

Перспективные составы для капсуля оптического детонатора

М. В. Ананьева, А. А. Звеков, И. Ю. Зыков,
А. В. Каленский, А. П. Никитин

Представлена методика расчета критических параметров инициирования взрывного разложения за счет нагрева сильнопоглощающих включений. Рассчитаны: радиусы частицы с максимальным коэффициентом эффективности поглощения, максимальный коэффициент эффективности поглощения, критический радиус частицы, температура вспышки, критическая плотность энергии инициирования взрывного разложения пентаэритриттетранитрата (ТЭНа) с добавками наночастиц серебра, золота, меди, алюминия, кобальта, хрома, железа, никеля, свинца, палладия, олова и ванадия. Определены перспективные составы для капсуля оптического детонатора на основе ТЭНа с добавками наночастиц металлов.

Ключевые слова: лазерное излучение, микроочаговая модель, тепловой взрыв, состав капсуля, моделирование.

Введение

Создание оптических детонаторов ведется уже более двух десятилетий [1]. Разработаны капсули детонатора на основе инициирующих взрывчатых веществ: азидов серебра и свинца, перхлоратов меди, железа, кобальта. Недостатком использования таких оптических детонаторов является их высокая чувствительность не только к лазерному импульсу, но и к удару, нагреву, радиации и т.д. Низкая селективность оптических детонаторов на основе инициирующих взрывчатых веществ может приводить к их несанкционированному срабатыванию, поэтому они не получили широкого применения. Одним из перспективных направлений создания капсулей оптических детонаторов является введение в существующие взрывчатые вещества светопоглощающих добавок [1, 2]. В последнем случае определяют значения порогов инициирования ТЭНа от концентрации вводимых добавок наночастиц алюминия. Показано, что полученные материалы проявляют чувствительность к лазерному воздействию на уровне 1 Дж/см² (при неизменном пороге инициирования ударом) [3 – 5], что на два порядка меньше по сравнению с чистыми прессованными таблетками ТЭНа, имеющими критическую плотность энергии инициирования ~100 Дж/см². Благодаря этому доказана роль наночастиц металла как центров поглощения световой

энергии в объеме вторичных взрывчатых веществ, и показано, что вторичные взрывчатые вещества, содержащие наночастицы металлов, могут быть использованы в качестве капсульных составов для оптических систем инициирования. Данные обстоятельства вызвали новую волну интереса к микроочаговой модели инициирования теплового взрыва лазерным импульсом [5, 6].

Микроочаговая модель инициирования взрывного разложения энергетических материалов лазерным излучением [6] основывается на предположении, что в объеме прозрачного вещества содержатся наночастицы, интенсивно поглощающие лазерное излучение. Предполагается, что основным следствием поглощения света включениями является их нагрев, приводящий к увеличению температуры окружающего энергетического материала и образованию очага самоподдерживающейся экзотермической реакции. Модель была сформулирована для объяснения закономерностей низкорогового инициирования взрывного разложения азидов тяжелых металлов импульсным лазерным излучением [6]. Позднее была предложена модель разветвленной твердофазной цепной реакции, позволяющая количественно объяснить ряд наблюдаемых закономерностей инициирования взрывного разложения азидов тяжелых металлов импульсом неодимового лазера [7 – 10].

Одним из основных постулатов микроочаговой модели [6], является независимость эффективности поглощения света от размера, формы и природы включения. Коэффициент эффективности поглощения наночастицы Q_{abs} (отношение сечения поглощения света к геометрическому сечению) считается равным 1. Предложенный в [11] учет различных конфигураций светопоглощающих включений не устраняет данного недостатка.

Цель работы — рассчитать в рамках теории Ми коэффициенты эффективности поглощения излучения неодимового лазера металлическими наночастицами в объеме ТЭНа, с учетом полученного коэффициента эффективности поглощения наночастицы определить минимальные плотности энергии инициирования взрывного разложения ТЭНа с наночастицами металла, оценить перспективные составы для капсуля оптического детонатора.

Модель разогрева включений лазерным излучением

Система дифференциальных уравнений, описывающих процессы кондуктивного теплопереноса в наночастице и в среде сферической симметрии, а также тепловыделение за счет химического разложения энергетического материала имеет вид:

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

где T — температура, $E = 165$ кДж/(моль·К) [13] — энергия активации процесса разложения, $k_0 = 1,2 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}$ — предэкспоненциальный множитель, $Q = 9,64$ кДж/см³ — тепловой эффект реакции разложения ТЭНа [12], $c = 2,22$ Дж/(см³·К) — объемная теплоемкость материала матрицы, $\alpha = 1,1 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2 \text{ c}^{-1}$ и α_M — коэффициенты теплопроводности материалов ТЭНа и металла наночастицы (приведены в табл. 1), R — радиус включения, n — доля неразложенного взрывчатого вещества, x и t — текущие координата и время, соответственно, k_B — постоянная Больцмана. Использование сферической симметрии связано с особенностями взаимодействия света с прессованными образцами энергетических материалов [6].

На границе включение – матрица $x = R$ происходит поглощение излучения, что приводит к следующему граничному условию:

$$J(t) - c_M \alpha_M \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R-0} + c \alpha \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x \rightarrow R+0} = 0, \quad (2)$$

где c_M — объемная теплоемкость материала включения, $J(t)$ — поглощаемая плотность мощности излучения лазерного импульса. На границе рассматриваемой области (включение и слой энергетического материала толщиной $8R$) задавалось условие первого рода $T = 300$ К. Зависимость мощность излучения лазерного импульса от времени близка к функции нормального распределения [14]. Принимая за начало отсчета времени положение максимальной интенсивности импульса, получаем для величины $J(t)$ выражение [9]:

$$J(t) = \sqrt{\pi} \cdot Q_{abs} R^2 k_i H_0 \cdot \exp(-k_i^2 t^2), \quad (3)$$

где $k_i = 8,325 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1}$ — параметр, определяющий длительность импульса (соответствует длительности импульса на полувысоте $\tau = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{k_i} = 20$ нс); H_0 —

Таблица 1

Теплофизические и оптические параметры металлов

Металл	Теплоёмкость, $c_M, \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{К})$	Температуропроводность, $\alpha_M, \text{ см}^2 \text{ c}^{-1}$	Комплексный показатель преломления	
			Действительная часть	Мнимая часть
Ag	2,468568	1,73785	0,15	6,00
Au	2,490447	1,276879	0,179	6,044
Cu	3,430661	1,168871	0,197	6,272
Al	2,435673	0,973037	0,978	8,030
Co	3,745461	0,26699	3,85	5,27
Cr	3,221915	0,291442	4,234	4,742
Fe	3,544548	0,226827	2,953	3,970
Ni	3,958575	0,229628	2,65	5,93
Pb	1,45874	0,24199	1,416	5,742
Pd	2,914076	0,24639	2,52	6,33
Sn	1,669397	0,400145	3,44	7,34
V	2,992629	0,102585	2,705	4,170

плотность энергии за импульс; Q_{abs} — коэффициент эффективности поглощения. Величина Q_{abs} зависит как от радиуса включения, так и от длины волны излучения. Множители уравнения (3) нормируют интеграл от $J(t)$ по времени на H_0 .

Теплофизические параметры наночастиц представлены в табл. 1. Численное решение уравнений (1) – (2) выполнялось на сетке с переменным шагом по координате. Для размеров включений $R \geq 30$ нм шаг в окрестностях включения составлял не менее $1/10$ толщины прогретого за время импульса вещества энергетического материала ($\sqrt{2\alpha/k_i}$), далее размер ячейки увеличивался по закону геометрической прогрессии таким образом, чтобы слой окружающего материала имел суммарную толщину не менее $8R$. Шаг сетки внутри включения превышал шаг снаружи в $\sqrt{\alpha_M/\alpha}$ раз. Ячейка с границей раздела металл – ТЭН содержала как слой материалов ТЭНа, так и металла толщиной в половину шага сетки для каждого вещества. При использованных параметрах размер ячейки в металле составлял ~ 10 нм, что близко к толщине слоя поглощения света (для большинства металлов около 10 нм). Для размеров наночастиц $10 \leq R \leq 20$ нм использовали одну ячейку (10 нм) внутри металла и вторую ячейку с границей раздела металл – ТЭН. Для размеров $R \leq 10$ нм ячейка внутри наночастицы не формировалась. Первой была ячейка, в которую полностью входила наночастица металла, граница раздела металл – ТЭН и слой ТЭНа. Данная методика позволяет корректно учитывать поглощение света при помощи граничного условия (2) [15].

Полученную после разбиения пространства на ячейки систему обыкновенных дифференциальных уравнений решали методом Рунге – Кутты 1 – 5 порядка с переменным шагом по времени. Относительная погрешность на шаге интегрирования не превышала 10^{-9} , при этом интегральная относительная погрешность, оцениваемая по точности выполнения закона сохранения энергии, не превышала $2,5 \cdot 10^{-5}$.

Методика расчета критической плотности энергии

Определение минимальной плотности энергии инициирования взрывного разложения (критической плотности энергии) ТЭНа, содержащего наночастицы металла, проводили следующим образом:

1. Для каждого металла по методике [16] рассчитывали зависимость коэффициента эффективности поглощения от радиуса частицы, определяли размер частицы, имеющий максимальный коэффициент эффективности поглощения.

2. По уравнениям (1) – (2) рассчитывали минимальную, для данного радиуса наночастицы, плотность энергии лазерного импульса, инициирующего взрывное разложение ($H(R)$). Расчет проводили до тех пор, пока минимальная плотность энергии, приводящая к взрыву ($H_{min e}$), отличалась от максимальной плотности энергии, не приводящей к взрыву ($H_{max d}$), не более чем на 0,01 % ($1 - H_{max d}/H_{min e} < 0,0001$). Значение H для наночастицы металла радиуса R определяли по выражению:

$$H(R) = \frac{H_{max d} + H_{min e}}{2}.$$

3. Значения радиусов частицы, при которых проводили расчет $H(R)$, выбирали до тех пор, пока рассчитанные для этих размеров H не образуют ряд с выраженным минимумом. Далее по рассчитанным значениям критических плотностей энергии инициирования $H(R)$ проводили интерполяцию квадратичной функцией для определения положения минимума. После этого рассчитывали критическую плотность энергии в точке минимума. Процедура шага 1 – 3 повторяли, пока точность определения критического радиуса частицы с минимальной плотностью энергии инициирования взрывного разложения (H_c) не достигала 0,1 нм.

Для дальнейшей модернизации модели и правильной интерпретации полученных данных рассчитана температура вспышки. Для этого в уравнении (1) значение k_0 принимали равным 0 и проводили расчет по системе (1) – (2) максимальной температуры разогрева системы (T_c) при плотности энергии равной H_c .

Результаты и обсуждение

На рис. 1 представлены рассчитанные зависимости коэффициентов эффективности поглощения наночастиц металлов от радиуса: железа (1), свинца (2), алюминия (3) и серебра (4) в матрице ТЭНа ($n = 1,55$). Кроме этих металлов расчет зависимости коэффициентов эффективности поглощения от радиуса был проведен для следующих металлов: золото, медь, кобальт, хром, никель, палладий, олово и ванадий. Используемые значения комплексных показателей преломления металлов и представлены в табл. 1. Все рассчитанные зависимости $Q_{abs}(R)$ являются однотипными: при определенном значении радиуса частицы (R_{max}) наблюдается максимальный коэффициент эффективности поглощения ($Q_{abs max}$), при меньших значениях радиуса включения Q_{abs} монотонно уменьшается и стремится к нулю, при больших — Q_{abs} уменьшается с затухающими осцил-

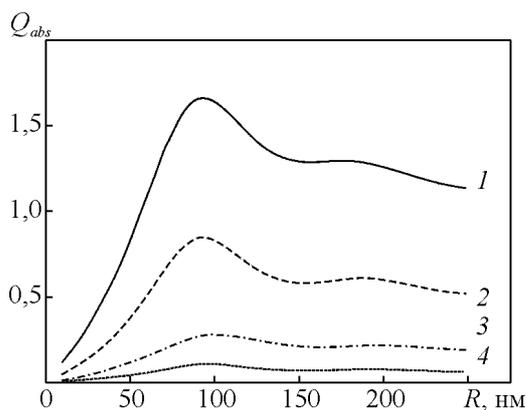


Рис. 1. Зависимости коэффициентов эффективности поглощения наночастиц: 1 – железа, 2 – свинца, 3 – алюминия, 4 – серебра в ТЭНе от радиуса. Длина волны 1064 нм (первая гармоника неодимового лазера).

лящими, приближаясь к постоянному значению. Как следует из полученных кривых, коэффициенты эффективности поглощения света могут изменяться в широких пределах в зависимости от металла и его радиуса.

Результаты расчетов максимальных коэффициентов эффективности поглощения и соответствующих им радиусов наночастиц для 12 металлов представлены в табл. 2. Положение $Q_{abs\ max}$ приходится на область радиусов 90–100 нм, амплитуда максимума связана со свойствами металла: чем меньше его удельная проводимость, тем выше эффективность поглощения света. Исследуемые металлы можно разбить на три группы:

Таблица 2

Рассчитанные критические параметры взрывного разложения ТЭНа с добавками наночастиц металлов

Металл	R_{max} , нм	$Q_{abs\ max}$	R_c , нм	T_c , К	H_c , Дж/см ²
Ag	95	0,1087	93,72	1011,09	0,6392 ± 0,0001
Au	95	0,1263	93,72	1011,29	0,5520 ± 0,0001
Cu	96	0,1241	93,45	1019,28	0,6372 ± 0,0001
Al	100	0,2942	98,03	1011,18	0,2365 ± 0,0001
Co	97	1,3132	93,81	1020,61	0,0627 ± 0,0001
Cr	98	1,4154	94,25	1017,91	0,0546 ± 0,0001
Fe	94	1,6732	90,59	1021,36	0,0477 ± 0,0001
Ni	93	1,2583	92,47	1022,17	0,0778 ± 0,0001
Pb	93	0,8629	93,65	991,73	0,0692 ± 0,0001
Pd	96	0,9569	93,99	1015,23	0,0773 ± 0,0001
Sn	99	0,8589	98,70	998,82	0,0719 ± 0,0001
V	92	1,6439	90,12	1016,48	0,0452 ± 0,0001

R_{max} — радиус частицы с максимальным коэффициентом эффективности поглощения, $Q_{abs\ max}$ — максимальный коэффициент эффективности поглощения, R_c — критический радиус частицы, T_c — температура вспышки, H_c — критическая плотность энергии инициирования взрывного разложения ТЭНа с добавками соответствующих наночастиц металла.

1. Серебро, золото и медь, имеющие максимальные удельные проводимости, обладают минимальными коэффициентами эффективности поглощения. Даже в максимуме для этих металлов $Q_{abs\ max} \sim 0,1$ и поглощается менее одной десятой доли падающего света.

2. К промежуточной группе относится алюминий, для которого $Q_{abs\ max} \sim 0,3$.

3. Третья группа самая многочисленная, к ней относятся кобальт, хром, железо, никель, свинец, палладий, олово и ванадий. Относительно малые значения удельной проводимости этих металлов приводят к относительно большим значениям $Q_{abs\ max} \sim 0,8–1,7$.

Рассмотрим влияние коэффициента эффективности поглощения света металлом на максимальную температуру разогрева. Согласно [16], максимальный нагрев δT в процессе поглощения лазерного импульса плотностью энергии H для включения радиуса R определяется выражением:

$$\delta T = \frac{HR/4c}{Rh + h^2 + R^2/K^2}, \quad (5)$$

где $K = \sqrt{3c/c_M}$ — безразмерный коэффициент, который связан с отношением объемных теплоемкостей энергетического вещества c и металла c_M , $h = \sqrt{2\alpha/k_i}$ — толщина слоя энергетического вещества, прогретого за время длительности импульса. Радиус наиболее разогретого включения равный Kh , уменьшается при сокращении длительности импульса. В случае множества включений максимальная температура разогрева определяется соотношением:

$$\delta T = \frac{H}{4ch} \cdot \frac{K}{K+2}. \quad (6)$$

Формула (5), скорректированная на коэффициент эффективности поглощения света, примет вид:

$$\delta T = Q_{abs}(R) \cdot \frac{HR/4c}{Rh + h^2 + R^2/K^2}. \quad (7)$$

Максимальный нагрев энергетического вещества вблизи сильнопоглощающего включения зависит не только от $Q_{abs\ max}$, но и от теплоемкости металла (через K). В свою очередь теплоемкость металла меняется в достаточно широких пределах, поэтому максимальный коэффициент эффективности поглощения не гарантирует максимальную температуру разогрева и минимальную критическую плотность энергии инициирования взрывного разложения.

Продemonстрируем методику расчета критических параметров инициирования взрывного разложения ТЭНа с наночастицами металла на примере

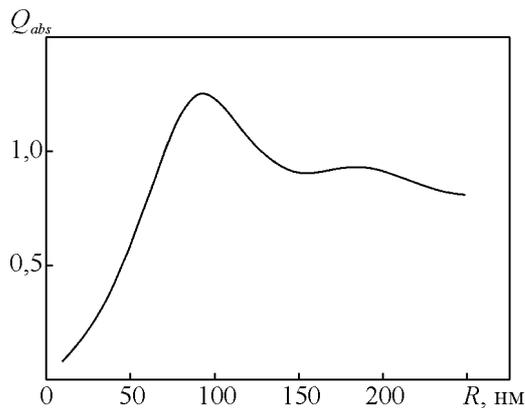


Рис. 2 Рассчитанная в рамках теории Ми зависимость коэффициента эффективности поглощения наночастиц никеля от их размера.

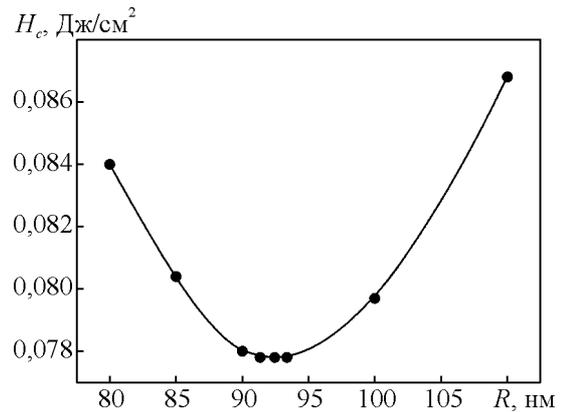


Рис. 3. Рассчитанная зависимость критической плотности энергии иницирования композитов ТЭНа с включениями никеля импульсом неодимового лазера длительностью 20 нс.

добавок никеля. Рассчитанные в рамках теории Ми зависимости коэффициентов эффективности поглощения Q_{abs} наночастиц никеля в матрице ТЭНа от радиуса для длины волны света 1064 нм приведены на рис. 2. Вначале вычислены минимальные энергии иницирования взрыва для наночастиц никеля радиусов 80, 90, 100 и 110 нм. Между этими четырьмя значениями $H(R)$ (точки на кривой) находится минимум, значение которого является критической плотностью энергии для данного металла (H_c). Для уточнения положения и величины H_c значения $H(R)$ интерполировали полиномом второй степени. Минимум полученной параболы приходится на $R = 92,4$ нм. Следующий расчет $H(R)$ проводили при $R = 92,4$ нм, $R = 93,4$ и $91,4$ нм. По полученным значениям H второй раз уточняли положение минимума плотности энергии импульса $R = 92,46$ нм и величину минимальной плотности энергии иницирования взрывного разложения ТЭНа по множеству частиц никеля $H_c = 0,0778$ Дж/см². Для достижения необходимой точности расчета R_c и H_c для каждого металла необходимо провести от 7 до 11 определений H . Далее рассчитанные значения R_c и H_c округляли до последней значащей цифры, и результат заносили в табл. 2. На рис. 3 приведена рассчитанная зависимость критической плотности энергии иницирования от радиуса включений никеля в ТЭНе при длительности импульса 20 нс. В работах по исследованию иницирования взрывного разложения конденсированных энергетических материалов с добавками светопоглощающих наночастиц температура вспышки принимается постоянной для каждого вещества независимо от природы включения [6]. Рассчитанные и представленные в табл. 2 значения T_c для 12 различных металлических включений показывают

грубость данного положения. Температура вспышки, как в классической теории теплового взрыва, так и в модели горячей точки является одним из наиболее важных параметров. Исследуемые металлы, как и по параметрам поглощения, разбиваются на три группы:

1. Серебро, золото и медь имеют минимальные коэффициенты эффективности поглощения, что приводит к максимальным значениям критической плотности энергии $\sim 0,5$ Дж/см². Все три металла имеют очень близкие рассчитанные значения R_c и H_c . Учет реального коэффициента эффективности поглощения исключает эти металлы из числа перспективных для использования в оптическом детонаторе на первой гармонике неодимового лазера.

2. К промежуточной группе относится алюминий. Промежуточное значение $Q_{abs\ max}$ определяет повышенное значение $H_c \sim 240$ мДж/см². Однако, простота синтеза наночастиц металла нужного размера, его химическая активность (что не учитывалось в данной работе) делает Al одним из перспективных металлов для использования в оптическом детонаторе.

3. Наиболее перспективны для использования в капсуле оптического детонатора являются наночастицы металлов третьей группы (кобальт, хром, железо, никель, свинец, палладий, олово и ванадий). Относительно большие значения $Q_{abs\ max}$ приводят к минимальным значениям $H_c \sim 60 \pm 20$ мДж/см².

Заключение

Сформулирована методика расчета критических параметров иницирования взрывного разложения за счет нагрева металлических включений. Рассчитаны радиусы частицы с максимальным коэффи-

циентом эффективности поглощения, максимальный коэффициент эффективности поглощения, критический радиус частицы, температура вспышки, критическая плотность энергии инициирования взрывного разложения ТЭНа с добавками наночастиц серебра, золота, меди, алюминия, кобальта, хрома, железа, никеля, свинца, палладия, олова и ванадия. Определены перспективные составы для капсуля оптического детонатора на основе ТЭНа с добавками наночастиц металлов.

Авторы выражают благодарность чл.-корр. РАН Ю. А. Захарову, профессорам В. Г. Кригеру, Б. П. Адуеву и В. П. Ципилеву за полезные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№ 14-03-00534 А).

Литература

1. Гусаченко Л.К., Зарко В.Е., Рычков А.Д. Зажигание и гашение гомогенных энергетических материалов световым импульсом. *Физика горения и взрыва*, 2012, т. 28, № 1, с. 80 – 88.
2. Чумаков Ю.А., Князева А.Г. Иницирование реакции в окрестности одиночной частицы, нагреваемой СВЧ излучением. *Физика горения и взрыва*, 2012, т. 28, № 2, с. 24 – 30.
3. Адуев Б.П., Нурмухаметов Д.Р. Влияние добавок наночастиц алюминия на чувствительность тетранитропентаэритрита к лазерному воздействию. *Химическая физика*, 2011, т. 30, № 3, с. 63 – 65.
4. Адуев Б.П., Белокуров Г.М., Нурмухаметов Д.Р., Нелюбина Н.В. Светочувствительный материал на основе смеси ТЭНа и наночастиц алюминия. *Физика горения и взрыва*, 2012, т. 48, № 3, с. 127 – 132.
5. Адуев Б.П., Нурмухаметов Д.Р., Фурега Р.И., Звекон А.А., Каленский А.В. Взрывчатое разложение ТЭНа с нанодобавками алюминия при воздействии импульсного лазерного излучения различной длины волны. *Химическая физика*, 2013, т. 32, № 8, с. 39 – 42.
6. Буркина Р.С., Морозова Е.Ю., Ципилев В.П. Иницирование реакционно-способного вещества потоком излучения при поглощении его неоднородностями вещества. *Физика горения и взрыва*, 2011, т. 47, № 5, с. 95 – 105.
7. Каленский А.В., Ананьева М.В., Кригер В.Г., Звекон А.А. Коэффициент захвата электронных носителей заряда на экранированном отталкивающем центре. *Химическая физика*, 2014, т. 33, № 4, с. 11 – 16.
8. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А., Ананьева М.В., Боровикова А.П. Диффузионная модель разветвленной цепной реакции взрывного разложения азидов тяжелых металлов. *Химическая физика*, 2009, т. 28, № 8, с. 67 – 71.
9. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А. Релаксация электронно-возбужденных продуктов твердофазной

реакции в кристаллической решетке *Химическая физика*, 2012, т. 31, № 1, с. 18 – 22.

10. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А., Боровикова А.П., Гришаева Е. А. Определение ширины фронта волны реакции взрывного разложения азидов серебра. *Физика горения и взрыва*, 2012, т. 48, № 4, с. 129 – 136.
11. Aluker E.D., Krechetov A.G., Mitrofanov A.Y., Zverev A.S., Kuklja M.M. Understanding limits of the thermal mechanism of laser initiation of energetic materials. *J. Phys. Chem. C*, 2012, v. 116 (46), p. 24482 – 24486.
12. *Физика взрыва*. Под ред. Л. П. Орленко. В 2 т. Т. 1. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004, 832 с.
13. Денисов Е.Т. Константы скорости гомолитических жидкофазных реакций. М.: Наука, 1971, 712 с.
14. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А. Определение начала механического разрушения кристаллов азидов серебра, иницированных лазерным импульсом. *Физика горения и взрыва*, 2010, т. 46, № 1, с. 69 – 72.
15. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А., Зыков И.Ю., Никитин А.П. Процессы теплопереноса при лазерном разогреве включений в инертной матрице. *Теплофизика и аэромеханика*, 2013, т. 20, № 3, с. 375 – 382.
16. Кригер В.Г., Каленский А.В., Звекон А.А., Зыков И.Ю., Адуев Б.П. Влияние эффективности поглощения лазерного излучения на температуру разогрева включения в прозрачных средах. *Физика горения и взрыва*, 2012, т. 48, № 6, с. 54 – 58.

References

1. Gusachenko L.K., Zarko V.E., Rychkov A.D. Zazhiganiye i gasheniye gomogennykh energeticheskikh materialov svetovym impulsom [Ignition and extinction of homogeneous energetic materials by a light pulse]. *Fizika gorennya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2012, vol. 28, no.1, pp. 73 – 80.
2. Chumakov Yu.A., Knyazeva A.G. Initsirovaniye reaktzii v okrestnosti odinochnoy chastitsy, nagrevayemoy SVCh izlucheniym [Initiation of reaction in the vicinity of a single particle heated by microwave radiation]. *Fizika gorennya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2012, vol. 48, no. 2. pp. 144 – 150.
3. Aduev B.P., Nurmukhametov D.R. Vliyaniye dobavok nanochastitsy alyuminiya na chuvstvitel'nost tetranitropentaeritrita k lazernomu vozdeystviyu [The influence of added aluminum nanoparticles on the sensitivity of pentaerythritol tetranitrite to laser irradiation]. *Khimicheskaya fizika — Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2011, vol. 5, no. 2, pp. 290 – 292.
4. Aduev B.P., Belokurov G.M., Nurmukhametov D.R., Nelyubina N.V. Svetochuvstvitel'ny material na osnove smesi TENa i nanochastitsy alyuminiya [Photosensitive material based on PETN mixtures with aluminum nanoparticles]. *Fizika gorennya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2012, vol. 48, no. 3, pp. 361 – 366.
5. Aduev B.P., Nurmukhametov D.R., Furega R.I., Zvekoy A.A., Kalenskii A.V. Vzryvchatoye razlozheniye TENa s

- nanodobavkami alyuminiya pri vozdeystvii impulsnogo lazernogo izlucheniya razlichnoy dliny volny [Explosive decomposition of PETN with nanoaluminum additives under the influence of pulsed laser radiation at different wavelengths]. *Khimicheskaya fizika — Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2013, vol. 7, no. 4, pp. 453 – 456.
6. Burkina R.S., Morozova E.Yu., Tshipilev V.P. Initsirovaniye reaktsionno-sposobnogo veshchestva potokom izlucheniya pri pogloshchenii ego neodnorodnostyami veshchestva [initiation of a reactive material by a radiation beam absorbed by optical heterogeneities of the material]. *Fizika goreniiya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2011, vol. 47, no. 5, pp. 581 – 590.
 7. Kriger V.G., Kalensky A.V., Zvekov A.A., Ananyeva M.V., Borovikova A.P. Diffuzionnaya model razvetvlennoy tsepnoy reaktsii vzryvnogo razlozheniya azidov tyazhelykh metallov [A diffusion model of chain-branching reaction of the explosive decomposition of heavy metal azides]. *Khimicheskaya fizika — Russian Journal of Physical Chemistry*. 2009, vol. 3, no. 4, pp. 636 – 640.
 8. Kalenskii A.V., Anan'eva M.V., Kriger V.G., Zvekov A.A. Koeffitsient zahvata elektronnykh nositeley zaryada na ekranirovannom ottalkivaushyem centre [Rate constant of capture of electron charge carriers on a screened repulsive centre]. *Khimicheskaya fizika — Russian Journal of Physical Chemistry*, 2014, vol. 8, no. 2, pp. 131 – 135.
 9. Kriger V.G., Kalenskii A.V., Zvekov A.A. Relaksatsiya elektronno-vozbuzhdennykh produktov tverdogfaznoy reaktsii v kristallicheskoy reshetke [Relaxation of electronically excited products of solid-state reactions in the crystal lattice]. *Khimicheskaya fizika — Russian Journal of Physical Chemistry*. 2012, vol. 6, no. 1, pp. 15 – 18.
 10. Kriger V.G., Kalenskii A.V., Zvekov A.A., Zykov I.Yu., Borovikova A.P., Grishaeva E.A. Opredeleniye shiriny fronta volny reaktsii vzryvnogo razlozheniya azida serebra [Determining the width of the reaction wave front in the explosive decomposition of silver azide]. *Fizika goreniiya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2012, vol. 48, no. 4, pp. 488 – 495.
 11. Aluker E.D., Krechetov A.G., Mitrofanov A.Y., Zverev A.S., Kuklja M.M. Understanding limits of the thermal mechanism of laser initiation of energetic materials. *J. Phys. Chem. C*. 2012, vol. 116 (46), pp. 24482 – 24486.
 12. Orlenko L.P. *Fizika vzryva — Physics of explosion*. Moscow, PhysMathLit. Publ., in 2 vol., vol. 1, 2004, 832 p.
 13. Denisov E.T. *Konstanty skorosti gomoliticheskikh zhidkofaznykh reaktsiy* [Homolytic reactions rate constants]. Moscow, Nauka Publ., 1971, 712 p.
 14. Kriger V.G., Kalenskii A.V., Zvekov A.A. Opredeleniye nachala mekhanicheskogo razrusheniya kristallov azida serebra, initsirovannykh lazernym impulsom [Determining the onset of mechanical failure of silver azide crystals initiated by laser pulse]. *Fizika goreniiya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2010, vol. 46, no. 1, pp. 60 – 63.
 15. Kriger V.G., Kalenskii A.V., Zvekov A.A., Zykov I.Yu., Nikitin A.P. Protsessy teploperenosa pri lazernom razogreve vklyucheny v inertnoy matritse [Heat-transfer processes upon laser heating of inert-matrix-hosted inclusions]. *Teplofizika i aeromekhanika — Thermophysics and aeromechanics*. 2013, vol. 20, no. 3, pp. 367 – 374.
 16. Kriger V.G., Kalenskii A.V., Zvekov A.A., Zykov I.Yu., Aduiev B.P. Vliyaniye effektivnosti pogloshcheniya lazernogo izlucheniya na temperaturu razogreva vklyucheniya v prozrachnykh sredakh [Effect of laser radiation absorption efficiency on the heating temperature of inclusions in transparent media]. *Fizika goreniiya i vzryva — Combustion, explosion, and shock waves*. 2012, vol. 48, no. 4, pp. 705 – 708.

Статья поступила в редакцию 27.01.2014 г.

Ананьева Марина Владимировна — Кемеровский государственный университет (г. Кемерово), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, специалист в области физической химии. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Звеков Александр Андреевич — Институт углехимии и химического материаловедения СО РАН (г. Кемерово), кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, специалист в области физической химии. E-mail: zvekova@gmail.com.

Зыков Игорь Юрьевич — Кемеровский государственный университет (г. Кемерово), аспирант, специалист в области физической химии. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Каленский Александр Васильевич — Кемеровский государственный университет (г. Кемерово), доктор физико-математических наук, профессор, специалист в области физической химии. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Никитин Андрей Павлович — Кемеровский государственный университет, кафедра химии твердого тела (г. Кемерово), аспирант, специалист в области физической химии. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Promising compounds for the cap of optical detonator

М. В. Ananyeva, А. А. Zvekov, I. Yu. Zykov, А. V. Kalensky, А. P. Nikitin

Simulation of the critical parameters of explosive decomposition initiation by the heat of absorbing inclusions is carried out. The next parameters are calculated: the radii of particles with a maximum coefficient of absorption efficiency, maximum efficiency coefficient of absorption, the critical radius of the particle, flash point, the critical energy density of initiation of explosive decomposition of pentaerythritol tetranitrate (PETN) with additives of silver, gold, copper, aluminum, cobalt, chromium, iron, nickel, lead, palladium, tin and vanadium nanoparticles. Promising compounds for the cap of optical detonator on the basis of the first harmonic of a YAG-Nd laser are proposed.

Key words: laser irradiation, microcenter model, thermal explosion, cap composition, simulation.

Ananieva Marina — Kemerovo State University (Kemerovo, Russia), PhD, senior research worker. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Zvekov Aleksandr — Institute of coal chemistry and material science SB RAS (ICCMS SB RAS) (Kemerovo, Russia), PhD, research worker. E-mail: zvekova@gmail.com.

Zykov Igor — Kemerovo State University (Kemerovo, Russia), graduate student. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Kalensky Aleksandr — Kemerovo State University (Kemerovo, Russia), DrSci (PhysMath), professor. E-mail: kriger@kemsu.ru.

Nikitin Andrey — Kemerovo State University (Kemerovo, Russia), graduate student. E-mail: kriger@kemsu.ru.