенол (пикриновая кислота)), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	216,3	-	600	310	15]
1	РА (2,4,6- тринитрофенол (пикриновая кислота)), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	216,3	-	500	100	17]
2	РА (2,4,6- тринитрофенол (пикриновая кислота)), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	216,3	-	000	807	17]
3	РА (2,4,6- тринитрофенол (пикриновая кислота)), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	216,3	-	00	473	15]
4	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	600	310	15]
5	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	580	439	22]
6	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	550	226	17]
7	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	540	270	18]
8	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	533	263	16]
9	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	98	462	16]
0	TNT (2,4,6- тринитротолуол), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	74,5	-	50	389	17]
1	TNB (1,3,5- тринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	7,6	3	660	602	17]
2	TNB (1,3,5- тринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	7,6	3	600	310	15]
3	TNB (1,3,5- тринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	7,6	3	40	556	17]
4	TNB (1,3,5- тринитробензол), C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	7,6	3	20	598	15]
5	DNPP (N,N- динитропиперазин), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	53,1	-	510	268	15]
6	DNPP (N,N- динитропиперазин), C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	53,1	-	40	431	15]
7	Tetryl (N-метил-N- нитро-2,4,6- тринитроанилин), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>8</sub>	1,8	3	690	853	15]
8	Tetryl (N-метил-N- нитро-2,4,6- тринитроанилин), C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O <sub>8</sub>	1,8	3	80	017	15]

**РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ**

На основе экспериментальных данных по плотности ВВ и их теплотам взрыва  $Q_{exp}$ , путем оптимизации формулы (2) по методу наименьших квадратов определена функция  $\varphi(\rho)$ :

$$\varphi(\rho) = \alpha + \beta\rho + \frac{\gamma}{\rho},$$

где  $\alpha=1,564$ ,  $\beta=-0,0005565$ ,  $\gamma= -257,5$  – корреляционные коэффициенты.

Проведены расчеты теплоты взрыва конденсированных ВВ, приведенных в табл. 2. Результаты расчетов и экспериментальных данных, а также абсолютные и относительные отклонения представлены в табл. 3.

Табл. 3. Результаты расчетов теплоты взрыва ВВ и сравнение с экспериментальными данными

№	Наименование	ρ, кг/м³	Q <sub>эксп</sub> , кДж/кг	Q <sub>расч</sub> , кДж/кг	Относит. отклонение, %	Абсолютное отклонение, кДж/кг	
						Q <sub>расч</sub> - Q <sub>эксп</sub>	Q <sub>эксп</sub> - Q <sub>расч</sub>
1	NB	916	230	916	5,4	4	31
		600	142	230	1,7	-	88
2	TNEN	000	100	188	1,7	-	88
		600	210	402	0,3	192	-
3	ETN	730	168	730	6,7	8	43
		700	161	648	1,9	3	51
		00	012	439	0,5	3	57
4	NAZ	830	106	777	7,5	9	32
		780	861	941	1,3	-	80
5	DX	760	852	611	3,4	1	24
		700	827	397	0,8	0	43
		100	604	979	2,6	5	62
6	MX	890	844	758	5,1	-	86
		800	806	439	7,6	7	36
		300	608	063	0,8	5	54
		200	573	149	2,8	8	42
		30	463	066	8,7	7	39
7	INA	550	360	895	5,9	5	46
		00	074	477	3,3	7	59
8	Q	580	188	431	7,1	-	243
		080	973	054	2,7	-	81
9	TF	860	186	887	1,5	9	29
		760	088	397	2,8	1	69
		50	418	853	1,6	5	56
10	TT	510	535	021	9,7	-	486
		20	964	100	3,3	-	136
11	ATB	500	468	891	10,9	-	423
		70	853	845	3,0	-	8
12	A	700	306	226	9,1	-	80
		600	201	310	2,5	-	109
		500	100	100	-	0	-

4	NT	T	000	663	807	3,8	144	-
			00	602	473	7,3	9	12
			600	944	310	8,5	-	366
			580	919	439	11,7	-	520
			550	881	226	8,1	-	345
			540	869	270	9,4	-	401
			533	860	263	9,5	-	403
			98	284	462	5,1	-	178
			50	180	389	6,1	-	209
			5	NB	T	660	702	602
600	627	310				3,7	7	31
40	826	556				6,7	0	27
20	822	598				2,6	4	22
6	NPP	D	510	541	268	17,0	-	727
			40	793	431	18,6	-	638
7	etryl	T	690	918	853	3,1	-	65
			80	273	017	4,6	6	25

Из табл. 3 следует, что максимальные отклонения расчетных от экспериментальных данных по теплотам взрыва получаются для N,N-динитропиперазин (DNPP), которые составляют -18,6% и -727 кДж/кг, соответственно. Среднеквадратичные абсолютные и относительные отклонения составляют 377 кДж/кг и 8,1 % для всего набора перечисленных в таблице 3 ВВ. На рис. 1 и 2 приведены зависимости расчетной теплоты взрыва от экспериментальной и относительного отклонения от плотности ВВ.

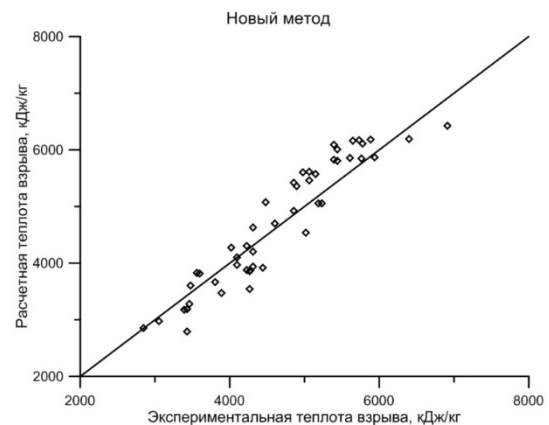


Рис. 1. Зависимость расчетной теплоты взрыва от экспериментальной для предложенного метода

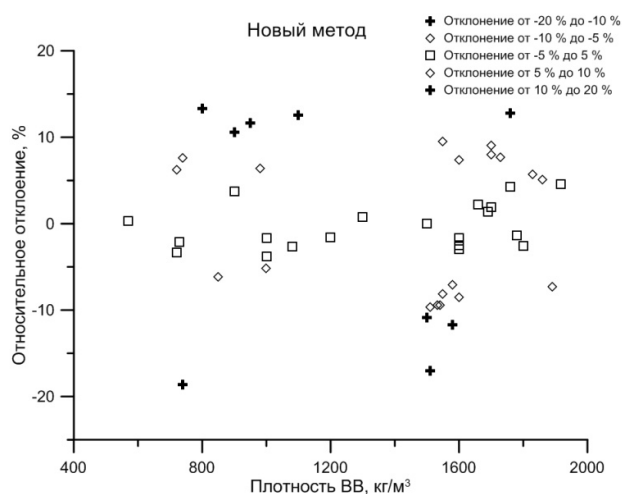


Рис. 2. Зависимость относительного отклонения от плотности ВВ для предложенного метода

Из рис. 1 и 2 видно, что расчетные и экспериментальные данные удовлетворительно совпадают друг с другом:

- для 9 точек из 48 разбросы превышают 10 %;
- для 39 точек – отклонения находятся в пределах  $\pm 10\%$ ;
- для 20 точек – в пределах  $\pm 5\%$ .

В качестве объекта сравнения выбран экспресс-метод, предложенный Пепекиным В.И. [15]. В табл. 4 приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных для набора ВВ, представленных в табл. 2.

Табл. 4. Результаты расчетов теплоты взрыва ВВ по методу Пепекина и сравнение с экспериментальными данными

Наименование	H, кг/м <sup>3</sup>	H, кДж/кг	H, кДж/кг	Относит. отклонение, %	Абсолютное отклонение, кДж/кг
NB	916	928	916	2	2
TNEN	600	263	230	9,38	0,33
	000	263	188	29,40	0,75
G	600	277	402	1,9	1,29
ETN	730	732	730	0,03	0,02
	700	719	648	10,2	1,7
	00	360	439	1,5	0,79
NAZ	830	636	777	2,4	1,41
DX	780	298	941	10,8	0,643
	760	285	611	5,8	0,327
	700	244	397	2,8	0,153
	100	844	979	2,7	0,135
MX	890	317	758	7,7	0,441

		800	257	439	3,3	182
		300	927	063	2,7	136
		200	861	149	5,6	288
		30	550	066	10,2	516
INA	D	550	902	895	2	7
	00	425	477	1,2	52	
Q	N	580	885	431	15,9	546
	080	618	054	14,3	436	
0 TF	B	860	655	887	3,9	232
		760	555	397	9	58
		50	750	853	2,1	104
1 TT	T	510	262	021	55,0	2759
	20	457	100	40,1	1643	
2 ATV	D	500	565	891	8,4	326
	70	825	845	0,7	20	
3 A	P	700	254	226	7	8
		600	180	310	0	130
		500	106	100	1	6
		000	734	807	1,9	73
		00	660	473	4	87
		600	188	310	26,0	1122
4 NT	T	580	197	439	28,0	1242
		550	210	226	24,0	1016
		540	213	270	24,8	1057
		533	216	263	24,6	1047
		98	124	462	9,8	338
		50	039	389	10,3	350
5 NB	T	660	598	602	0,1	4
		600	542	310	4	32
		40	738	556	1	82
		20	720	598	8	22
6 NPP	D	510	030	268	52,4	2238
		40	208	431	35,6	1223
7 etryl	T	690	672	853	3,7	181
		80	052	017	9	5

Среднеквадратичные абсолютные и относительные отклонения составляют 837 кДж/кг и 18,4 % для всего набора перечисленных в табл. 4 ВВ. На рис. 3 и 4 приведены зависимости расчетной теплоты взрыва по методу Пепекина от экспериментальной и относительного отклонения от плотности ВВ.

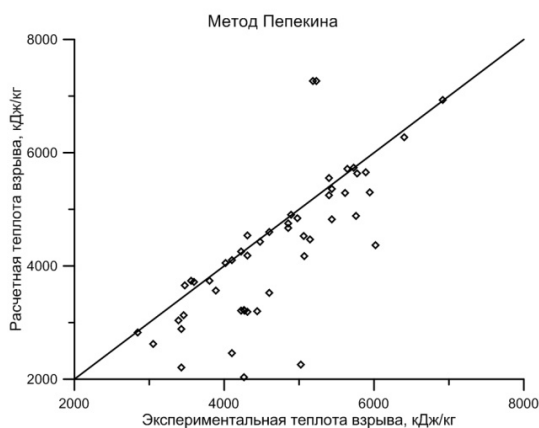


Рис. 3. Зависимость расчетной теплоты взрыва от экспериментальной для метода Пепекина

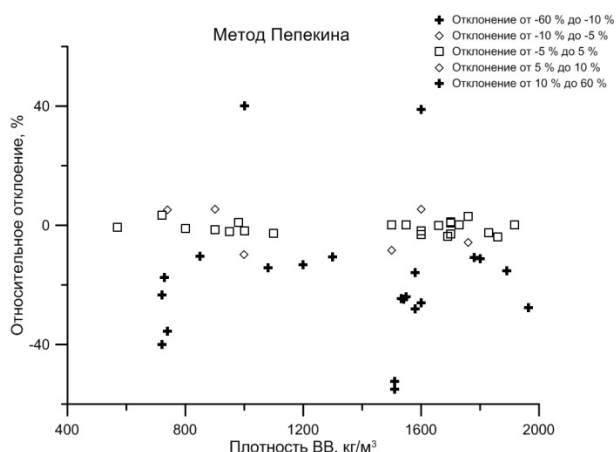


Рис. 4. Зависимость относительного отклонения от плотности ВВ для метода Пепекина

Из рис. 3 и 4 видно, что расчетные и экспериментальные данные значительно хуже совпадают друг с другом (более чем в 2 раза) по сравнению с новым методом:

- для 22 точек из 48 разбросы находятся в пределах свыше  $\pm 10\%$ ;
- для 28 точек – в пределах  $\pm 10\%$ ;
- для 22 точек – в пределах  $\pm 5\%$ .

На рис. 5 приведены зависимости расчетной теплоты взрыва по методам, предложенным в статье и Пепекиным от экспериментальной.

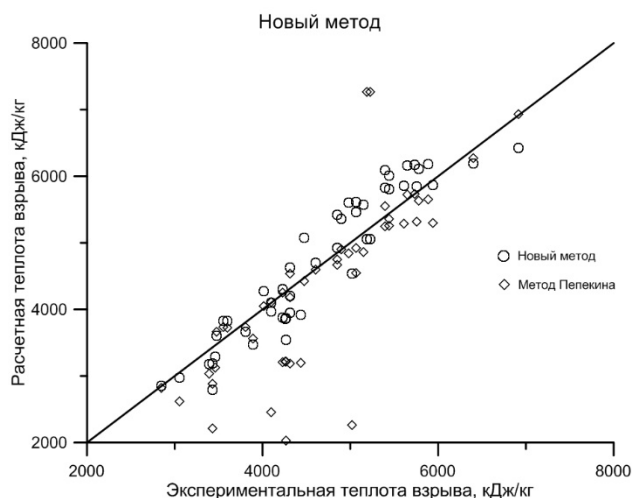


Рис. 5. Зависимости расчетной теплоты взрыва по методам предложенным в статье и Пепекиным от экспериментальной

По рис. 5 видно, что предложенный метод дает меньшие разбросы с экспериментальными данными по сравнению с методом Пепекина.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен экспресс-метод расчета теплоты взрыва для конденсированных ВВ  $C_dH_bN_cO_d$  типа, в котором в качестве входных параметров задается минимальный набор, состоящий из элементного состава, плотности, теплоты образования ВВ и ПД. Особенностью нового метода является учет плотности веществ, минимальной и максимальной теплоты взрыва. Проведенные расчеты для 17 ВВ, которые охватывают широкий спектр по кислородному балансу (от резко отрицательного до положительного) при различных плотностях, показали эффективность предложенного метода. Среднеквадратичные абсолютное и относительное отклонения расчетных от экспериментальных данных составили 372 кДж/кг и 8,1 %, соответственно. Проведено сравнение с методом, разработанным Пепекиным В.И., которое показало лучшую точность (в 2,3 раза) при расчете теплоты взрыва.

Работа выполнена в рамках проекта по бюджетному финансированию № 0308–2021–0005 при использовании приборной базы Бийского регионального центра коллективного пользования СО РАН (ИПХЭТ СО РАН, г. Бийск).

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Андреев, К.К. Теория взрывчатых веществ / К.К. Андреев, А.Ф. Беляев – М.: Оборонгиз, 1960. – 596 с.
2. Баум, Ф.А. Физика взрыва / Ф.А. Баум, Л.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. – М.: Наука, 1975. – 704 с.
3. Зельдович, Я.Б. Теория детонации / Я.Б. Зельдович, А.С. Компанец – М.: Гостехиздат, 1955. – 286 с.
4. Дремин, А.Н. Детонационные волны в конденсированных средах / А.Н. Дремин, С.Д. Савров, В.С. Трофимов, К.К. Шведов – М.: Наука, 1970. – 164 с.
5. Xiong, W. "The Detonation Parameters of New Powerful Explosives Compounds Predicted with a Revised VLW equation of

State,” 9-th Symposium (International) on Detonation, Portland, Oregon, pp. 190-194, 1989.

6. Мейдер, Ч. Численное моделирование детонации: Пер. с англ / Ч. Мейдер – М.: Мир, 1985. – 384 с.

7. Chirat, R. and G.A. Pittion-Rossillon “Theoretical Equation of State for Detonation Product: Application to Twelve CHNO Explosives” *Combustion and Flame*, № 45, pp. 147-159, 1982.

8. Ree, F.A. “Statistical Mechanical Theory of Chemically Reacting Multiplas Mixture: Application to the Detonation Properties of PETN,” *Journal of Chemical Physics*, V. 81, № 3, pp. 1251-1263, 1984.

9. Duraes, L., J. Campos and A. Portugal “Thermodynamical prediction of combustion and detonation properties using modified THOR code,” *Proceedings 31<sup>st</sup> International Conference of ICT*, Karlsruhe, Germany, pp. 129, 2000.

10. Fried, L.E. and P.C. Souers “BKWC: An empirical BKW parametrization based on cylinder test data” *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, Vol. 21, No.4, pp. 215-223, 1996.

11. Suceska, M. EXPL05 – computer program for calculation of detonation parameters / M. Suceska // Proc. 32<sup>nd</sup> Int. Conf. of ICT. Karlsruhe, Germany, 2001. P. 110.

12. Victorov, S.B. et al. “Thermodynamic TDS code: Application to detonation properties of condensed explosives,” *32nd International Annual Conference of ICT*. Karlsruhe, Germany, pp. 69, 2001.

13. Keshavarz, M.H. “Estimating of Detonation and Detonation Velocities of Aromatic Energetic Compounds,” *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, № 3, pp. 448-453, 2008.

14. Keshavarz, M.H. “A Simple Way to Predict Heats of Detonation of Energetic Compounds only from Their Molecular Structures,” *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, № 3, pp. 448-453, 2008.

15. Пепекин, В.И. Теплоты взрывчатого разложения индивидуальных ВВ / В.И. Пепекин, М.Н. Махов, Ю.А. Лебедев // Докл. АН СССР, 1977. – Т. 232. – № 4. – С. 852-855.

16. Ornellas, D.L. Calorimetric determinations of the heat and products of detonation for explosives / D.L. Ornellas // Lawrence Livermore Laboratory. Technical Report UCRL-52821. Livermore, CA, USA. 1982.

17. Апин, А.Я. Экспериментальное определение теплоты взрыва / А.Я. Апин, А.Ф. Беляев, Г.С. Сосонова // Физика взрыва. 1953. – Изд-во АН СССР, – № 2. – С. 3-26.

18. Dobratz, B.M. “LLNL explosives handbook – properties of chemical explosives and explosive simulants,” Report UCRL-52997, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, 1985.

19. Simpson, R.L., R.G. Garza, M.F. Foltz, D.L. Ornellas and P.A. Urtiew “Characterization of TNAZ,” Report UCRL-ID-119672. CA, USA. 1994.

20. Апин, А.Я. О полном использовании энергии взрыва / А.Я. Апин, Н.Ф. Велина, Ю.А. Лебедев // Прикладная механика и техническая физика. 1962. – №5. – С. 96-106.

21. Ашаев, В.К. К вопросу о стационарной детонации зарядов конечной длины / В.К. Ашаев, Г.С. Доронин, В.С. Жученко // Физика горения и взрыва. 1985. – Т. 21. – № 1. – С. 127-130.

22. Trzciński, W. and J. Paszula “On some methods of determination of the detonation energy of explosives,” *New Trends in Research of Energetic Materials, 9<sup>th</sup> Seminar*, Pardubice. Czech Republic, pp. 748-755, 2006.

Трубников Андрей Александрович – к.т.н., начальник группы сектора 235, Федеральное государственное унитарное предприятие «Федеральный центр двойных технологий «Союз» (ФГУП «ФЦДТ «Союз»), тел: 8 (495) 551-72-36, e-mail: trubnikovandrey1986@mail.ru.

Гордеев Владимир Вячеславович – младший научный сотрудник лаборатории № 4, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), тел. (3854) 30-18-66, e-mail: gordeev.vladimir92@yandex.ru

Вакутин Алексей Геннадьевич – к.т.н., старший научный сотрудник лаборатории физико-химических основ создания

энергетических конденсированных систем, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИПХЭТ СО РАН), тел. (3854) 30-16-71, e-mail: alex-wakutin@mail.ru.



# EXPRESS METHOD FOR CALCULATING THE SPECIFIC HEAT OF EXPLOSIVE TRANSFORMATION OF CHNO CONDENSED EXPLOSIVES

A.A. Trubnikov<sup>1</sup>, V.V. Gordeev<sup>2</sup>, A.G. Vakutin<sup>2</sup>

<sup>1</sup> FSUE "The Federal center for dual-use technologies "Soyuz"

<sup>2</sup> Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies SB RAS, Biysk

**Abstract** – An express method has been developed for calculating the explosion heat of condensed explosives with different oxygen balance from sharply negative to positive. The proposed method uses a minimal set of input data consisting of the elemental composition, enthalpy density of the formations of the initial explosive and its detonation products. The calculation of the heat of explosion is based on the correlation between the minimum and maximum heat of explosion with the density of a high-energy compound. The article describes in detail the decomposition reactions of explosives for cases with minimum and maximum explosion heats. Calculations of the heat of explosion according to the new method and the Pepekin method are carried out according to the explosives database presented in the article, and comparison results are also presented, which showed a better accuracy (2.3 times) of the proposed method.

*Index terms:* heat of explosion, condensed explosives, elemental composition, enthalpy of formation, oxygen balance.

## REFERENCES

1. Andreev, K.K. Theory of explosives / K.K. Andreev, A.F. Belyaev - M.: Oborongiz, 1960. - 596 p
2. Baum, F.A. Physics of explosion / F.A. Baum, L.P. Orlenko, K.P. Stanyukovich, etc. - M.: Nauka, 1975– - 704 p.
3. Zeldovich, Ya.B. Theory of detonation / Ya.B. Zeldovich, A.S. Companeets - M.: Gostekhizdat, 1955– - 286 p.
4. Dremmin, A.N. Detonation waves in condensed media / A.N. Dremmin, S.D. Savrov, V.S. Trofimov, K.K. Shvedov - M.: Nauka, 1970. - 164 p.
5. Xiong V. Detonation parameters of New powerful explosives predicted using the Revised equation of state VLW /W.Xiong//9th Symposium/ (Intern) by detonation. - 1989. - p.190-194.
6. Meider, Ch. Numerical simulation of detonation: Translated from English / Ch. Meider -M.: Mir, 1985. - 384 p.
7. Chirat, R. Theoretical equation of state of the detonation product: Application to twelve explosives CHNO/ R.Chirat, G.A. Pittion-Rossillon// Gorenje i flame, 1982. - No. 45. - pp.147-159.
8. Ri, F. A. Statistical mechanical theory of multilayer chemically reacting mixtures: application to the detonation properties of PETN/ F. A. Ri// Journal of chemical physics, 1984. - V. 81. - No. 3. - S. 1251-1263.
9. Duraes, L. prediction of Thermodynamic properties of combustion and detonation using a modified code of THOR/ L. Duraes, John. Campos, A. Portugal// Proc. 31st int. Conf. on ICT. Karlsruhe, Germany. 2000. p.129.
10. Fried, L.E. BKWC: Empirical parametrization of BKW based on cylinder test data / L. E. Fried, P. S. Sowers// Fuel, explosives, pyrotechnics. - 1996. - Volume 21. - No. 4. - Pp.215-223.
11. Sucheska, M. EXPL05 - computer program for calculating detonation parameters/ M.Sucheska// Issue 32 int. Conf. on ICT. Karlsruhe, Germany, 2001. page 110.
12. Viktorov, S.B. Thermodynamic code TDS: application to detonation properties of condensed explosives/ S.B.Viktorov, S.A.Gubin, I.V.Maklashova, I.I.Revyakin// 32nd International Annual Conference on ICT. Karlsruhe, Germany. 2001. p.69.
13. Keshavarz, M.H. Evaluation of detonation and detonation rates of aromatic energy compounds/ M.H. Keshavarz// Fuel, explosives, pyrotechnics, 2008. - No. 3. - pp.448-453.
14. Keshavarz, M.H. A simple way to predict the heat of detonation of energy compounds only by their molecular structures / M.H. Keshavarz// Fuel, explosives, pyrotechnics, 2008. - No. 3. - pp.448-453.
15. Pepekin, V.I. Heats of explosive decomposition of individual explosives / V.I. Pepekin, M.N. Makhov, Yu.A. Lebedev // Dokl. USSR Academy of Sciences, 1977. - Vol. 232. - No. 4. - pp. 852-855.
16. Ornellas, D.L. Calorimetric determinations of heat and detonation products for explosives/ D.L.Ornellas// Lawrence Livermore Laboratory. Technical Report UCRL-52821. Livermore. California, USA, 1982.
17. Apin, A.Ya. Experimental determination of the heat of explosion / A.Ya. Apin, A.F. Belyaev, G.S. Sosonova // Physics of explosion. 1953. - Publishing House of the USSR Academy of Sciences, No. 2. - pp. 3-26.
18. Dobratz, B.M. Handbook of explosives LLNL - properties of chemical explosives and explosives simulators / B.M.Dobratz, P.K. Crawford// UCRL Report-52997. Lawrence Livermore National Laboratory. Livermore, California, USA, 1985.
19. Simpson, R.L. Characteristics of TNAZ / R.L. Simpson, R. G. Garza, M. F. Foltz, D.L. Ornellas, P.A. Urtu// Report UCRL-ID-119672. CA. USA. 1994.
20. Apin, A.Ya. On the full use of explosion energy / A.Ya. Apin, N.F. Velina, Yu.A. Lebedev // Applied Mechanics and technical physics. 1962. - No. 5. - pp. 96-106.
21. Ashaev, V.K. On the question of stationary detonation of charges of finite length / V.K. Ashaev, G.S. Doronin, V.S. Zhuchenko // Physics of gorenje i explosion. 1985. - Vol. 21. - No. 1. - pp. 127-130.
22. Tshchinsky V. On some methods for determining the detonation energy of explosives / V.Trzhinsky, Ya. Paszula// New trends in Energy Materials Research, 9th Seminar. Pardubice. Czech Republic, 2006. - pp.748-755.

*Andrey A. Trubnikov - Candidate of Technical Sciences, Head of Sector 235 Group, Federal State Unitary Enterprise "Federal Center for Dual Technologies "Soyuz" (FSUE "FCDT "Soyuz"), tel.: 8 (495) 551-72-36, e-mail: trubnikovandrey1986@mail.ru.*

*Gordeev Vladimir Vyacheslavovich: Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (IPCET SB RAS), research scientist at the Laboratory of Physicochemical Bases of Energetic Condensed Systems, 659322*

*Biysk, Altai krai, ul. Socialisticheskaya 1. E-mail: gordeev.vladimir92@yandex.ru. Work phone: 8-(3854)-30-18-66.*

*Vakutin Alexei Gennadevich – Candidate of Engineering Sciences and staff scientist, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (IPCET SB RAS), tel.: (3854)301671, e-mail: alex-wakutin@mail.ru.*