

# РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПО КРИСТАЛЛУ АЗИДА СЕРЕБРА ВОЛНЫ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ

Каленский А.В., Кригер В.Г.

Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия

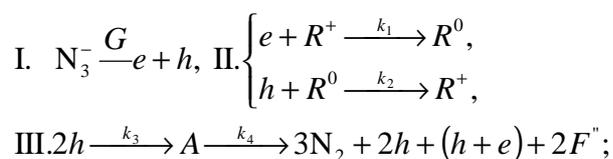
kriger@kemsu.ru

Экспериментальное исследование кинетики процессов, приводящих к взрывному разложению азидов тяжелых металлов (АТМ) интенсивно проводилось последние сорок лет. Несмотря на это дискуссионным остается вопрос не только о конкретном механизме инициирования АТМ, но и о природе взрыва. В работе [1] впервые выдвинута гипотеза о цепном механизме разложения АТМ под действием различных энергетических факторов, предложены модели разветвленных цепных химических реакций, проведен расчет и сопоставление с экспериментом закономерностей взрывного разложения АТМ. Установленные в последние годы новые явления: предвзрывная проводимость и люминесценция доказали цепной характер разложения АТМ лазерным и электронным импульсами [2].

Таким образом, цепная природа взрывного разложения АТМ доказана экспериментально и теоретически. В данной работе проведено математическое моделирование распространения по кристаллу волны цепной реакции.

## Модель разветвленной цепной реакции

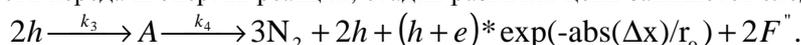
Наиболее вероятной моделью взрывного разложения азида серебра (АС), инициированного импульсным излучением, является бимолекулярная модель [1]:



где  $R^0, R^+$  — центры рекомбинации в различных зарядовых состояниях,  $2F''$  представляет собой комплекс, состоящий из двух анионных вакансий с размещенными там тремя молекулами азота. В модели предполагается, что этот комплекс захватывает два электрона (возможно на соседних катионах серебра), что приводит к появлению двух свободных дырок. Первая стадия — генерация e.h. пар внешним излучением. Вторая — рекомбинации e.h. пар на объемных и поверхностных локальных центрах, при этом скорость рекомбинации носителей лимитируется захватом дырки на нейтральном центре:  $V_r \approx k_r p$  [1]. Третья стадия — взаимодействия двух дырок, локализованных в соседних узлах кристаллической решетки, с образованием промежуточного комплекса  $A(N_6)$ , последующим его распадом на молекулярный азот с выделением энергии идущей на генерацию носителей, является стадией развития цепи.

В работе [3] проведено исследование зависимости критической энергии инициирования АС от диаметра зоны облучения. Зависимость критической энергии инициирования АС от диаметра зоны облучения проявляется при  $d = 600$  мкм, а при 200 мкм критическая плотность энергии удваивается. Если возможна генерация электрон дырочных пар за счет энергии химической реакции вне зоны реакции, тогда, согласно модели [1]  $W = W_0(1 + d/d_0)^2$ , где  $W_0$  — энергия инициирования при  $d \rightarrow 0$ ,  $r_0 = d_0/2$  — характерный размер области диссипации энергии. Спрямление экспериментальных данных в координатах [3], подтверждает гипотезу о возможности передачи энергии из зоны реакции кристаллу. Определены пространственно-временные характеристики процессов передачи энергии химической реакции кристаллической решетке АС: а)  $W_0 = 7$  мкДж. б)  $r_0 = 50$  мкм. в)  $H_\infty = H_k = 90$  мДж/см<sup>2</sup>. Характерное время развития взрывного разложения АС < 100 нс. Следовательно, скорость передачи энергии из зоны реакции  $> 5 \cdot 10^4$  см/с, в тоже время диффузия реагентов в данных условиях будет протекать со скоростью  $< 5 \cdot 10^2$  см/с, а тепловая разгрузка образца —  $< 3 \cdot 10^2$  см/с.

Если лимитирующей стадией процесса размножения носителей является реакция, с учетом возможности передачи энергии реакции, стадия развития цепи запишется следующим образом:



где  $r_0 \sim 50$  мкм — определено экспериментально [3].

В одномерном приближении проведено математическое моделирование развития и распространения разветвленной цепной реакции по кристаллу размерами 5000 мкм инициированной импульсным лазерным излучением в собственной области поглощения  $\alpha = 10^5$  см<sup>-1</sup>. На рис 1. показаны рассчитанные профили распределения концентраций реагентов через 0, 200, 400, 600 и 800 нс после окончания импульса. Из результатов

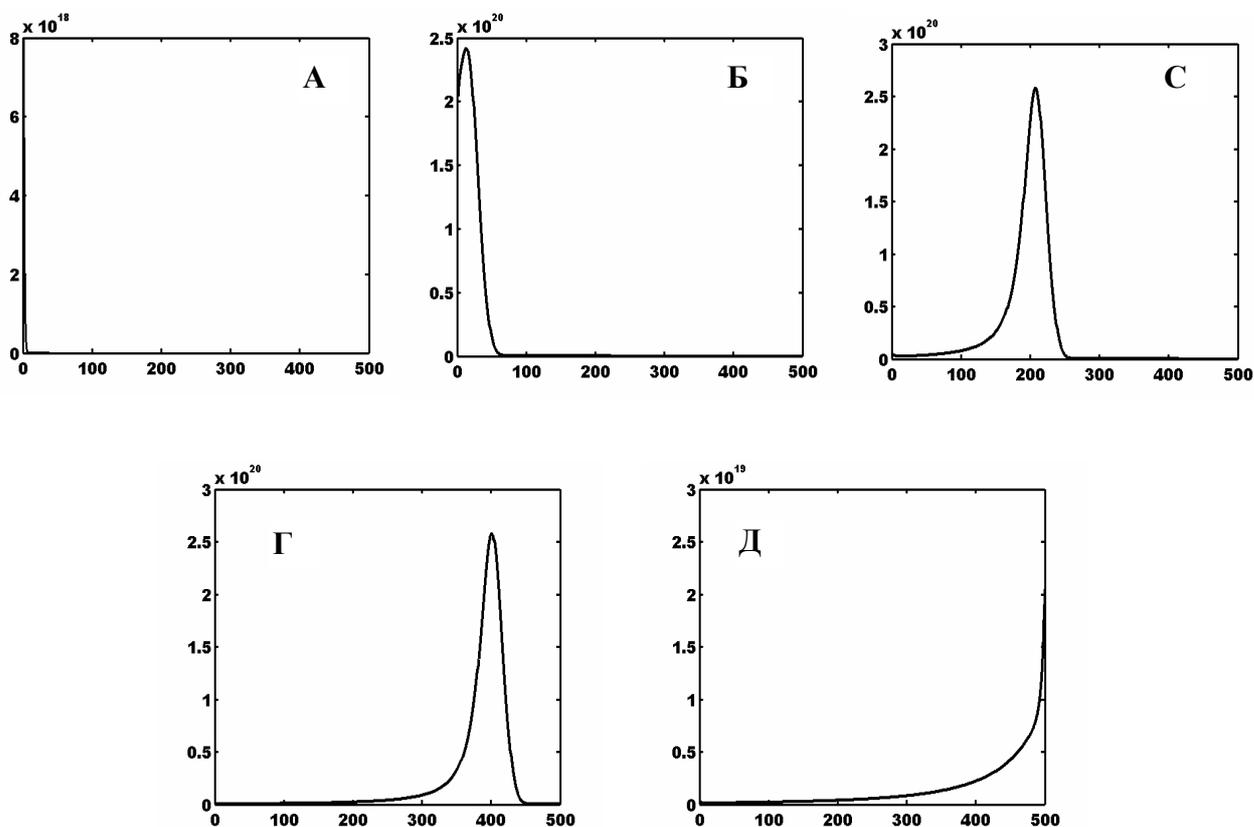


Рис. 1 Рассчитанные профили распределения концентраций реагентов через 0 (А), 200 (Б), 400 (В), 600 (Г) и 800 (Д) нс после окончания импульса

расчетов следует, что в соответствии с экспериментом скорость распространения реакции постоянна и определяется параметрами модели. Скорость распространения волны цепной реакции по кристаллу  $V = K * r_o * k_4^2 / (k_r + k_4) \sim 10^3$  м/с достаточно близка к экспериментальным значениям [4] и на два порядка превышает скорости процессов диффузии и теплопередачи. Работа выполнена при поддержке РФФИ.

#### Литература

1. Кригер В.Г., Каленский А.В. // Хим. Физика. 1995, № 4. - С.152.
2. В.Г. Кригер, А.В. Каленский, В.П. Ципелев, Ю.А. Захаров.// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2004, № 1. - С. С.169.
3. Кригер В.Г., Каленский А.В., Ципилев В.П., Захаров Ю. А.// Материалы II Всероссийской конференции, 9-12 ноября, Черноголовка.- М.: Янус-К, 2004, С.110.
4. Адуев Б.П., Алукер Э.Д., Белокуров Г.М., Захаров Ю.А., Кречетов А.Г. М.: ЦЭИ «Химмаш», 2002, С.116.