

# Обзор работ по мало-угловому рентгеновскому рассеянию (МУРР, SAXS) при детонации взрывчатых веществ выполненных в Advanced Photon Source (Argonne National Laboratory, США) в 2015-2017 годах:

<https://www1.aps.anl.gov/>

<https://dcs-aps.wsu.edu/>

## 1. Measurement of carbon condensates using small-angle x-ray scattering during detonation of the high explosive hexanitrostilbene

M. Bagge-Hansen, L. Lauderbach, R. Hodgkin, S. Bastea, L. Fried, A. Jones, T. van Buuren, D. Hansen, J. Benterou, C. May, T. Graber, B. J. Jensen, J. Ilavsky and T. M. Willey.  
Journal of Applied Physics. Volume 117. Issue 24. 245902 (2015). IOP Publishing.

## 2. Structural evolution of detonation carbon in composition B by X-ray scattering

Millicent A. Firestone, Dana M. Dattelbaum, David W. Podlesak, Richard L. Gustavsen, Rachel C. Huber, Bryan S. Ringstrand, Erik B. Watkins, Brian Jensen, Trevor Willey, Lisa Lauderbauch, Ralph Hodgkin, Michael Bagge-Hansen, Tony van Buuren, Sönke Seifert and Timothy Graber.  
AIP Conference Proceedings. Volume 1793. Issue 1. 030010 (2017). doi:10.1063/1.4971468.

## 3. Measurement of carbon condensates using small-angle x-ray scattering during detonation of high explosives

T. M. Willey, M. Bagge-Hansen, L. Lauderbach, R. Hodgkin, D. Hansen, C. May, T. van Buuren, D. M. Dattelbaum, R. L. Gustavsen, E. B. Watkins, M. A. Firestone, B. J. Jensen, T. Graber, S. Bastea and L. Fried.  
AIP Conference Proceedings. Volume 1793. Issue 1. 030012 (2017). doi:10.1063/1.4971470.

## 4. Time resolved small angle X-ray scattering experiments performed on detonating explosives at the advanced photon source: Calculation of the time and distance between the detonation front and the x-ray beam

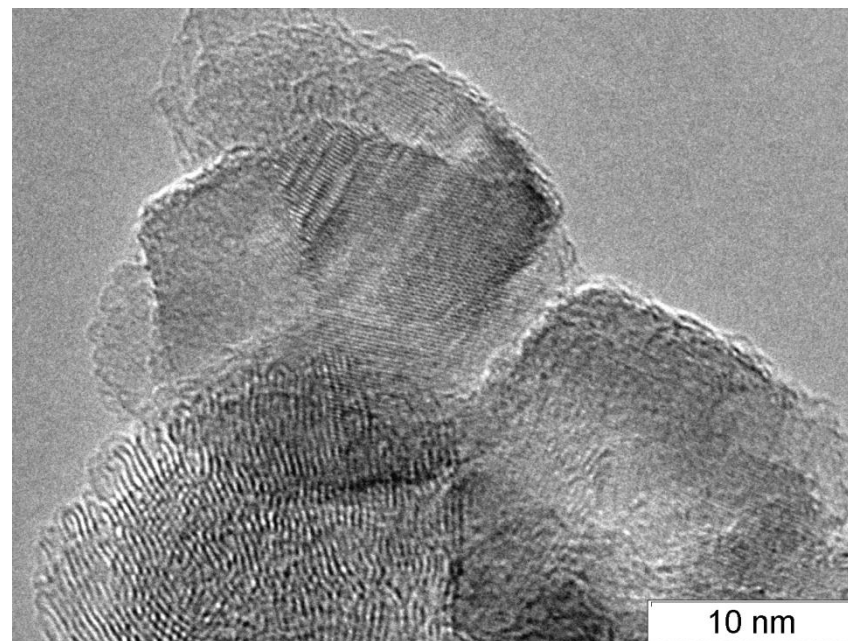
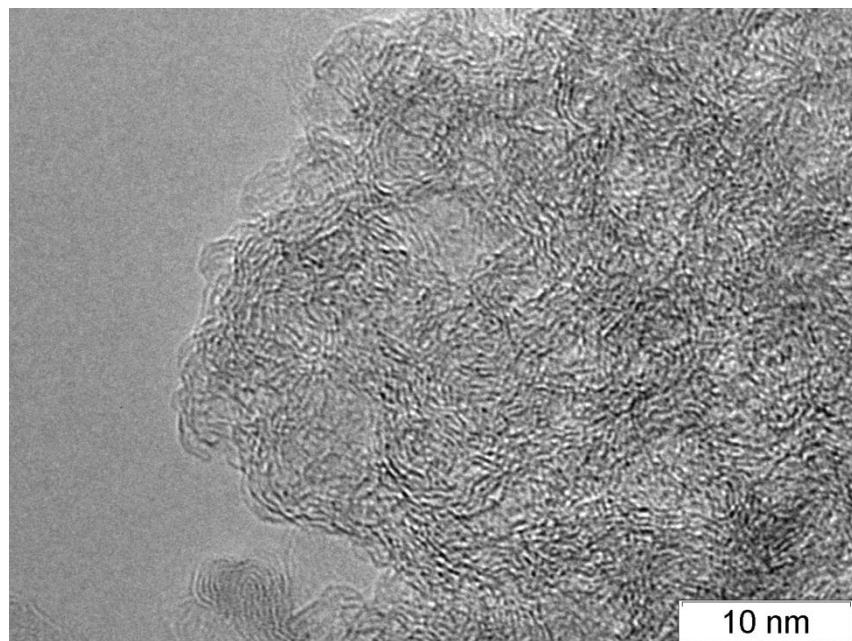
R. L. Gustavsen, D. M. Dattelbaum, E. B. Watkins, M. A. Firestone, D. W. Podlesak, B. J. Jensen, B. S. Ringstrand, R. C. Huber, J. T. Mang, C. E. Johnson, K. A. Velizhanin, T. M. Willey, D. W. Hansen, C. M. May, R. L. Hodgkin, M. Bagge-Hansen, A. W. van Buuren, L. M. Lauderbach, A. C. Jones, T. J. Graber, N. Sinclair, S. Seifert and T. Gog.  
Journal of Applied Physics. Volume 121. Issue 10. 105902 (2017). doi: http://dx.doi.org/10.1063/1.4978036.

## 5. Evolution of Carbon Clusters in the Detonation Products of the Triamino-Trinitro-Benzene (TATB)-Based Explosive PBX 9502

Erik B Watkins, Kirill A Velizhanin, Dana McGraw Dattelbaum, Richard L. Gustavsen, Tariq D Aslam, David W Podlesak, Rachel C. Huber, Millicent Anne Firestone, Bryan S Ringstrand, Trevor Michael Willey, Michael Bagge-Hansen, Ralph L Hodgkin, Lisa Lauderbach, Anthony van Buuren, Nicholas Sinclair, Paulo A Rigg, Soenke Seifert and Thomas Gog.  
J. Phys. Chem. C, Just Accepted Manuscript DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05637

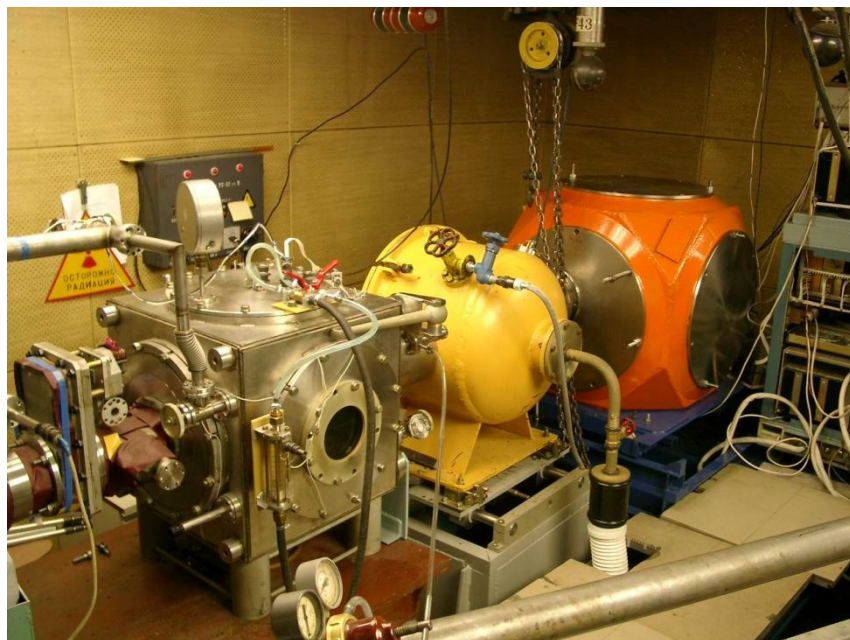
17.10.2017 г.

# Сохраненные продукты детонации ТНТ



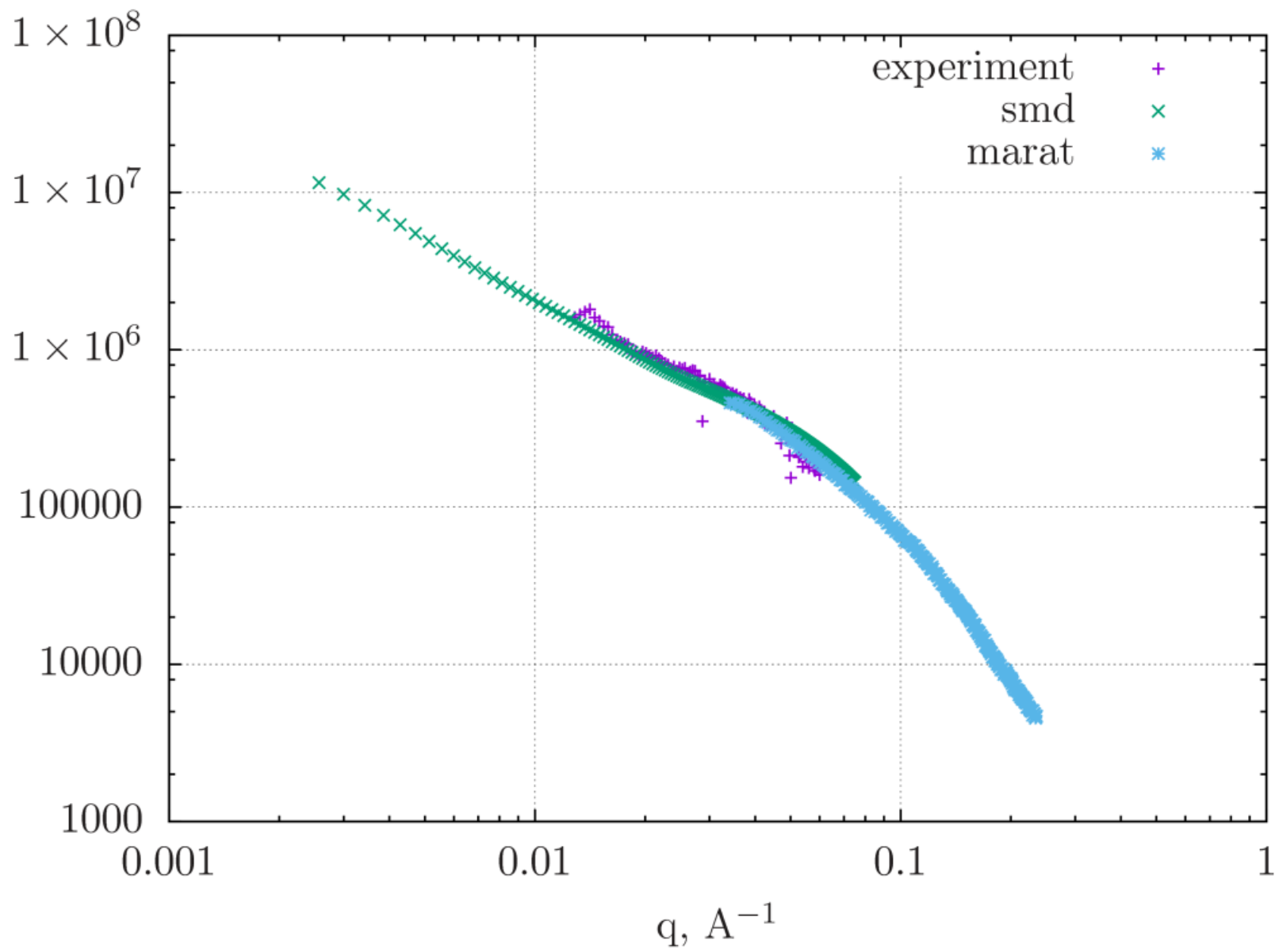
# Экспериментальная база ИГиЛ СО РАН

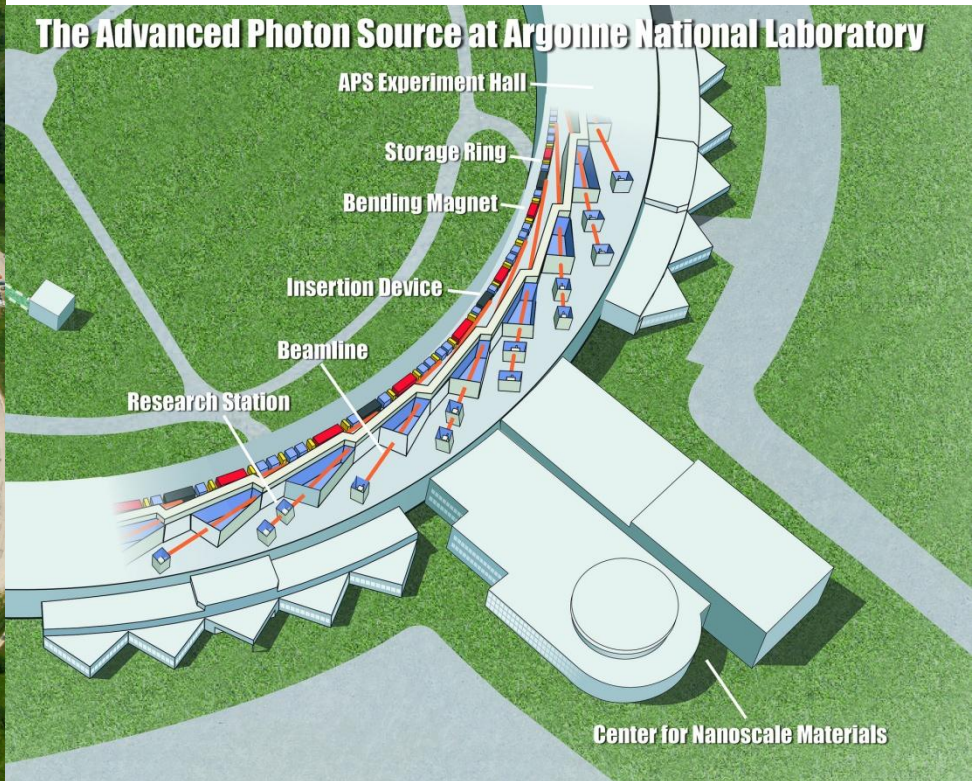
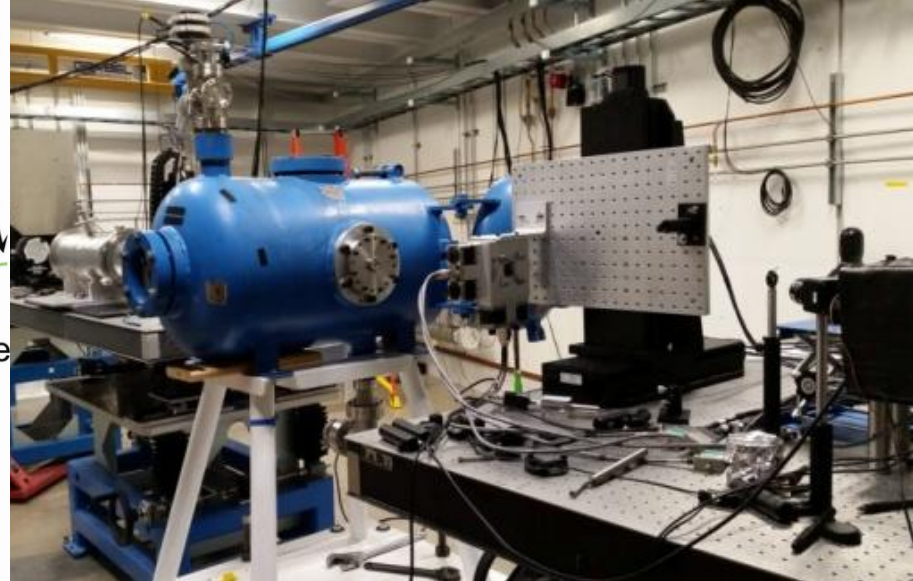
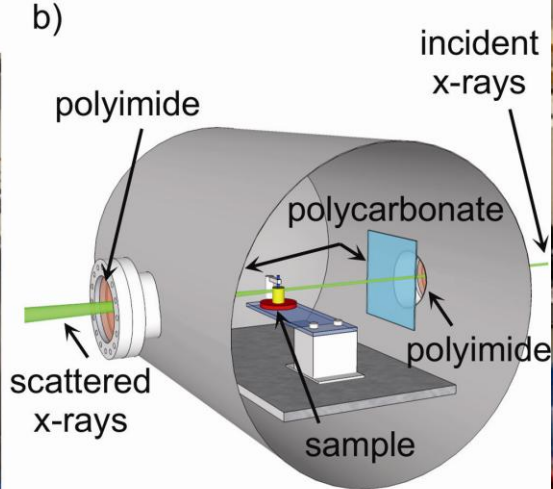
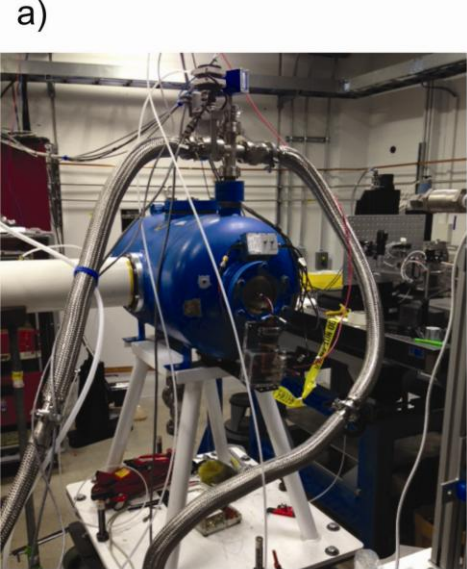
1999 год – стенд для изучения детонационных процессов с использованием СИ ускорительного кольца ВЭПП-3. Масса исследуемого заряда 20 г, время между кадрами 124 нс. Эффективная энергия 20 кэВ. Возможность откачки камеры до 7 торр.

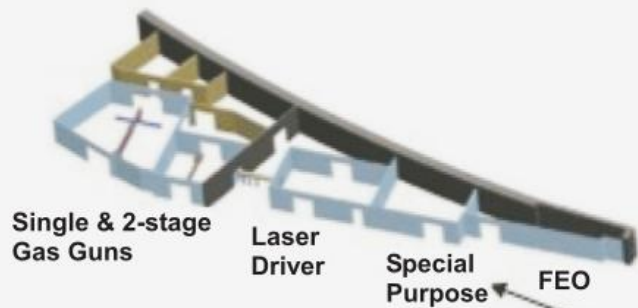


2014 год – стенд для изучения детонационных процессов с использованием СИ ускорительного кольца ВЭПП-4. Масса исследуемого заряда 200 г, время между кадрами 610 нс. Эффективная энергия 36 кэВ.





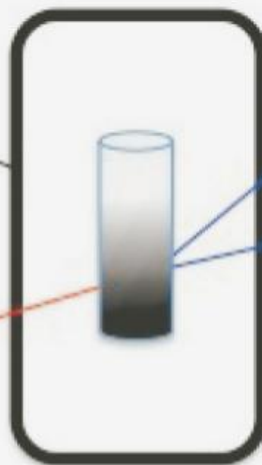




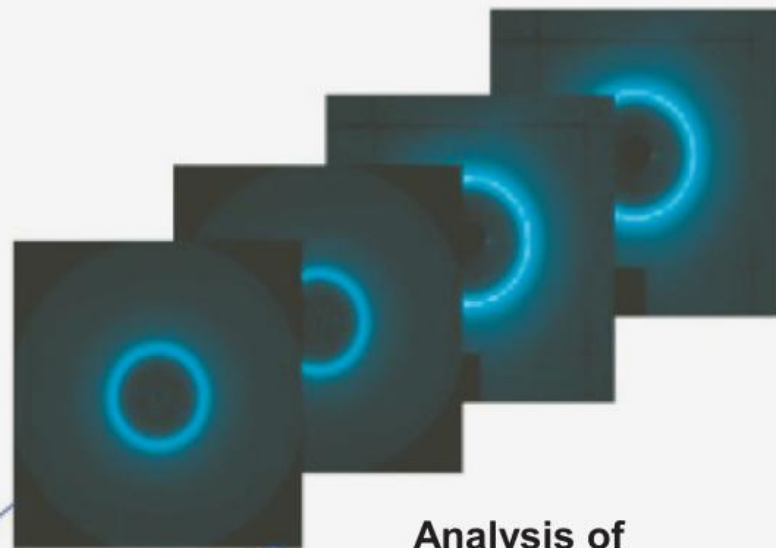
**Sector 35**



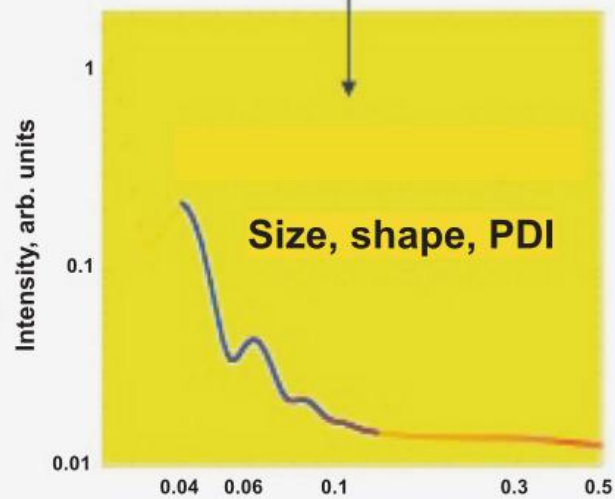
**APS top-up mode  
24 bunch sequence**



**Detonation experiment**

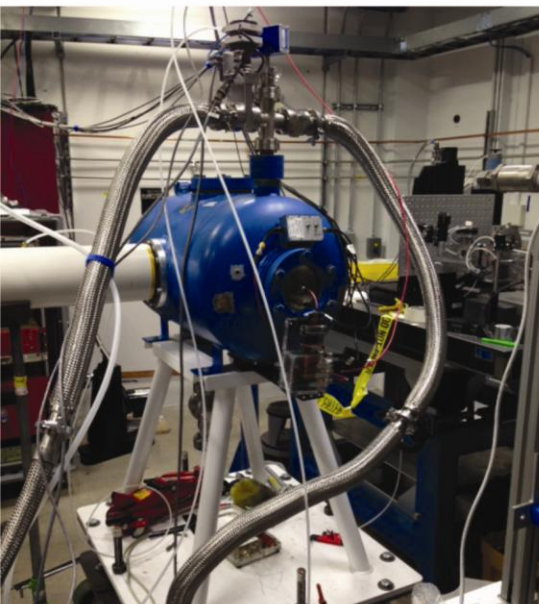


**Analysis of  
TRSAXS images**

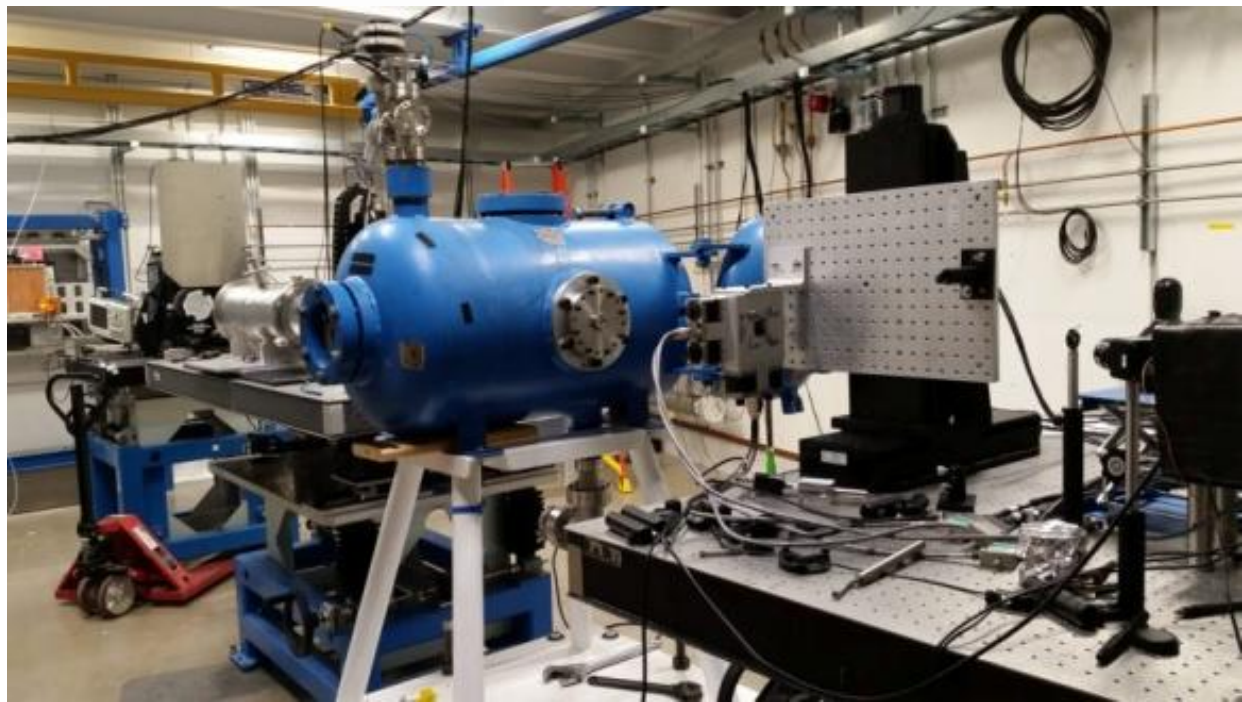
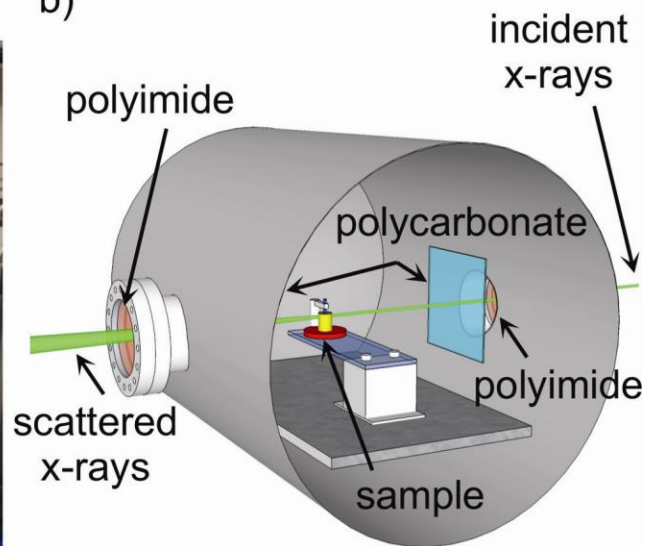


# Экспериментальная база APS

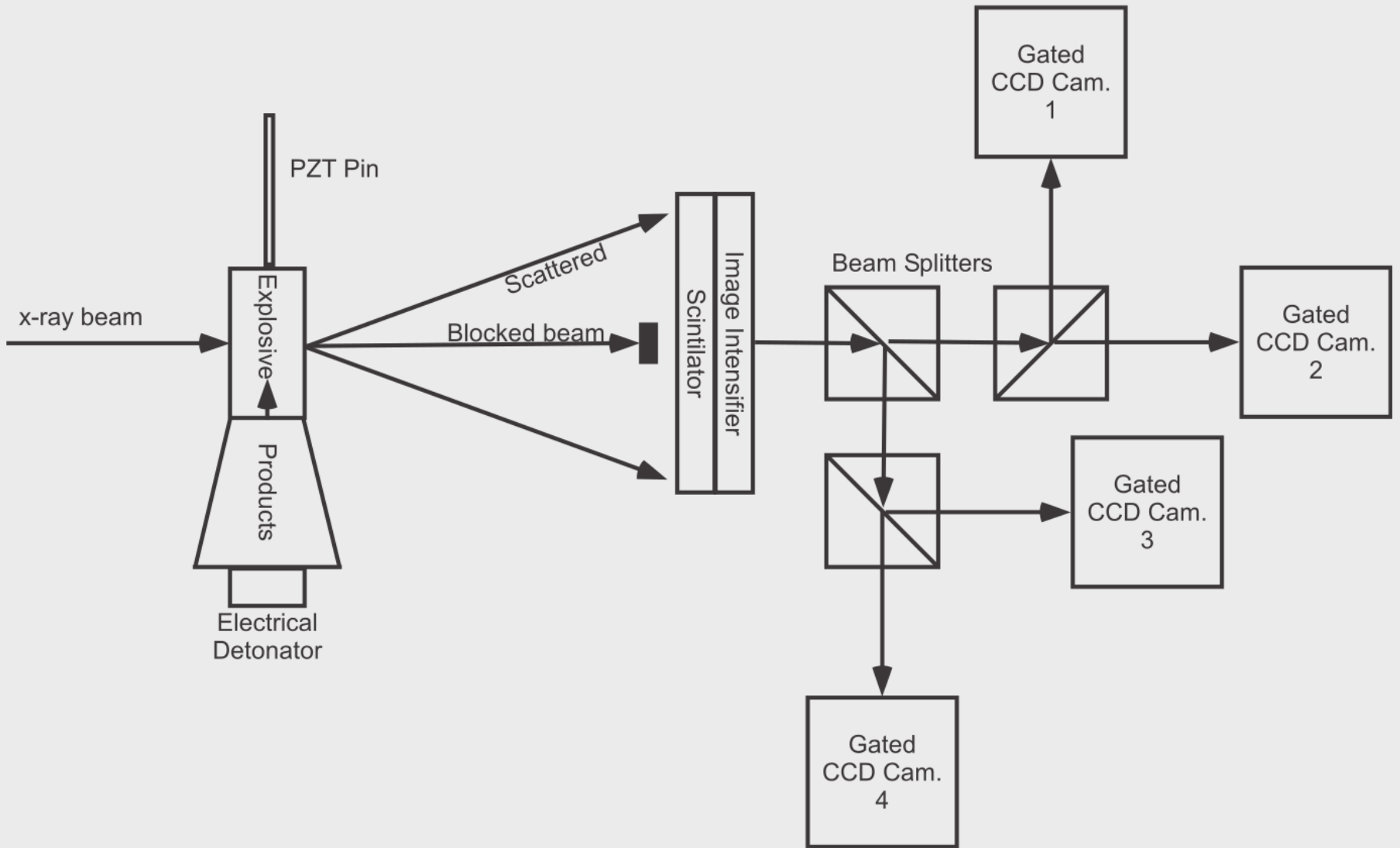
a)



b)



2015 год – стенд для изучения детонационных процессов с использованием СИ ускорительного кольца APS. Теоретическая масса исследуемого заряда 10 г.[1], реально взорванная масса, опубликованная в [4] – 3 г.  $P=0.2$  торр.



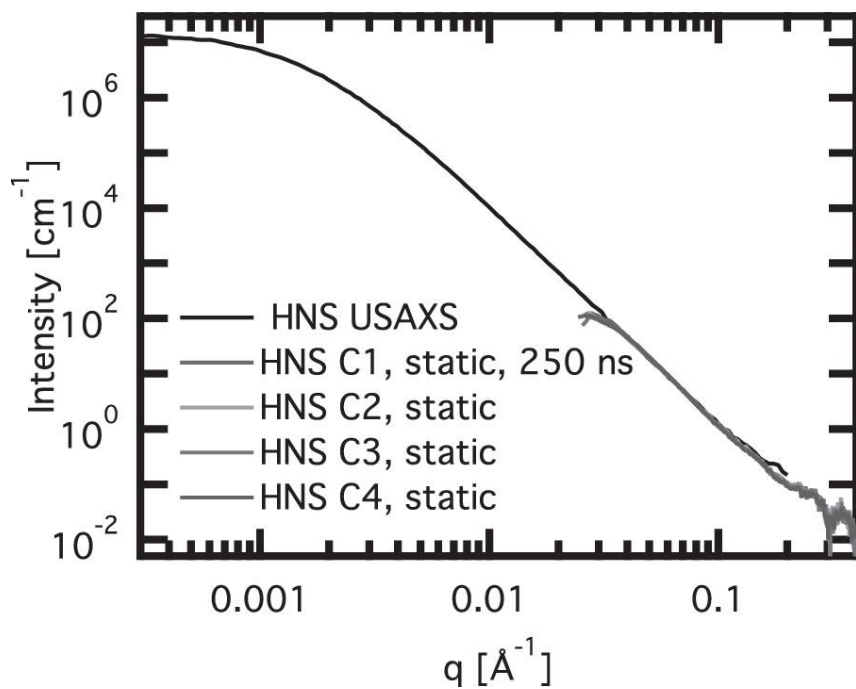


# 1. Measurement of carbon condensates using small-angle x-ray scattering during detonation of the high explosive hexanitrostilbene

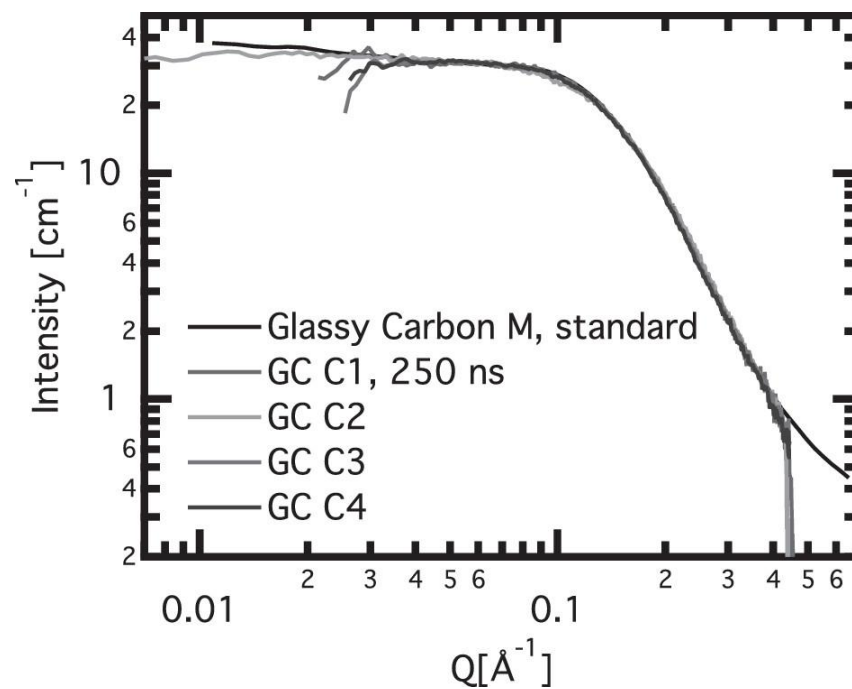
(Received 20 April 2015; accepted 12 June 2015; published online 24 June 2015)

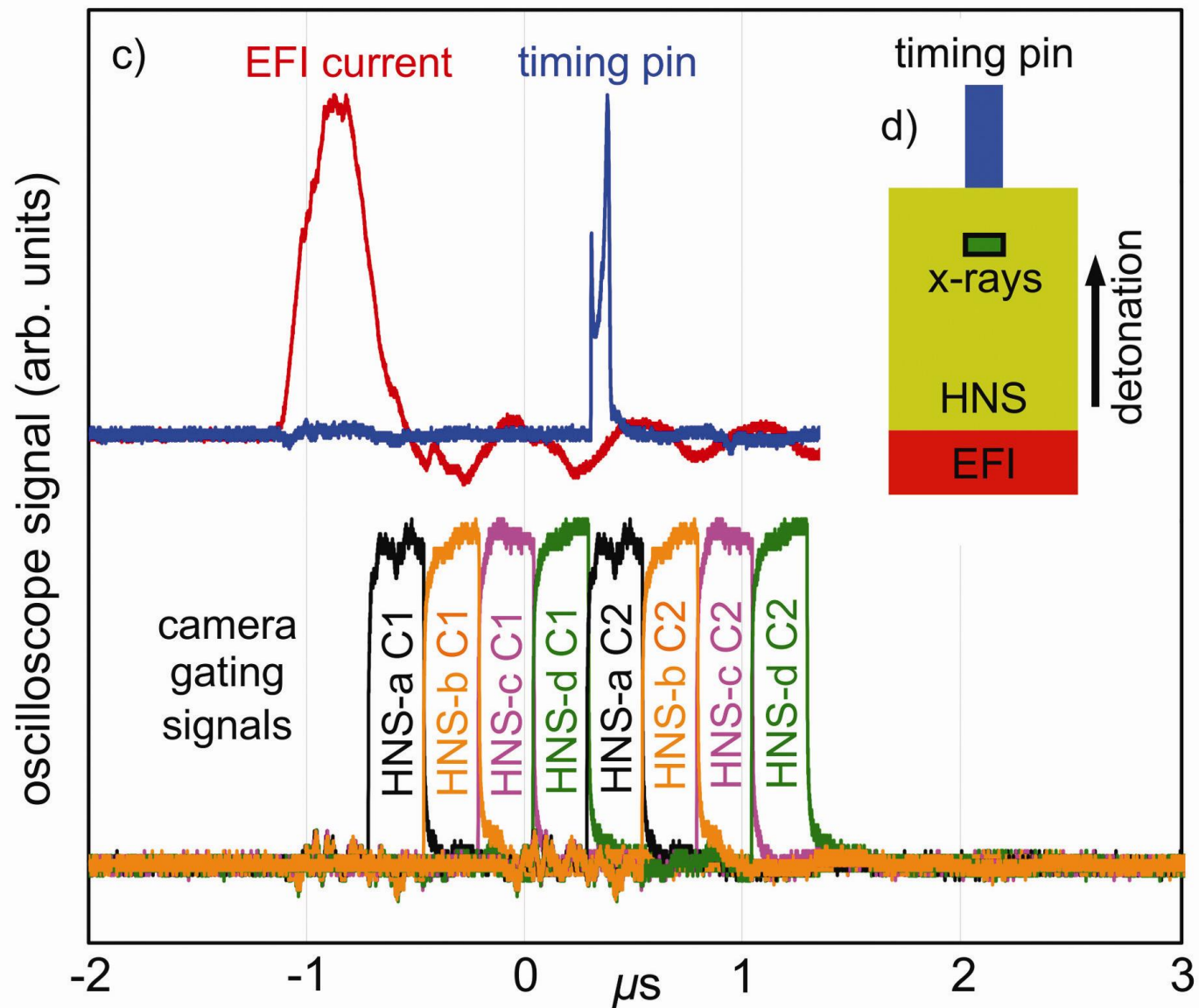
- Параметры заряда: HNS IV (ГНС, Гексанитростильбен,  $C_{14}H_6N_6O_{12}$ ), **m=400мг, Ø=6.34мм, h=8.13 8.34мм, ρ=1.53 1.56 г/см<sup>3</sup>, P=200 мторр.**
- Параметры СИ: 324-банчевый режим (периодичность 11.4 нс, длительность 52 пс), E=23.6 кэВ (600 эВ fwhm), пучок 200x50 мкм. **Интегрируют сигнал за 250 нс (≈22 банча).**
- Регистрирующая аппаратура: **Люминофор Lu<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>:Ce (LSO:Ce), время затухания 50 нс + 4 камеры (PI-MAX4 ICCD, Princeton Instruments). 2D.** Расстояние до детектора 1 м.
- Методика обработки данных: Guinier, Porod/power-law regions.
- Вектор рассеяния q:  $4 \cdot 10^{-2}$  –  $4 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}^{-1}$

## Статический МУРР от ГНС

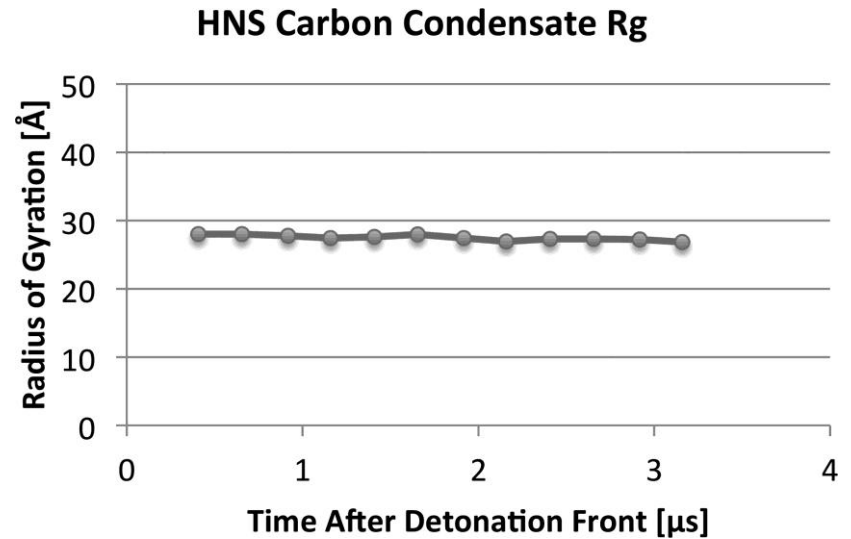
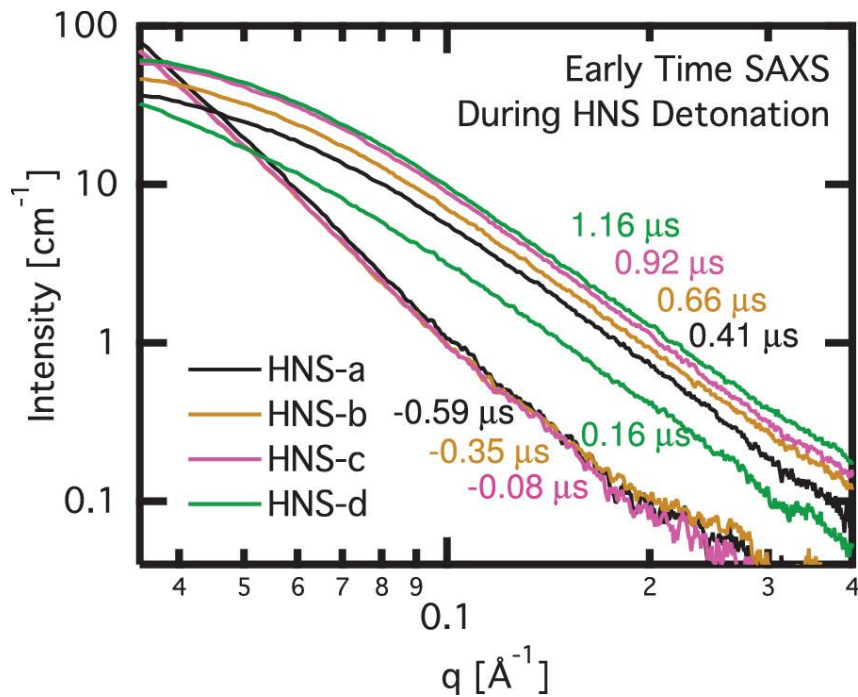


## Статический МУРР от стекловидного углерода





# Результат:



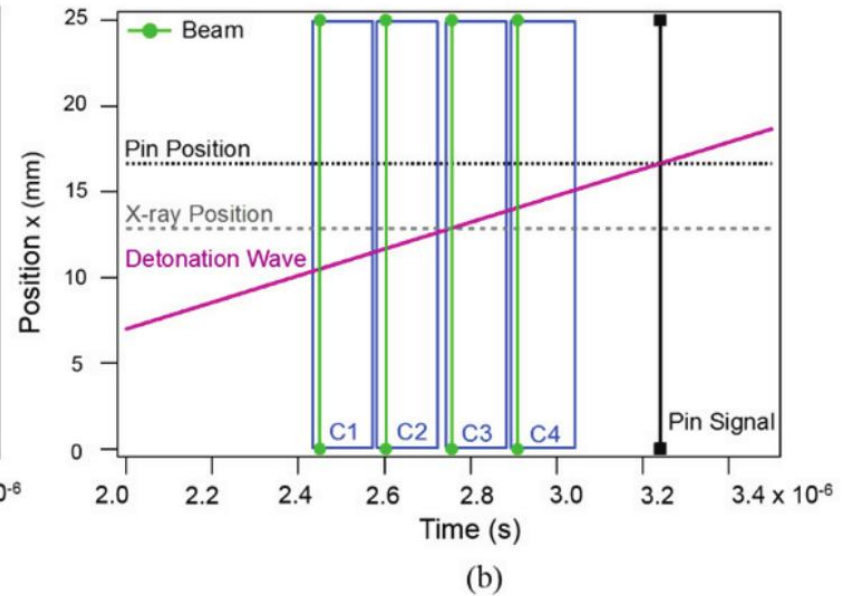
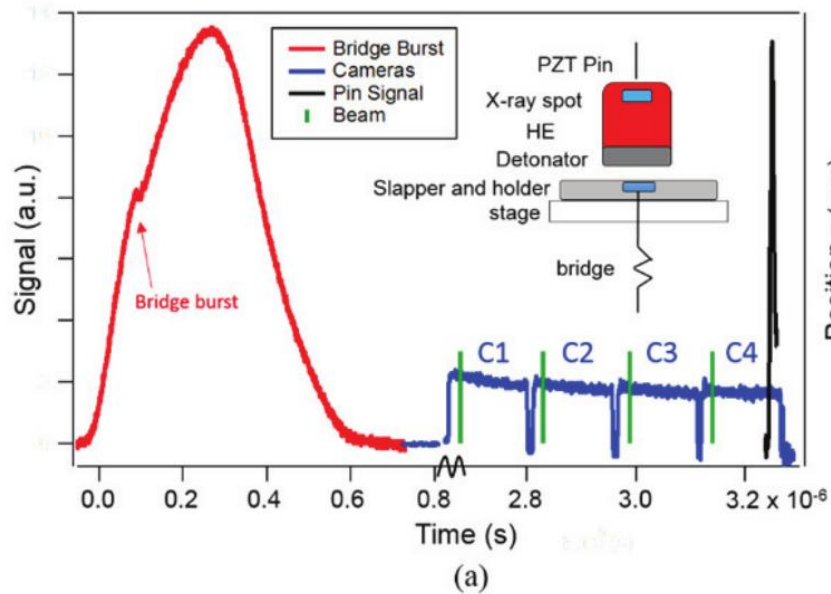
# Заключение:

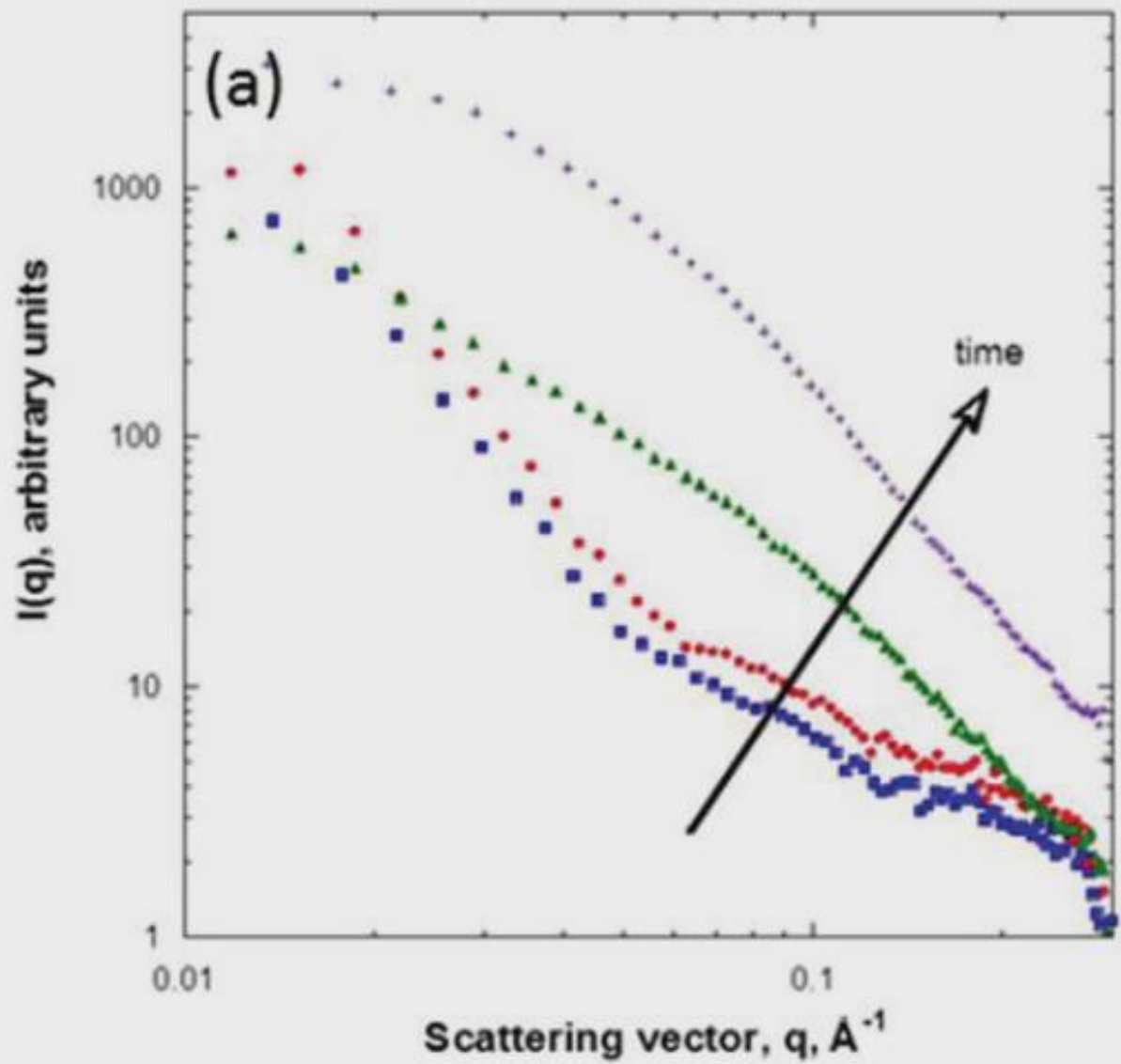
- Экспериментальные данные показывают, что ГНС содержит в продуктах реакции углеродные частицы с радиусом гирация  $R_g=2.7\text{нм}$  ( $D=\sqrt{\quad}=7\text{нм}$ ) менее чем за **400** нс после прохождения детонационного фронта, и этот размер остается постоянным в течении нескольких последующих микросекунд.
- Наклон Power-law = -3, что соответствует неупорядоченной, нерегулярной или сложенной  $sp^2$  гибридизации в относительно монодисперсной структуре, обладающей радиусом гирация  $R_g=2.7\text{нм}$ .

**2. Structural evolution of detonation carbon in composition B by X-ray scattering**  
(SHOCK COMPRESSION OF CONDENSED MATTER - 2015: Proceedings of the  
Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of  
Condensed Matter. Conference date: 14–19 June 2015. Published: Jan 13, 2017)

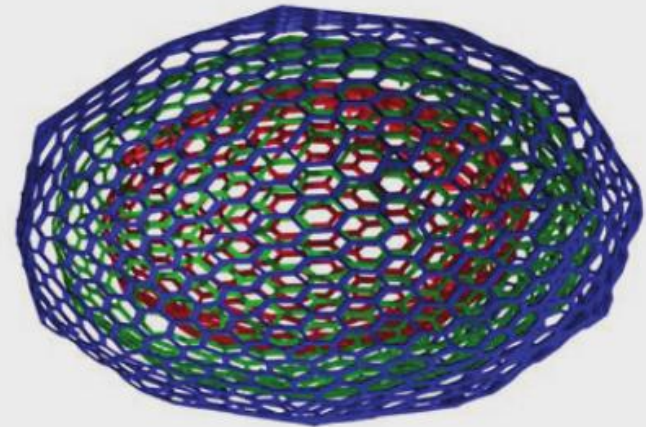
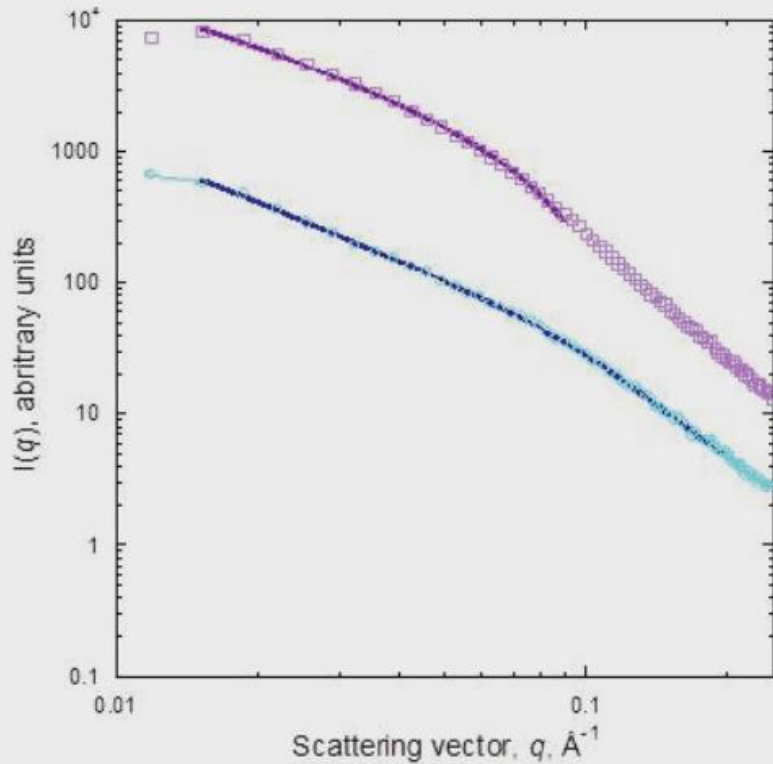
- Параметры заряда: Composition B (ТГ 40/60),  $m=2$  г,  $\varnothing=9.588$  мм,  $h=16.64$  мм,  $\rho=1.678$  г/см<sup>3</sup>,  $P=200$  мторр.
- Параметры СИ: 24-банчевый режим (периодичность 153.4 нс, длительность 80 пс),  $E=23.6$  кэВ (600 эВ fwhm), пучок 200x50 мкм.  
**Сигнал получают за 1 банч.**
- Регистрирующая аппаратура: Люминофор  $\text{Lu}_2\text{SiO}_5:\text{Ce}$  (LSO:Ce), время затухания 50 нс + **4 камеры** (PI-MAX4 ICCD, Princeton Instruments). **2D**.  
Расстояние до детектора 1.75 м.
- Методика обработки данных: Guinier, Porod/power-law regions.
- Вектор рассеяния  $q$ : 0.01 – 0.3 Å<sup>-1</sup>

# Синхронизация









- $t=100$  нс,  $R=6.45$  2.2 Å ( $D=1.29$  0.44<sub>HM</sub>)
- $t=260$  нс,  $R=14.7$  3.4 Å ( $D=2.94$  0.68<sub>HM</sub>)

- Анализ собранных характеристик рассеяния показывает присутствие фрактальной многослойной углеродной конденсации.
- Сигналы МУРР, собранные в ранние времена, хорошо моделируются как наноразмерные шаровидные частицы углерода. Морфология первичных частиц хорошо сравнивается с данными рассеяния, собранными на природном углеродном аллотропе - шунгите.
- *Наблюдается динамика в первые 260 нс.*
- *Приведен только 1 эксперимент.*

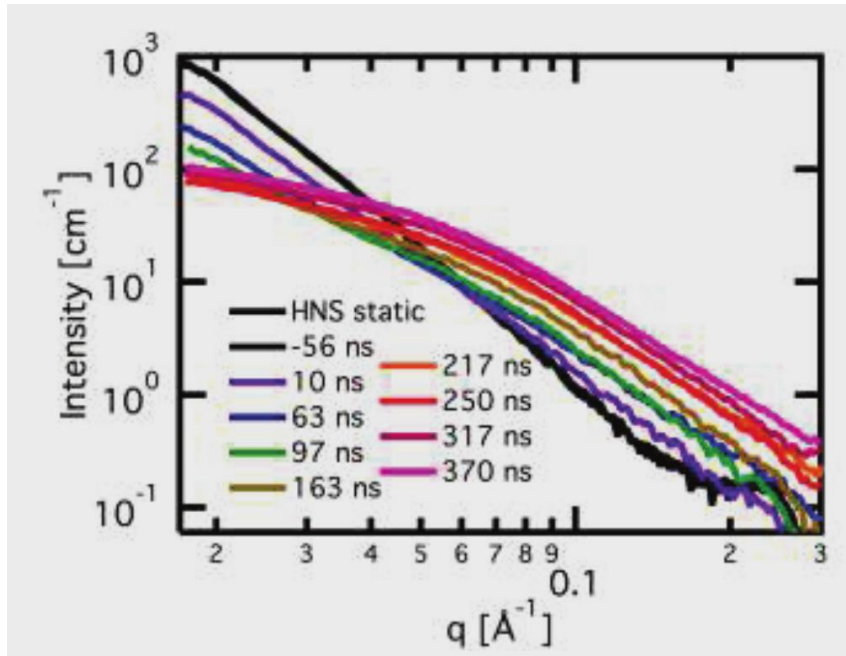
### 3. Measurement of carbon condensates using small-angle x-ray scattering during detonation of high explosives

(SHOCK COMPRESSION OF CONDENSED MATTER - 2015: Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. Conference date: 14–19 June 2015. Published: Jan 13, 2017)

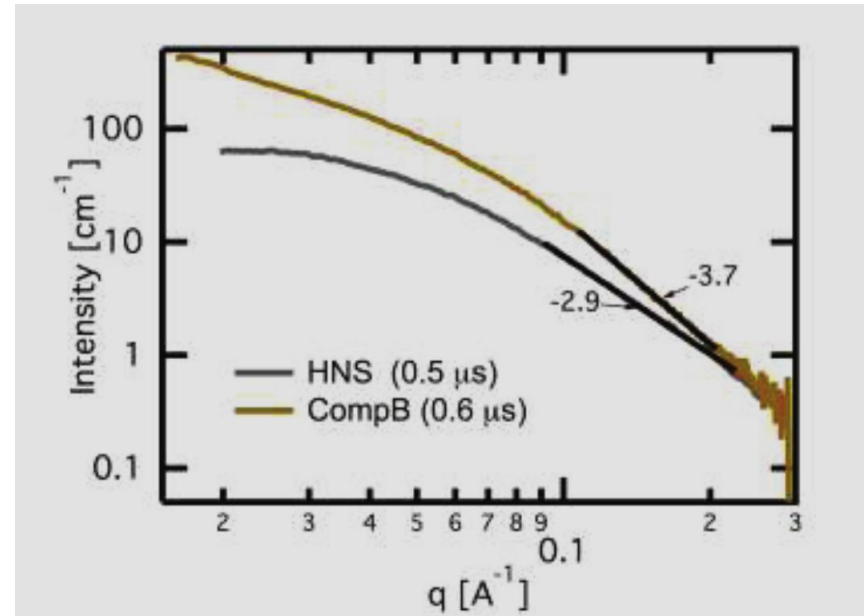
- Параметры заряда: HNS IV (ГНС, Гексанитростильбен,  $C_{14}H_6N_6O_{12}$ ),  $m=400$  мг,  $\varnothing=6.35$  мм,  $h=7.90$ – $7.95$  мм,  $\rho=1.53$ – $1.57$  г/см<sup>3</sup>,  $P=200$  мторр.
- Параметры заряда: Composition B (ТГ 40/60),  $m=2$  г,  $\varnothing=9.53$  мм,  $h=16.55$ – $16.72$  мм,  $\rho=1.68$ – $1.70$  г/см<sup>3</sup>,  $P=200$  мторр.
- Параметры СИ: **32 (24-???)-банчевый режим** (периодичность 153.4 нс, длительность 80 пс),  $E=23.6$  кэВ – ГНС,  $E=14.5$  кэВ – Composition B, пучок 200x50 мкм. **Сигнал получают за 1 банч.**
- Регистрирующая аппаратура: **Люминофор**  $Lu_2SiO_5:Ce$  (LSO:Ce), время затухания 50 нс + **4 камеры** (PI-MAX4 ICCD, Princeton Instruments). **2D**. Расстояние до детектора 1.75 м.
- Методика обработки данных: Guinier, Porod/power-law regions.
- Вектор рассеяния  $q$ : 0.02–0.3 Å<sup>-1</sup>

# Основные результаты:

## Динамика ГНС



## Сравнение ГНС и ТГ на больших временах

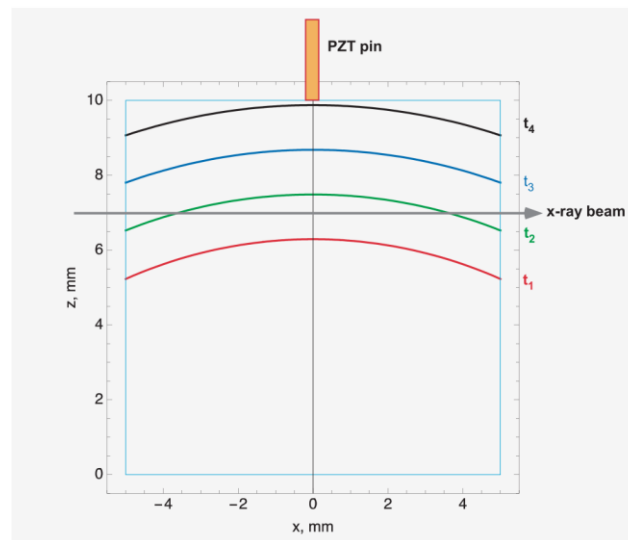
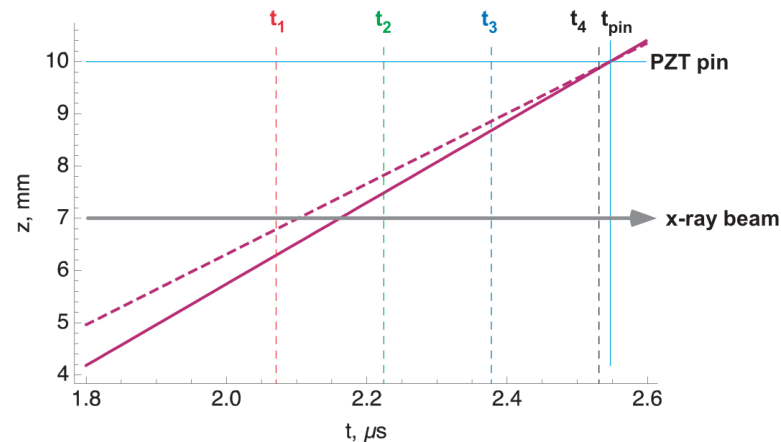
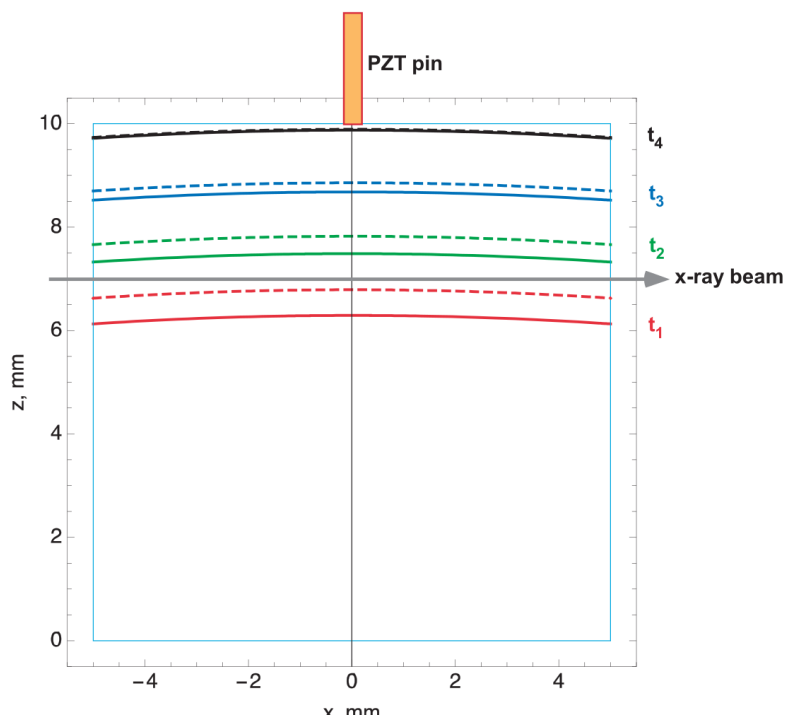


# Заключение:

- Для ГНС профиль МУРР эволюционирует в течение первых 300 нс в форму с  $R_g \sim 3$  нм и Porod/power-law - 2,9, что согласуется с сложной морфологией  $sp^2$  углерода. Конденсированный углерод от ГНС и Composition В демонстрируют различные профили МУРР. Оба ВВ демонстрируют области Guinier, согласующиеся с частицами  $R_g \sim 3$  нм, но МУРР от конденсационного углерода Composition В (здесь около 0.6 микросекунд) демонстрируют степенной закон -3,7, что указывает на составляющие  $sp^3$  углерода и согласуется с детонационным наноалмазом, наблюдаемым в продуктах Composition В.

# 4. Time resolved small angle X-ray scattering experiments performed on detonating explosives at the advanced photon source: Calculation of the time and distance between the detonation front and the x-ray beam

(Received 30 November 2016; accepted 24 January 2017; published online 10 March 2017)



- *В работе приведено общее описание установки по изучению МУРР на APS.*
- *Приводятся применяемые методы для соотношения координаты фронта и луча СИ.*
- *Рассчитана разница в этих временах методом Монте-Карло.*

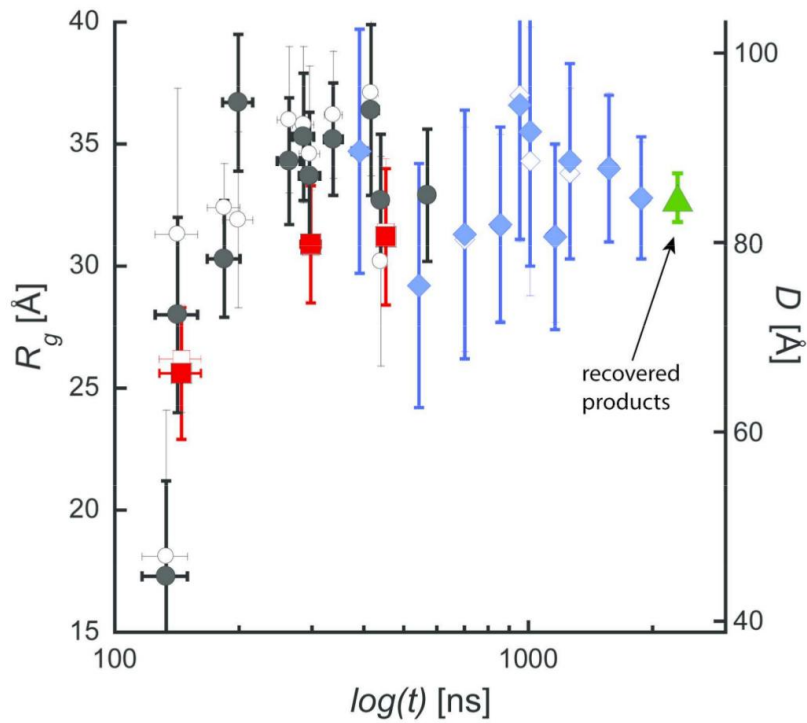
## 5. Evolution of Carbon Clusters in the Detonation Products of the Triamino-Trinitro-Benzene (TATB)-Based Explosive PBX 9502.

(Publication Date (Web): 15 Aug 2017)

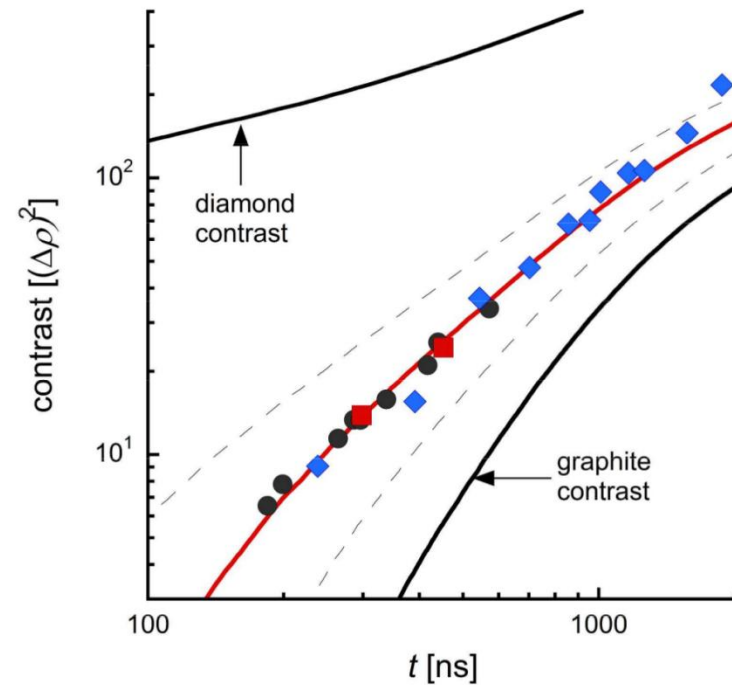
- Параметры заряда: **PBX 9502** (95% TATB + 5% fluoropolymer binder (Kel-F 800)), **m=1.5г.**, **Ø=10мм**, **h=10мм**,  $\rho=1.89 \text{ г/см}^3$ , **P=200 мторр**.
- Параметры СИ: периодичность 153.4 нс, длительность 80 пс, **E=14.7/14.3кэВ** (600эВ FWHM), пучок 200x50 мкм. **Сигнал получают за 1 банч.**
- Регистрирующая аппаратура: **Люминофор**  $\text{Lu}_2\text{SiO}_5:\text{Ce}$  (LSO:Ce), время затухания 30 нс + **4 камеры** (PI-MAX4 ICCD, Princeton Instruments). **2D.**
- Методика обработки данных: Guinier, Porod/power-law regions.
- Вектор рассеяния  $q$ : 0.01 0.3  $\text{Å}^{-1}$

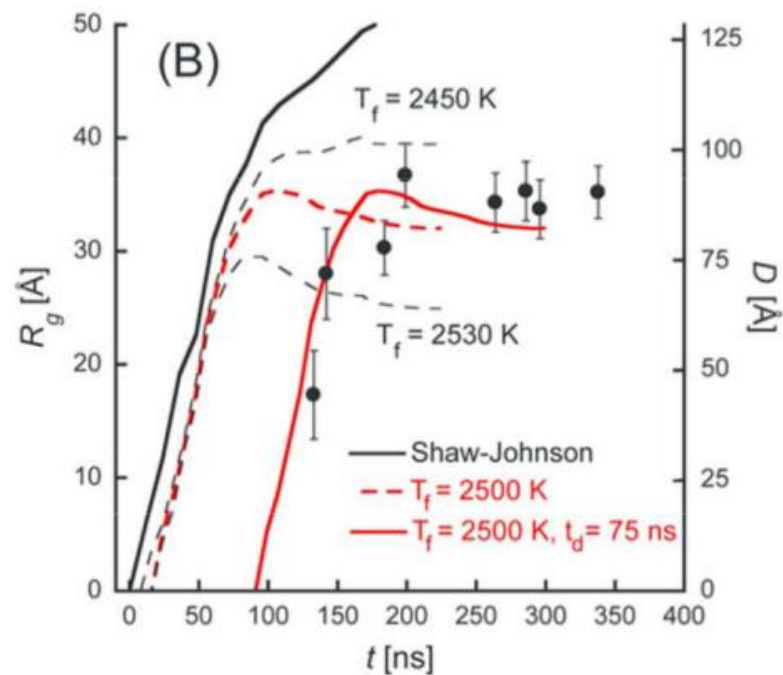
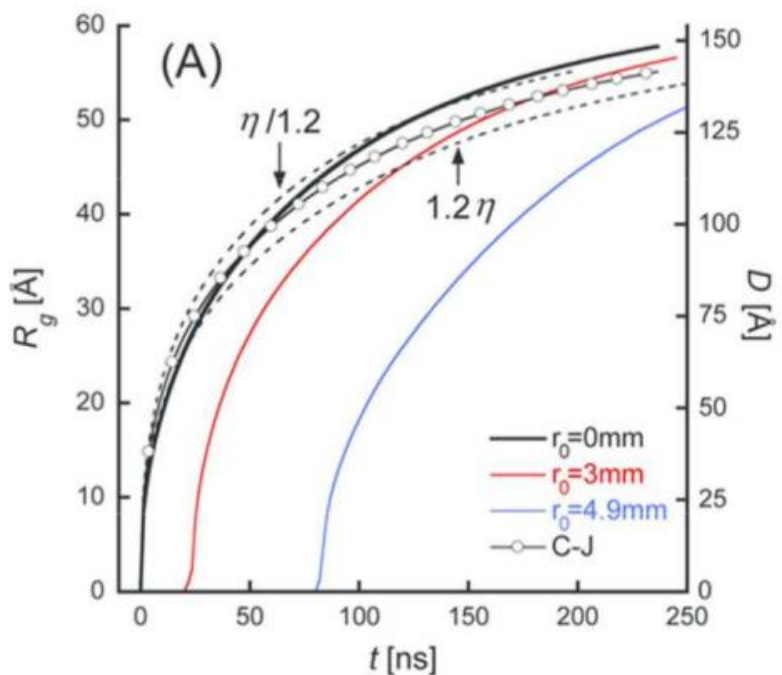
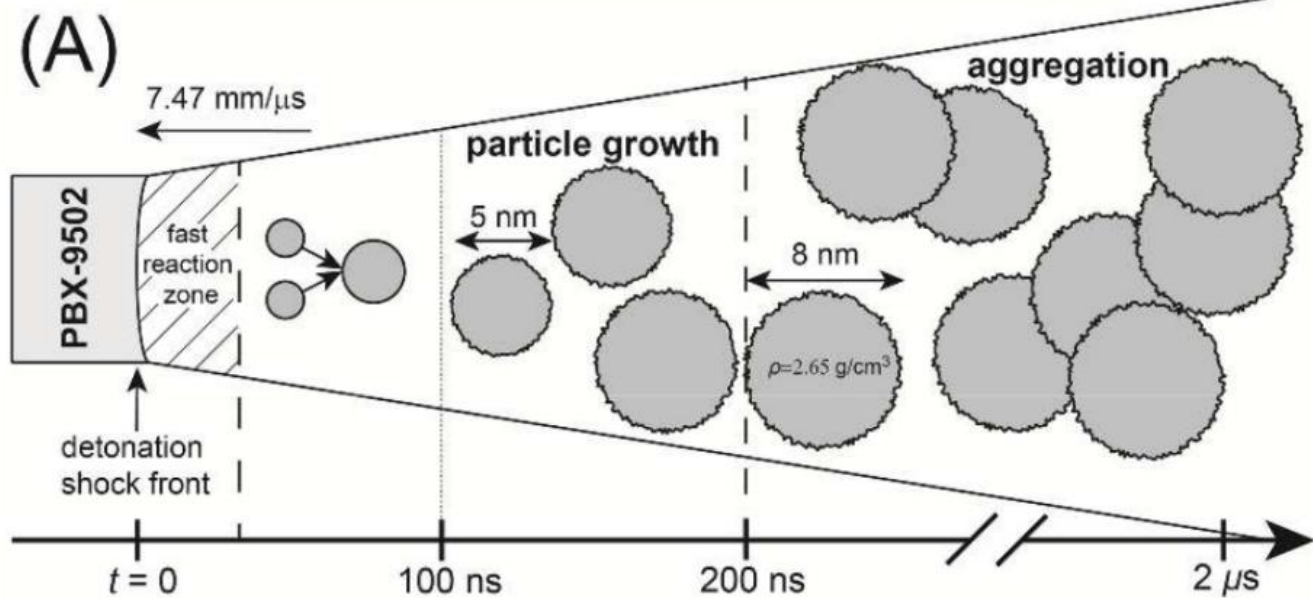


## Динамика роста углеродных наночастиц



## 20% конденсированного углерода в алмазной фазе





# Заключение:

- Анализ данных рассеяния показал быстрый начальный рост углеродных кластеров в течение 200 нс после прохождения фронта детонации до среднего радиуса инерции  $R_g \sim 3.3 \text{ нм}$  ( $D \sim 8,4 \text{ нм}$ ). Рост кластеров в размерной области, исследованной в экспериментах, не продолжался после  $\sim 200 \text{ нс}$ , а размер частиц углерода оставался постоянным до 2 мкс.
- Хотя аллотропная информация об углеродных продуктах не была непосредственно доступна в этом эксперименте, анализ рассеянных интенсивностей позволил оценить плотность углерода кластеров, которая соответствовала смеси турбостратного графита и алмаза 4:1.

# Заключение:

- Чтобы получить представление о динамике образования первичных углеродных наночастиц, мы смоделировали углеродную кластеризацию с использованием подхода Shaw-Johnson в сочетании с расчетами реактивного потока. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными наблюдениями:
  - (i) температура замораживания углеродной кластеризации была установлена равной  $T_f = 2500$  К,
  - (ii) начало кластеризации углерода «задерживается» на 75 нс относительно фронта детонации, чтобы объяснить начальные химические превращения, приводящие к высвобождению свободного углерода.
- Хорошее согласие модели Shaw-Johnson и экспериментальных данных свидетельствует о том, что не существует большого активационного барьера или значительной фрагментации, так что кластеризация углерода является необратимым, диффузионно-ограниченным процессом с радиусами реакции, определяемыми размерами частиц при температурах выше, чем  $T_f \sim 2500$  К.

