

## ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 534.222.2

### РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ ВЗРЫВЧАТОГО ВЕЩЕСТВА ТКХ-50

© 2021 г. Я. О. Иноземцев<sup>1</sup>, А. В. Иноземцев<sup>1</sup>, М. Н. Махов<sup>1\*</sup>,  
А. Б. Воробьев<sup>1</sup>, Ю. Н. Матюшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова  
Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: [mn13makhov@yandex.ru](mailto:mn13makhov@yandex.ru)

Поступила в редакцию 13.04.2021;

после доработки 30.04.2021;

принята в печать 20.05.2021

Анализ литературных данных показал, что оценки детонационных характеристик взрывчатого вещества 5,5'-бистетразол-1,1'-диолята дигидроксиламмония (ТКХ-50) были выполнены авторами ряда публикаций на основе завышенного расчетного значения стандартной энтальпии образования этого соединения. В Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН путем тщательно проведенных калориметрических измерений была получена существенно более низкая величина энтальпии образования ТКХ-50. С использованием этого значения были выполнены расчеты скорости и давления детонации, теплоты взрыва и метательной способности ТКХ-50. Из результатов оценок следует, что рассматриваемое соединение относится к категории взрывчатых веществ, обладающих умеренной мощностью.

*Ключевые слова:* взрывчатое вещество, энтальпия образования, скорость детонации, давление детонации, теплота взрыва, метательная способность.

DOI: 10.31857/S0207401X21120074

В работах [1–4] соединение 5,5'-бистетразол-1,1'-диолята дигидроксиламмония (ТКХ-50) характеризуется как весьма перспективное взрывчатое вещество (ВВ), которое может быть использовано в качестве более мощной альтернативы гексогену. Утверждается также, что это соединение обладает более низкой чувствительностью к внешним воздействиям, чем гексоген и октоген, а метод синтеза позволяет создать промышленное производство этого ВВ. Однако, как показали дальнейшие исследования, параметры детонации ТКХ-50 были оценены авторами [1–4] на основании завышенного расчетного значения стандартной энтальпии образования этого вещества:  $446.6 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ .

В результате тщательно проведенных калориметрических измерений в Федеральном исследовательском центре химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН (ФИЦ ХФ РАН) была получена существенно более низкая величина энтальпии образования ТКХ-50, а именно:  $(194.1 \pm 0.9) \text{ кДж/моль}$  [5]. В связи с тем, что вещество ТКХ-50 вызывает значительный интерес у исследователей и разработчиков взрывчатых материалов, цель настоящей работы заключалась, во-первых, в анализе влияния различий в значениях энтальпии образования на детонационные характеристики ТКХ-50, а во-вто-

рых, в оценке взрывчатых свойств этого соединения в сравнении с параметрами ряда известных ВВ.

В табл. 1 представлены значения детонационных характеристик для ТКХ-50 и с целью сравнения еще для четырех известных ВВ разной мощности. Данные по плотности  $\rho$  приведены в работе [1]. Значения стандартной энтальпии образования ВВ, использованные в работах [1–4], обозначены как  $\Delta H_{f1}^{\circ}$ . Скорости детонации рассчитаны на основе значений  $\Delta H_{f1}^{\circ}$  с использованием термодинамических кодов: EXPLO5.05 –  $D_1$  [1], EXPLO5 V6.01 –  $D_2$  [2], СНЕЕТАН 2.0 –  $D_3$  [3] и EXPLO5 V6.02 –  $D_4$  [4]. Величина  $D_5$  оценивалась по методу Камлета–Джейкобса [6]. Остальные данные получены расчетным путем авторами настоящей работы с использованием значений энтальпии образования ВВ, измеренных в ФИЦ ХФ РАН ( $\Delta H_f^{\circ}$ ). Скорость детонации,  $D$ , и давление в точке Чепмена–Жуге,  $P_{CJ}$ , рассчитывали по методу Камлета–Джейкобса [6]. Для расчета теплоты взрыва  $Q$  ( $\text{H}_2\text{O}$  – газ) использовался способ, предложенный в работе [7].

Метательная способность (МС) является одной из важнейших характеристик ВВ. В предлагаемой работе рассматривается МС, соответствующая условиям испытаний по методу М-40. Эта

Таблица 1. Значения детонационных характеристики рассматриваемых ВВ

| ВВ       | Формула              | $\rho$ ,<br>г/см <sup>3</sup> | $\Delta H_{f1}^\circ$ | $\Delta H_f^\circ$ | $D_1$ | $D_2$ | $D_3$ | $D_4$  | $D_5$ | $D$  | $P_{СД}$ ,<br>ГПа | $Q$ ,<br>МДж/кг | $\eta$ , % |
|----------|----------------------|-------------------------------|-----------------------|--------------------|-------|-------|-------|--------|-------|------|-------------------|-----------------|------------|
|          |                      |                               | кДж/моль              |                    |       |       |       |        |       |      |                   |                 |            |
| ТНТ      | $C_7H_5O_6N_3$       | 1.648                         | -55.5                 | -62.7              | 7.459 | 7.287 | —     | —      | 7.01  | 7.00 | 20.6              | 4.43            | 75.5       |
| Гексоген | $C_3H_6O_6N_6$       | 1.806                         | 86.3                  | 70.7               | 8.983 | 8.834 | 8.965 | —      | 8.85  | 8.82 | 34.6              | 5.67            | 96.0       |
| Октоген  | $C_4H_8O_8N_8$       | 1.904                         | 116.1                 | 85.8               | 9.221 | 9.175 | 9.339 | —      | 9.18  | 9.15 | 38.3              | 5.70            | 100.0      |
| CL-20    | $C_6H_6O_{12}N_{12}$ | 2.035                         | 365.4                 | 374.9              | 9.455 | 9.674 | —     | —      | 9.59  | 9.60 | 43.9              | 6.14            | 106.1      |
| ТКХ-50   | $C_2H_8O_4N_{10}$    | 1.877                         | 446.6                 | 194.1              | 9.698 | 9.766 | 9.656 | 10.026 | 9.19  | 8.75 | 34.8              | 4.64            | 91.8       |

методика в нашей стране принята в качестве базовой [8]. В методе М-40 исследуется процесс ускорения стальной пластины диаметром 40 и толщиной 4 мм, метаемой с торца цилиндрического заряда диаметром и толщиной 40 мм в канале толстостенной стальной оболочки. Мерой МС служит скорость пластины на расстоянии 40 мм от торца заряда. Относительная скорость пластины,  $\eta$  (эталон — октоген при плотности 1.904 г/см<sup>3</sup>) оценивалась способом, предложенным в работе [9].

Как следует из табл. 1, в случае гексогена, октогена и CL-20 различие в результатах расчета значений  $D_1$ ,  $D_2$ ,  $D_3$  и  $D_5$ , с одной стороны, и  $D$ , с другой, невелико, так как  $\Delta H_{f1}^\circ$  и  $\Delta H_f^\circ$  для этих ВВ различаются на относительно небольшую величину. Напротив, в случае ТКХ-50 наблюдается значительное расхождение значений скоростей, рассчитанных с использованием двух разных величин энтальпии образования. Кроме того, согласно значениям  $D_1$ ,  $D_2$ ,  $D_3$  и  $D_4$ , рассчитанным по термодинамическим кодам, вещество ТКХ-50 по скорости детонации должно не только превосходить гексоген и октоген, но и, по крайней мере, не уступать CL-20. При этом обращает на себя внимание очень высокое значение  $D_4$  для ТКХ-50 ( $\approx 10$  км/с). Более низкая скорость для ТКХ-50 получена по методу Камлета–Джейкобса [6], хотя и в этом случае величина  $D_5$  остается на уровне значения скорости детонации октогена.

В соответствии с результатами расчета, выполненного с использованием измеренных в ФИЦ ХФ РАН энтальпий образования  $\Delta H_f^\circ$ , ТКХ-50 по скорости детонации  $D$  незначительно уступает гексогену, но заметно проигрывает октогену и, в особенности, веществу CL-20. По давлению детонации это соединение близко к гексогену. Однако МС и теплота взрыва у ТКХ-50 ниже, чем у гексогена. Более того, по теплоте взрыва ТКХ-50 приближается к ТНТ, веществу с относительно невысокими параметрами детонации.

Для повышения работоспособности ВВ широко используются энергетические добавки. Наиболее распространенной добавкой такого рода

является порошкообразный алюминий. Известно, что введение алюминия в состав с ВВ приводит к увеличению теплоты взрыва и МС. Наибольший эффект достигается для ВВ с положительным кислородным балансом [10–12]. Кислородный баланс CL-20, гексогена (октогена) и ТКХ-50 равен –11%, –21.6% и –27.1% соответственно. В связи с этим не следует ожидать более значительного повышения теплоты взрыва и МС при добавлении алюминия к ТКХ-50, чем в случае, когда алюминий вводится в состав с гексогеном, октогеном и CL-20.

Таким образом, результаты сравнения данных, представленных в табл. 1, подчеркивают необходимость использования при расчетах взрывчатых свойств ВВ надежных значений энтальпии образования как одной из их важнейших характеристик. Некоторые выводы, сформулированные авторами работ [1–4] по поводу высокой мощности ТКХ-50, не подтверждаются результатами расчета, проведенного на основе измеренного в ФИЦ ХФ РАН значения энтальпии образования этого ВВ.

Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по темам 0082-2019-0016 “Создание высокоэнергетических материалов нового поколения и исследование их характеристик” (регистрационный номер АААА-А18-118031490034-6) и 0082-2019-0006 “Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами” (регистрационный номер АААА-А21-121011990037-8).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fischer N., Fischer D., Klapötke T.M. et al. // J. Mater. Chem. 2012. V. 22. P. 20418; <https://doi.org/10.1039/c2jm33646d>
2. Golubev V.K., Klapötke T.M. // Proc. 17th Sem. on New Trends in Research of Energetic Materials. Pardubice: University of Pardubice, 2014. P. 672.
3. Klapötke T.M., Witkowski T.G., Wilk Z., Hadzik J. // Proc. 19th Sem. on New Trends in Research of Ener-

- getic Materials. Pardubice: University of Pardubice, 2016. P. 642.
4. *Golubev V.K., Klapötke T.M.* // Proc. 20th Sem. on New Trends in Research of Energetic Materials. Pardubice: University of Pardubice, 2017. P. 152.
  5. *Kon'kova T.S., Matyushin Yu.N., Miroshnichenko E.A. et al.* // Proc. 47th Intern. Annual Conf. of ICT. Pfinzthal: Fraunhofer Institute for Chemical Technology, 2016. P. 90.
  6. *Kamlet M.J., Jacobs S.J.* // J. Chem. Phys. 1968. V. 48. P. 23.
  7. *Махов М.Н., Архипов В.И.* // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25. № 3. С. 87.
  8. *Андреев С.Г., Бабкин А.В., Баум Ф.А. и др.* Физика взрыва (в 2-х томах) / Под ред. Орленко Л.П. Т. 1. М.: Физматлит, 2002.
  9. *Махов М.Н.* // Proc. 32nd Intern. Annual Conf. of ICT. Pfinzthal: Fraunhofer Institute for Chemical Technology, 2001. P. 97.
  10. *Махов М.Н.* // Горение и взрыв. 2019. Т. 12. № 1. С. 122;  
<https://doi.org/10.30826/CE19120115>
  11. *Махов М.Н.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 1. С. 23;  
<https://doi.org/10.31857/S0207401X20010094>
  12. *Махов М.Н.* // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 9. С. 71;  
<https://doi.org/10.31857/S0207401X20090083>