

Рост и гибель горячих точек из атомистического моделирования АВ вещества

С.А.Мурзов^{1,2}, В. В. Жаховский²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л.Духова, Росатом

Моделирование горячих точек с использованием информации о химических реакциях полученной из атомистических расчетов является актуальной задачей [1,2,3]. Горячие точки созданные за доли пикосекунд в центре цилиндрического образца с температурой, достаточной для развития экзотермических реакций за десятки пикосекунд, промоделированы с использованием метода молекулярной динамики в АВ модельном взрывчатом веществе [4,5]. Для имитации изолированности горячей точки в бесконечном сплошном материале используются граничные условия поглощения волн выходящих за пределы моделируемой области.

Варьирование размеров области разогрева (горячей точки) регулирует время прихода волны разрежения в центр пятна, где разложение происходит изохорически. Показано, что существует критический радиус данного типа горячих точек, который соответствует равенству характерного времени изохорического разложения и времени разрежения пятна. В этом случае разложение энергетического материала переходит в ускоренный режим с последующим распространением фронта дефлаграции. С уменьшением размера пятна, горячая точка затухает вследствие более раннего прихода волны разрежения, которая адиабатически сбрасывает температуру и останавливает разложение до начала существенного энерговыделения в экзотермических реакциях.

Литература

1. *Bowden, F.P. Yoffe, A.D.* Hot Spots and the Initiation of Explosion // Third symposium on combustion, flame and explosion phenomena - 1948- 70, 551-560
2. *Mader C.L.* Numerical modeling of explosives and propellants. 3rd edition, CRC Press, 2007, 528 p.
3. *Shan Tzu-Ray, Thompson, A.P.* Shock-induced hotspot formation and chemical reaction initiation in PETN containing a spherical void // J.Phys.: Conference Series - 2014 - 500, 172009
4. *Brenner D.W., Robertson D.H., Elert M.L., White C.T.* Detonations at nanometer resolution using molecular dynamics // Phys. Rev. Lett. -1993 - 70, 2174.
5. *Zhakhovsky V.V., Budzevich M.M., Landerville A.C., Oleynik I.I., White C.T.* Laminar, cellular, transverse, and multi-headed pulsating detonations in condensed phase energetic materials from molecular dynamics simulations // Phys. Rev. E. - 2014 - 90, 033312.