

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Анисичкина Владимира Федоровича «Механизм детонационного и ударно-волнового разложения органических веществ с образованием наноалмаза»

представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Работа посвящена комплексному экспериментальному и теоретическому исследованию механизмов детонационного и ударно-волнового разложения органических конденсированных веществ. При этом под механизмом детонационного разложения понимается и исследуется совокупность стадий, простых реакций и процессов, из которых складывается явление детонации.

Актуальность работы.

Знание механизма детонационного разложения энергетических материалов (ЭМ), характера и последовательности протекающих при этом основных химических реакций, промежуточных продуктов детонации актуально при разработке новых более эффективных в применениях ЭМ, в том числе в создании методов ударно-волнового синтеза наноматериалов, а также при разработке теории высокоинтенсивных, быстрых химических превращений.

Структура диссертации.

Диссертация имеет традиционную структуру общим объемом 194 страницы, состоит из Введения, пяти основных Глав, Заключения, Списка литературы и Приложений. Список литературы отражает необходимые ключевые публикации по теме диссертации.

В первой главе приведены описания и результаты экспериментальных работ по образованию свободного углерода при детонационном разложении ЭМ и при ударно-волновом разложении органических веществ.

Во второй главе приведены постановки опытов с введенным в состав молекул тротила изотопом углерода ^{13}C и результаты измерений распределений углерода ^{13}C по конденсированным и газообразным продуктам взрыва. Анализируются возможные сценарии смешения и взаимодействия различных компонентов ЭМ в процессе детонации.

В третьей главе выполнен численный анализ приведенных в предыдущих Главах экспериментальных данных по составу продуктов взрыва органических ЭМ и по распределению атомов углерода ^{13}C по конденсированным и газообразным продуктам взрыва.

Четвертая глава посвящена построению и обоснованию модели детонационного и ударно-волнового разложения углеродосодержащих материалов, адекватной полученным опытным и расчетным данным.

В пятой главе рассчитываются давление и температура среды за фронтом инициирующей ударной волны в ЭМ, оцениваются скорость изменения параметров среды при ударном сжатии и их влияние на образование и рост алмазных частиц. Из сравнения известных и рассчитанных параметров среды с фазовой диаграммой углерода делается вывод о росте алмазных частиц, в основном, в твердом кристаллическом состоянии во фронте детонации, обосновывается механизм такого роста.

В заключении обобщены полученные результаты, обозначены направления дальнейшего развития исследований. Отмечается, что сочетание метода «меченых» атомов и образование алмазной фазы, как своеобразной метки времени, показало уникальную информативность в изучении процессов детонации и ударно-волнового разложения веществ.

Научная новизна.

Впервые с применением «меченых» атомов углерода получены экспериментальные данные о процессах и последовательности детонационного превращения исследованных органических ЭМ. Показано, что образование наноалмаза происходит во фронте волны детонации в кристаллическом состоянии;

впервые предложена модель детонационного разложения ЭМ и ударно-волнового превращения инертных органических веществ, адекватная как полученным с участием Автора, так и независимыми исследователями, экспериментальным данным по составу углеродосодержащих продуктов взрыва;

впервые предложена модель и объяснен механизм роста алмазных частиц во фронте детонации объединением в твердом кристаллическом состоянии.

Научная и практическая значимость.

Полученные результаты являются значительным шагом в развитии теории превращений веществ и кинетики сверхбыстрых химических реакций при высоких давлениях и температурах, и при высоких скоростях нагружения веществ в ударных волнах.

В практическом плане полученные результаты повышают точность прогноза детонационных характеристик вновь синтезируемых ЭМ, смесей разных ЭМ при учете предложенного механизма детонации. Знание характера и последовательности детонационного разложения ЭМ с целевыми добавками позволяет проектировать и оптимизировать составы применяемых ЭМ с добавками, технологии производства детонационных наноалмазов и других наноматериалов.

Достоверность и апробация результатов.

Достоверность полученных результатов подтверждается большим массивом экспериментальных данных, использованных в анализе детонационных и ударно-волновых процессов; высокой точностью метода «меченых» атомов, примененного в исследованиях механизма химических реакций; высокой точностью численного анализа полученных экспериментальных данных, на основе которых были сделаны

итоговые выводы; хорошей предсказательной точностью по составу углеродосодержащих продуктов взрыва органических веществ; успешным практическим применением полученных результатов в задаче компактирования алмазных нанопорошков.

Результаты работы представлены на ряде авторитетных Российских и Международных конференций в области физики взрыва, уравнений состояния, методов диагностики детонационных процессов.

Результаты работы изложены в 27 публикациях. Из этого количества 19 статей с определяющим вкладом Автора опубликовано в журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве образования и науки Российской Федерации. 5 научных работ опубликовано в Трудах Международных и Российских конференций. Подготовлено (в качестве Ответственного исполнителя) 2 Отчета Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, имеется 2 авторских свидетельства на изобретения в области исследований.

Соответствие специальности.

Материалы диссертации соответствуют п. 1 "экспериментальные методы исследования химической структуры и динамики химических превращений" и п. 7 "Закономерности и механизмы распространения, структура, параметры и устойчивость волн горения, детонации, взрывных и ударных волн", паспорта научной специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (отрасль науки – физико-математические).

Рекомендации и замечания.

По тексту диссертации есть ряд замечаний:

1. В п.5.1.1. для оценки внутренней энергии атома, приходящейся на одну степень свободы использована модель атома в виде осциллятора. Приращение внутренней энергии атома в ударной волне находится по формуле (5.1), в которую входит внешняя сила. Зависимость внешней силы от времени представляется в виде размазанной ступенчатой функции, ширина размазки которой определяется шириной ударной волны. Такое представление является не правильным, так как за фронтом ударной волны внешняя сила, действующая на атом, равна нулю. Хорошей аппроксимацией внешней силы на фронте ударной волны была бы колокообразная зависимость силы от времени. Ширина колокообразной кривой должна быть порядка ширины фронта ударной волны.

2. В п.5.3. предложена модель роста алмазных наночастиц при объединении их в твердой фазе. Механизм основан на резонансном взаимодействии (интерференции) поперечных оптических колебаний (ТО) и поперечных акустических колебаний (ТА). Предполагается, что за счет резонансного взаимодействия в точке контакта, влиять будут только длины акустических ТА

волн, пропорциональные удвоенному периоду решетки алмаза. Приведены оценки распределения наночастиц по размерам, которые качественно описывают распределения, наблюдаемые в эксперименте. Однако приведенное обоснование резонансной модели содержит ряд неточностей.

а). Дисперсионная зависимость на рис. 5.12 соответствует случаю, когда в элементарной ячейке содержатся два атома различной массы. В случае алмаза в элементарной ячейке находятся два одинаковых атома, поэтому обе дисперсионные кривые будут совпадать на границе зоны Бриллюэна (при $k=1$), а фазовые скорости ТО (при $k=1$) и ТА фононов (при $k=0,5$), не будут совпадать между собой.

б). Вывод о резонансном характере взаимодействия опирается на представление об одномерном распространении акустических волн. Реально в наночастице будут распространяться криволинейные трехмерные волны, в которых происходят не только поперечные, но и продольные смещения атомов.

в). В данной модели необходимо, чтобы между наночастицами происходили столкновения за фронтом ударной волны. В работе отсутствует оценка скорости столкновения наночастиц алмаза. Кроме того, не ясна физическая причина возникновения флуктуаций скорости наночастиц за фронтом ударной волны.

В целом, указанные замечания не носят принципиального характера и не снижают общей положительной оценки работы.

Заключение.

Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу на актуальную тему, выполненную Автором на высоком научном уровне. Представленные в работе результаты исследований достоверны, выводы заключения и рекомендации аргументированы и обоснованы. Результаты работы опубликованы и апробированы.

Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Считаю, что диссертационная работа «Механизм детонационного и ударно-волнового разложения органических веществ с образованием наноалмаза» соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Анисичкин Владимир Федорович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Официальный оппонент
Киселев Сергей Петрович

