

## MOLECULAR DYNAMICS MODELING OF THERMAL DECOMPOSITION OF CONDENSED EXPLOSIVES

*O.V. Sergeev, A.V. Yanilkin*

FSUE VNIIA, Moscow, Russia

The description of growth and interaction of hot spots in condensed high explosives is of significant interest for simulations of the initial stages of HE initiation. At present the experimental studies of these processes are practically infeasible because of them taking place in the condensed phase, and in characteristic times faster than 1 ns. A promising approach to examine the reactions in high explosives is atomistic modeling, as it provides the possibility to accurately reproduce the pathways, energy barriers and energetics of chemical reactions. However, the direct simulation of hot spot growth in 3D with realistic interatomic potential requires very large amount of computations and can not in practice be performed at the moment. Thus it is advisable to describe the macroscopic development of the burning process with multicomponent hydrodynamics coupled with chemical kinetics, and use atomistic methods (molecular dynamics, in particular) to determine the kinetic coefficients.

In the present work we propose the model of chemical kinetics of burning of several condensed explosives (PETN, RDX, HMX) constructed on the basis of molecular dynamics calculations with ReaxFF interatomic potential. Groups of atoms connected to each other (molecules) are determined during MD run, then the number of molecules of each type at a particular time step is calculated. Kinetics of the reactions in isolated molecule and in bulk single crystal are determined using this data. The energetic barriers of main reactions are also calculated with NEB technique. The proposed model well describes temporal dependences of the concentrations of the reaction products. The results are compared with other simulations and experimental data.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО И УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ ТРИАМИНОТРИНитРОБЕНЗОЛА

*Е.Б. Смирнов, О.В. Костицын, А.В. Станкевич,  
 А.К. Музыря, К.А. Тен, Э.Р. Прууэл, А.О. Кашикар*

РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, Россия

Данные по гидростатическому сжатию при температуре  $T_0=293$  K получены с использованием метода порошковой дифракции при сжатии триаминотринитробензола (ТАТБ) в алмазных наковальнях. Данные по ударному сжатию получены при помощи пьезорезисторного, радиоинтерферометрического и электромагнитного методов, а также с использованием многокадровой синхротронной диагностики.

Предложено полумпирическое уравнение состояния твердого взрывчатого вещества, построенное на основе потенциала Гельмгольца, с упругой компонентой в виде Борна-Майера и тепловой компонентой в виде Дебая. Константы уравнения изотермы определялись на основании рентгеноструктурных исследований ТАТБ при гидростатическом сжатии. На основании экспериментов по ударно-волновому сжатию уточнялся вклад тепловой составляющей в уравнение состояния ВВ ТАТБ.

Можно ожидать, что использование предложенного уравнения состояния позволит повысить точность описания термодинамических параметров непрореагировавшего ВВ ТАТБ при численном моделировании ударно-волновых и детонационных процессов.

### HYDROSTATIC AND SHOCK-WAVE COMPRESSION OF TRIAMINO TRINITROBENZENE

*E.B. Smirnov, O.V. Kostitsyn, A.V. Stankevich, A.K. Muzyrya,  
K.A. Ten, E.R. Prueel, A.O. Kashkarov*

RFNC-VNIITF, Snezhisk, Russia

Powder diffraction technique was used to obtain data on hydrostatical compression at  $T_0=293K$  when triamino trinitrobenzene (TATB) was compressed in diamond anvils. The piezoresistor, radio interferometric, electromagnetic, and also multiframe synchrotron techniques were used to gather data on shock compression.

A semi-empirical equation of state based on the Helmholtz potential with the Born-Mayer elastic component and the Debye thermal component was proposed for a solid explosive material. The X-ray diffraction analysis of TATB under hydrostatic compression was used to determine constants of the isotherm equation. Shock-wave compression experiments helped to update contribution of the thermal component into the equation of state of TATB.

In numerical simulation of shock-wave and detonation processes, the proposed equation of state is expected to enhance accuracy of describing the thermodynamic parameters of the unreacted TATB.

### ПОВОРОТ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ОБРАЗЦАХ ИЗ НИЗКОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ВВ

*К.М. Просвирнин, Е.Б. Смирнов, Б.Г. Лобойко, О.В. Костицын,  
Ю.А. Беленовский, К.М. Мирошкин, И.А. Ахлюстин, А.Н. Киселёв*

РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск, Россия

Процесс возникновения и развития детонации в низкочувствительных ВВ определяется динамикой не только в осевом, но и в пространственном распространении. Значительную роль приобретают факторы, влияющие на развитие и распространение детонации в объеме образцов ВВ.

В работе приведены результаты исследования процесса поворота детонационной волны, распространяющейся в цилиндрических образцах из низкочувствительного ВВ. Исследовался процесс распространения детонационной волны, с регистрацией в объеме исследуемых образцов ВВ по различным направлениям. В экспериментах фотохронографическим методом регистрировался выход детонационной волны на боковую и торцовую поверхности образцов. В качестве параметра, характеризующего процесс поворота детонационной волны, был выбран угол между осью образца и местом выхода детонационной волны на боковую либо

торцевую поверхность образца. Поверхность свидетельствует о повороте детонационной волны. Процесс поворота детонационной волны описывается детонационной волной.

В ходе исследования детонационной волны с использованием низкочувствительного ВВ.

### ДЕТОНАЦИОННАЯ ВОЛНА В ОБРАЗЦАХ

*К.М. Просвирнин,  
Ю.А. Беленовский*

The detonation geometry was determined by dynamics of the detonation development and its importance.

Turning of the detonation wave in HE was investigated and results of propagation was recorded in detail. Photography was used to record samples. An angle between the lateral or end surface of the process of detonation wave turning surface indicates "channel" of the wave turning within a sample of HE under study.

Interdependence between the parameters for initiation of the test low-sensitive

### РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПЛАСТИКОВ

Институт гидродинамики

Методом высокого разрешения пространственное распределение электропроводности ТАТБ при плотностях и давлении детонационным давлением при

Полученные профили электропроводности повышенной электропроводности