06

100-летию кафедры химии и технологии органических соединений азота Ленинградского технологического института им. Ленсовета посвящается

Влияние кислородного баланса высокоэнергетических веществ на параметры процесса синтеза и выход детонационных наноалмазов

© В.Ю. Долматов,[1] А.А. Меркин,[1] Е.Д. Эйдельман,[2,3] А.Л. Колодяжный,[1] И.А. Макаров,[1] А.А. Алымов,[1] К.В. Лотникова,[1,4] А.С. Слобожанинова,[1,4] А.С. Дубовицкий[1,4]

[1]Специальное конструкторско-технологическое бюро „Технолог“,
Санкт-Петербург, Россия
[2]Физико-технический институт им. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[3]Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет,
Санкт-Петербург, Россия
[4]Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Санкт-Петербург, Россия
e-mail: diamondcentre@mail.ru

Поступило в Редакцию 1 апреля 2026 г.
В окончательной редакции 10 июля 2026 г.
Принято к публикации 14 июля 2026 г.

Исследовано влияние кислородного баланса высокоэнергетических веществ на выход детонационных наноалмазов и основные характеристики процесса разложения высокоэнергетических веществ в зоне химических реакций. В диапазоне рекомендуемого кислородного баланса было установлено, что все определяемые характеристики протекания процесса (температура, давление, скорость детонации, время и длина (ширина) зоны химической реакции имеют четко выраженную зависимость различных параметров друг от друга и удовлетворительно описываются математически.

Ключевые слова: кислородный баланс, детонационный синтез, выход наноалмазов, зона химических реакций, температура в зоне химических реакций, скорость детонации, время существования зоны химической реакции.

DOI: 10.61011/JTF.2027.01.64184.85-26

Введение

Детонационные наноалмазы (ДНА) были впервые обнаружены российскими учеными (К.В. Волков, В.И. Елин и В.В. Даниленко) в 1963 г. [1] в сохранившихся твердых продуктах детонации после взрыва мощных углеродсодержащих высокоэнергетических веществ (ВВ) в неокислительной газовой среде в камере сохранения. Отрицательный кислородный баланс (КБ, англ. OB) в молекулах или смесях ВВ обеспечивает недостаток окислителя (кислорода) для полного окисления горючего (углерода и водорода), и часть углерода после взрыва выделяется в свободном состоянии. В детонационном алмазосодержащем углероде (ДАУ) содержание алмазной фазы в технологически значимом количестве должно составлять от 30 mass% до 70 mass%, а выход ДНА в расчете на исходное ВВ — не менее 5 mass%.

Процесс получения ДНА очень сложен и пока не полностью понятен, но несомненно связан с зоной химических реакций (ЗХР) детонационного процесса [2]. Состояние вещества в ЗХР не соответствует классической плазме, газу, жидкости или твердому телу и не поддается пока теоретическому описанию. Вещество в ЗХР скорее всего представляет собой вещество на границе между конденсированным состоянием и плазмой [3].

Кроме величины КБ, количество свободного углерода для данного ВВ в ЗХР определяется пористостью заряда и степенью неидеальности детонации. Соотношение CO/CO_2 в продуктах детонации (ПД) характеризует уменьшение реально выделяющегося углерода относительно максимально возможного.

Кроме того, выход ДНА зависит от ряда параметров:

— состава заряда ВВ [1,4,5];

— наличия в составе смесевого или индивидуального ВВ полинитроароматических соединений с числом нитрогрупп более 2^x;

— наличия циклических N-нитраминов (гексоген, октоген);

— удельной мощности [4];

— бронировки (оболочки) заряда, ее количества и состава;

— плотности заряда ВВ (должна быть более $1.5\,g/cm^3$);

— формы заряда (оптимальная — удлиненный цилиндр с $L \gg 2d$);

— силы инициирующего импульса подрыва заряда;

— соотношения объема ВК и массы заряда [6];

— расстояния от заряда до стенок ВК;

Таблица 1. Эмпирические уравнения взаимосвязи между выходом ДНА и детонационными характеристиками, а также между последними (погрешность: ±15 %) [36,37]

	D, m·s^{-1}	P, GPa	τ, μs	L, mm
$P_{Ch,-J.}$, GPa		$P = 0.0075 \cdot D - 32.5$		$L = -5.84 + 770/(P + 93.8)$
		$P = -3.8 + 770 \cdot (L + 5.84)$		
Y, mass%			$Y = 1.97 \cdot (\tau - 0.15)^{0.5} + 4.25$	$Y = -7.7 \cdot L + 11$
	$D = 1000 \cdot L^2 - 2500 \cdot L + 9400$			
τ, μs			$\tau = 0.2 \cdot L$	$L = 5 \cdot \tau$
			$\tau = 0.075 + 84/(D - 5600)$	

— состава газовой среды в ВК (нейтральная или восстановительная).

Наибольший вклад в исследование процесса получения ДНА внес его основной первооткрыватель В.В. Даниленко [1,6–11].

Технологии применения ДНА разнообразны: полировальные композиции [12,13], гальваника [14–18], полимерные композиции [19–22], органосиликатные защитные покрытия [23–25], масляные композиции [26], медицина [27–30], адсорбенты для радиоактивных изотопов [31], отражатели медленных нейтронов [32,33], в качестве катализаторов [34,35] и др.

Поскольку взрывные работы потенциально опасны, требуют достаточно сложного оборудования и порой труднодоступных ВВ, целесообразно осуществить прогнозное определение возможного выхода ДНА [32,33].

В табл. 1 [36,37] указаны зависимости выхода ДНА (Y) от времени (τ) и длины (ширины) (L) ЗХР; давления в плоскости Чепмена–Жуге (ЧЖ) (P) от скорости детонации (D) и длины ЗХР; длины ЗХР от давления $P_{Ch,-J.}$, скорости детонации, времени химических реакций.

В то же время представляется заманчивым и легким определить зависимость выхода ДНА и основных характеристик детонационного процесса от такой легковычисляемой величины как кислородный баланс ВВ, если таковая зависимость имеется.

Легкодоступным является и определение кислородного баланса ВВ состава CaHbNcOd по известной формуле: $\text{ОВ} = \frac{[d-(2\cdot a+\frac{b}{2})]}{M} \cdot 16 \cdot 100\,\%$, где M — молекулярная масса ВВ (азот считается инертным элементом). Впервые возможность эффективно использовать величину КБ веществ с отрицательным кислородным балансом, включая ВВ, была продемонстрирована в работе [37], где было показано, что теплота сгорания (низшая) таких веществ можно легко определить по формуле $Q_l = -0.1387 \cdot \text{КБ}$ и точность полученных Q_l (±6 %) не хуже, чем по известной формуле Д.И. Менделеева, а определяется очень быстро и удобно. КБ прямо влияет и на выход ДНА, и на характеристики процесса детонации.

Целью настоящей работы является определение возможного влияния кислородного баланса на параметры детонационного процесса и выход ДНА, а также взаимное влияние параметров детонации друг на друга. Необходимость исследования этих зависимостей указана в работе [36].

1. Экспериментальная часть

Заряды смесевых ВВ готовили смешением (или плавлением), затем смесь, подготовленная для прессования, была подвергнута ему под давлением 1500 kg/cm^2. Масса прессованного заряда $\sim$ 500 g, а полученного плавлением $\sim$ 700 g. Диаметр прессованного заряда составлял 60 mm, а длина $\sim$ 120 mm.

Заряд помещали в полиэтиленовый мешок с водой или водным раствором нужного соединения, как правило, концентрация последнего составляла 5 mass%–6 mass%. Сборка помещалась во взрывную камеру „Альфа-2М“ ($\sim 2\,\text{m}^3$) российского изготовления и производили подрыв. Соотношение массы ВВ: водная бронировка — 1:10.

В каждом эксперименте подрывали по 5 зарядов, затем полученный ДАУ извлекали из камеры и с помощью центрифуги отделяли от воды, сушили при 105 °C–107 °C. Полученный сухой ДАУ вводили в окислительную смесь, содержащую слабую азотную кислоту и нитрат аммония, и нагревали при температуре 230 °C–235 °C и давлении 80–100 atm в течении не менее 30 min. Далее очищенный ДНА отмывали от кислоты дистиллированной водой до pH водной среды $\sim$ 6, ДНА сушили при температуре 105 °C–110 °C.

Таблица 2. Выход ДНА, экспериментальные и расчетные параметры взрыва

№ п/п	Название ВВ или состава их смеси	Плотность заряда, ρ, g/cm^3		Соотношение реальной плотности ВВ и монокристалла	Кислородный баланс (КБ), %	Скорость детонации (эксперимент), D, m/s	Выход ДНА, mass% эксперимент	Температура в ЗХР, К			Давление в плотности ЧЖ, эксперимент, $P_{Ch.-J.}$, GPa	Время химических реакций в ЗХР, τ, qs	Длина ЗХР, L, mm
		Монокристалл	Реал					Эксперимент	Расчет по существующим методикам	Расчет по новой методике (графике)			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	2,4,6-тринитротолуол (ТНТ), прессованный	1.663	1.64	98.6	−74.0	1.1. 6500 (1.6) [45] 1.2. 6950 [11] 1.3. 6970 [45]	1.06	1.1. 3100 [46] 1.2. 3400 [48] 1.3. 3600 [11]	2829−3662 [11] Δ831	3276*	1.1. 20.3 [42] 1.2. 19 [11] 1.3. 20.0 [42] 1.4. 21.2 (1.62) [46]	∼ 0.19	1.1. 1.25 1.2. 0.87 [11]
2	Гексоген (RDX)	1.816	1.80	99.1	−21.6	2.1 8743 [45] 2.2 8850 [51] 9200*	1.1	2.1 3600 (1.8) [42] 2.2 4200 [46] 2.3 4500 [49]	2587−4022 [11] Δ1440	4030*	2.1 30 [42] 2.2 33.6 [45] 2.3 39 [51] 2.4 34.5−35.5	0.07 0.04*	< 0.1 [11] 0.36 0.20*
3	Октоген (HMX)	1.904	1.89	99.26	−21.6	3.1 9074 [45] 3.2 9124 [46] 3.3 4600 [11] 9200*		3.2 3870 [1]	2364−3871 [11] Δ1507	4030*	3.1 36.1 [11] 3.2 39.3 [45]	0.04 [11] 0.04*	0.25 [11] 0.20*
4	ТЭН (пентаэритритпентанитрат)	1.77	1.76	99.4	−10.1	4.1 8260 [11] 4.2 8290 [45] 4.3 8300 [11]	0.15	4.1 3600 [45] 4.2 4200 [46]	2833−4378 [11] Δ1545	4195*	4.1 30.8 [11] 4.2 30.3 [45] 4.3 33.5 [11]	0.08 [11]	0.42 [11]
5	Тринитротриаминобензол (ТАТБ)	1.93	1.86	96.4	−55.8	5.1 6900 [52] 5.2 7860 [48] 5.3 7930 [45] 6986*	1.9	5.1 2750 [45] 5.2 3270	1887−3270 [11] Δ1383	3538*	5.1 26 [42] 5.2 29.3 [42] 5.3 31.5 22*	0.15*	0.75*
6	Тетрил	1.73	1.73	∼ 100	−47.4	7560 7530*	7.6	6.1 3700 [49] 6.2 4300 (1.61) [49]	2917−4018 [11] Δ1101	3659*	6.1 25.3 [11] 6.2 26 [45] 26.2*	0.10 0.13*	0.33 0.65*

Таблица 2 (*продолжение*).

№ п/п	Название ВВ или состава их смеси	Плотность заряда, ρ, g/cm^3		Соотношение реальной плотности ВВ и монокристалла	Кислородный баланс (КБ), %	Скорость детонации (эксперимент), D, m/s	Выход ДНА, mass% эксперимент	Температура в ЗХР, К			Давление в плотности ЧЖ, эксперимент, $P_{Ch.-J.}$, GPa	Время химических реакций в ЗХР, τ, qs	Длина ЗХР, L, mm
		Монокристалл	Реал					Эксперимент	Расчет по существующим методикам	Расчет по новой методике (графике)			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
7	2,4,6-тринитрофенол (пикриновая кислота)	1.763	1.73	$\sim$ 100	-45.4	7350 [46] 7660*	2.04	3520 [46]		3687*	27.2*	0.12*	0.6*
8	Бензотрифуроксан (БТФ)	1.90	1.90 1.8 1.86	$\sim$ 100 94.7 97.9	-38.1	8.1 8190 [45] 8.2 8490 [47] 8.3 8610 [45] 8132*	1.89	8.1 3900 (1.82) [47] 8.2 4100 [52] 8.3 4170 (1.84) [47]		3792*	8.1 32.8 [45] 8.2 31 [36] 8.3 36.0 (1.86) [47] 8.4 33.8 (1.82) [47] 30.9*	0.1*	0.5*
9	Гексил (гексанитродифениламин)	1.78	1.61 1.60	90.5 90.0	-52.8	6750 [11] 6840 [46] 7150 (1.6) [37] 7180*				3581*	$\sim$ 21.1 [37] 23.5*	0.13 [37] 0.14*	0.86 [37] 0.70*
10	Тринитробензол (ТНБ)	1.76	1.66	94.3	-56.3	7300 [46] 6954*	4.9 [37]			3531*	$\sim$ 22.0* [45] 21.7*	0.12 [37] 0.15*	0.79 [37] 0.75*
11	Z-ТАКОТ	1.85	1.85	$\sim$ 100	-74.2	7250 [37]	6.61			3273*	11.1 22.5 [37] 11.2 26.3 [32]	0.126 [37]	0.6 [37]
12	ТГ 70/30		1.64		-58.3	6824*	4.7			3502*	20.7*	0.15*	0.44
13	ТГ 60/40		1.66		-53.0	7167*	7.2–8.5			3578*	23.4*	0.14*	0.72

Таблица 2 (*продолжение*).

№ п/п	Название ВВ или состава их смеси	Плотность заряда, ρ, g/cm^3		Соотношение реальной плотности ВВ и монокристалла	Кислородный баланс (КБ), %	Скорость детонации (эксперимент), D, m/s	Выход ДНА, mass% эксперимент	Температура в ЗХР, К			Давление в плотности ЧЖ, эксперимент, $P_{Ch.-J.}$, GPa	Время химических реакций в ЗХР, τ, qs	Длина ЗХР, L, mm
		Монокристалл	Реал					Эксперимент	Расчет по существующим методикам	Расчет по новой методике (графике)			
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
14	ТГ 50/50	1.72	1.68	97.6	−47.8	7670 [11] 7504*	6.1	3800		3653*	24.6 [1] 26.0*	0.13 [11] 0.13*	0.64 0.65*
15	ТГ 40/60		1.73		−42.6	7850 [37] 7840*				3728*	28.6*	0.12*	0.60*
16	ТГ 36/64		1.713 1.73 [1]		−40.5	16.1 8030 [1] 16.2 7920 [11] 7977*			2711−3953 [11] Δ1242	3758*	16.1 29.6 [11] 16.2 27.0 [11] 29.7*	0.11*	0.13−0.60 [11] 0.55*
17	ТГ 30/70	1.61	1.60	99.5	−37.3	8052 [37] 8184*				3804*	31.3*	0.08 [11] 0.12 [11] 0.10*	0.65 [11] 0.44 [11] 0.50*
18	2,4,6-тринитроанилин	1.762			−56.16	8100 [37] 6963*				3533*	21.8*	0.15*	0.75*
19	Гексанитростильбен	1.74			−67.6	19.1 7000 7180 [42]				3368*	23.1 [45]	0.18*	0.9*
20	Гексанитродифенил	1.79			−52.8	20.1 7100 [37] 20.2 7400 (1.76) 7180*				3581*	20.8 [37] 23.5*	0.13 [37] 0.14*	0.88 [37] 0.70*

Примечание: * — расчетные параметры по найденным зависимостям.

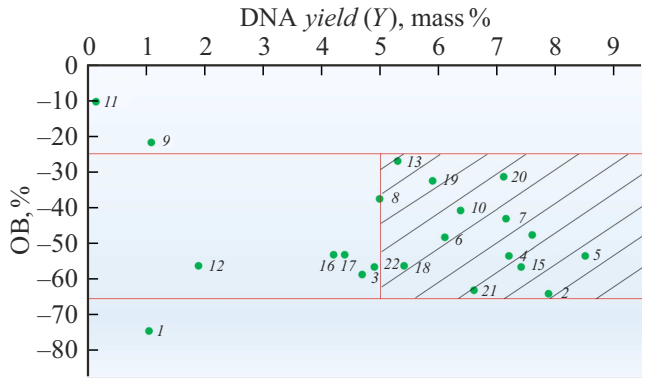


Рис. 1. Зависимость выхода ДНА от кислородного баланса углеродсодержащих мощных ВВ, где *1* — ТНТ прессованный; *2* — ТГ 80/20 литой; *3* — ТГ 70/30; *4* — ТГ 60/40 литой; *5* — ТГ 60/40 литой; *6* — ТГ 50/50; *7* — ТГ 40/60 прессованный; *8* — ТГ 30/70 прессованный; *9* — гексоген; *10* — ТГ 36/64; *11* — ТЭН; *12* — ТАТБ; *13* — ТАТБ/октоген 70/30; *14* — тетрил; *15* — тринитроанилин; *16* — гексанитродифенил; *17* — гексил; *18* — 1,3-диамино-2,4,6-тринитробензол; *19* — тетранитроанилин; *20* — тетранитробензол; *21* — тринитроанизол; *22* — тринитробензол.

2. Результаты и их обсуждение

В настоящей работе представлены экспериментальные и расчетные данные оценки возможного выхода ДНА и характеристики процесса их синтеза.

Регистрация явлений в детонационной волне, в ЗХР, в плоскости ЧЖ и за ее пределами является технически сложной задачей, так как требует высокой точности на малых базах, и тем более важно простое прогнозирование величины параметров.

Ранее исследовались и описывались зависимости выхода ДНА от различных характеристик ВВ [36–41], однако влияние такого важного параметра как КБ ВВ практически не рассматривалось.

В настоящей работе используются как собственные, так и литературные данные [42–44]. Для характеристик тех ВВ, данные по которым не были обнаружены в известных литературных источниках, приведены расчетные характеристики по найденным в настоящей работе зависимостям (табл. 2, 3).

Плотность прессованных или литых зарядов ВВ, сильно влияющая на характеристики и выход ДНА, была выбрана близко к максимальным значениям плотности монокристалла конкретных ВВ.

Согласно эмпирическим данным (табл. 2) на рис. 1 приведена уточненная область, в которой КБ ВВ обеспечивает выход ДНА не менее 5 mass% от массы исходного ВВ, это область от $-25\,\%$ до $-65\,\%$, таким образом те полинитроароматические соединения и их смеси, КБ которых попадает в указанный диапазон, могут рассматриваться как потенциальные источники для зарядов для получения ДНА. Данные ВВ, попавших в оптимальную область КБ, дающую выход ДНА ≥ 5 mass% и будут рассматриваться.

На рис. 2 видно, что размер нанокристаллов ДНА, получаемых из различных ВВ, отличается весьма заметно. ДНА, образуемые при подрыве заряда из БТФ сильно отличаются от получаемых из других ВВ. При осуществлении детонационного процесса образуются крупные (десятки и сотни нанометров) шары со сложной внутренней структурой (рис. 2). Так, при одинаковой доли углерода в молекулах ТАТБ и БТФ (но разные КБ) ДНА отличаются размером, формой и, скорее всего, фазовым составом ДАУ. В работе [54] выдвинуто предположение о том, что большой шарообразный размер наноалмазов связан с отсутствием в молекуле БТФ водорода.

По данным [45] большая часть ДАУ представляет собой крупные, округлые частицы с „внутренними лепестками“, похожими на лепестки георгина, в то время как для ТНТ в ДАУ присутствуют компактные (скорее всего монокристаллические) частицы размером ~ 20 nm.

Параметры детонационного процесса, в том числе выход и структура ДНА, сильно зависят от температуры „параплазмы“ в ЗХР, трудно определяемой эмпирически [11]. Обычная точность расчета скорости детонации по данным работы [11] составляет несколько процентов (экспериментальные данные разных исследователей порой отличаются весьма заметно), а давление в плоскости ЧЖ на 10 %–20 %. Худшая точность расчета в плоскости ЧЖ объясняется нестационарностью, турбулентностью и трехмерностью процессов в ЗХР, а также неравномерностью состава ПД.

Из всех параметров детонации наименее достоверен расчет температуры [11]. Расчет по УРС BKW (Беккер–Кистяковский–Вилсон) занижает температуру, а по-другому УРС (Леннард–Джонсон–Девоншир, LSD) температура напротив завышена. Обе расчетные температуры дают диапазон, внутри которого находится реальная температура в ЗХР. Задача авторов настоящей работы не только повысить точность определения температуры, но и существенно упростить этот процесс.

Для каждого ВВ существует критическая плотность [55], выше которой ЗХР исчезает (для гексогена $\rho_0^* = 1.73$, а для октогена — $\rho_0^* = 1.84\,\mathrm{g/cm^3}$). Детонация практически без ЗХР — это предельный случай, когда весь объем ВВ реагирует в ударном скачке. Такой режим наблюдается у высокоплотных зарядов (ТАТБ, агатированные заряды из гексогена, октогена) и характеризуется очень высоким давлением в ударной волне и очень узкой зоной реакции. Последнее обстоятельство является одной из основных причин низкого выхода ДНА у таких зарядов.

В табл. 2, столбец 10 показаны диапазоны расчетных значений температуры в ЗХР [11], где расхождения температуры составляют в $1000\,^\circ\mathrm{C}-1500\,^\circ\mathrm{C}$, что неприемлемо для дальнейшего использования таких данных. Напротив, экспериментально определенное значение температуры (табл. 2, столбец 9), по крайней мере в рамках определенного оптимального диапазона

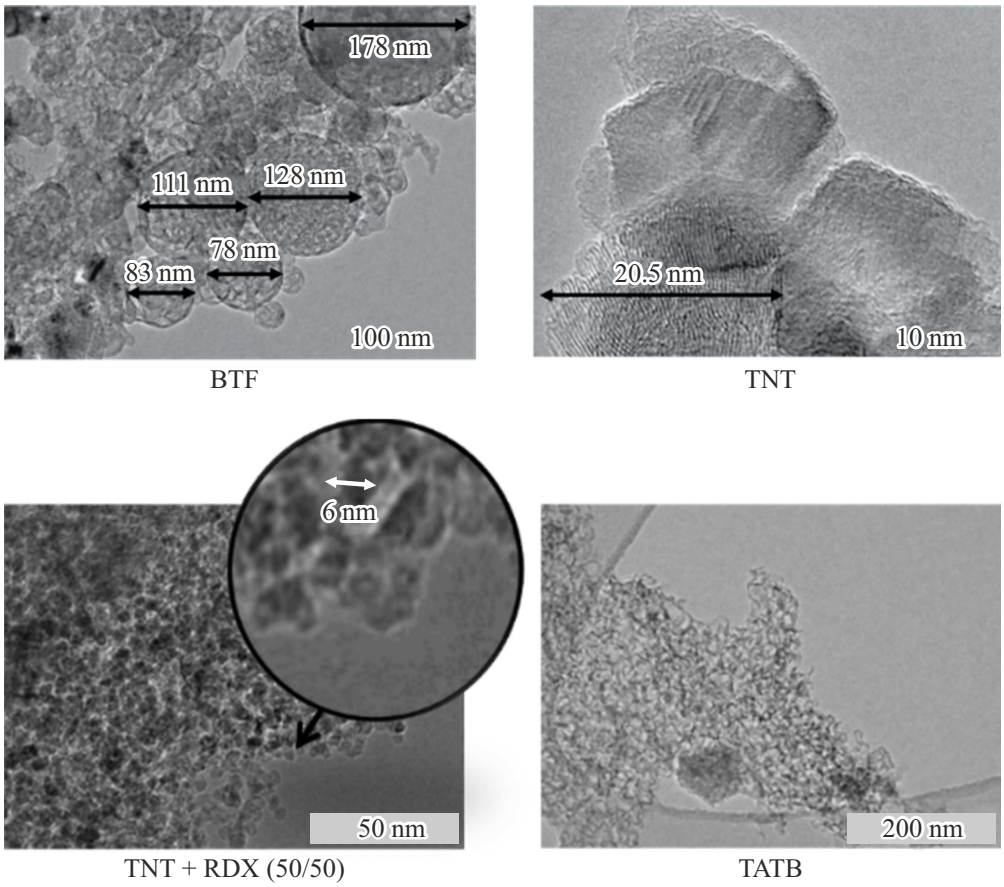


Рис. 2. ПЭМ-изображения ДНА, полученных из различных взрывчатых веществ [45]. (Разрешено к публикации Н.П. Сатонкиной).

КБ для получения ДНА (-25%– -65%), достаточно точно укладываются в прямо пропорциональную зависимость (рис. 3), описываемую простой формулой (1) $T = 14 \cdot \text{КБ} + 4300$, и это позволяет легко и быстро определить температуру в ЗХР с точностью до 85 %.

Коэффициент детерминации R^2 находится в диапазоне $1 > R^2 > 0.9$, а доверительные интервалы соответствуют распределению Стьюдента (в случае всех нижеприведенных формул также). Плотность заряда в соответствии с табл. 2 меняется незначительно (для расчетов) — от 1.6 до 1.9 g/cm^3 и оценки R^2 и доверительных интервалов меняются мало.

Полученные расчетные значения температуры в ЗХР приведены в табл. 2, столбец 11 и в табл. 3, столбец 7. Из приведенных в табл. 2 и 3 данных видно, что у значительного количества ВВ и их смесей отсутствуют и экспериментальная, и расчетная температура, используя найденную зависимость по формуле (1), появилась возможность заполнить этот пробел. При этом видно, что экспериментально определенная температура (табл. 2, столбец 9) в ЗХР близких или равных по плотности зарядов отличается порой значительно (до 500 °C у ТНТ (№ 1); до 800 °C у гексогена (№ 2); до 500 °C у ТЭН (№ 3); до 500 °C у ТАТБ (№ 4) и т. д.), что говорит о сложности достоверного определения температуры взрыва. В рамках КБ (-25%– -65%) на „кривой“ Т-КБ-зависимости значительно выпадает ТАТБ, что связано скорее всего с типичной для этого ВВ пересжатой детонацией при высоких плотностях заряда, таким образом по формуле (1) стало возможным, без сложных и неточных расчетов, определить температуру в ЗХР (точнее — у плоскости ЧЖ) для любых ВВ, попадающих по КБ в диапазон -25%– -65% (табл. 2, столбец 11 и табл. 3, столбец 7).

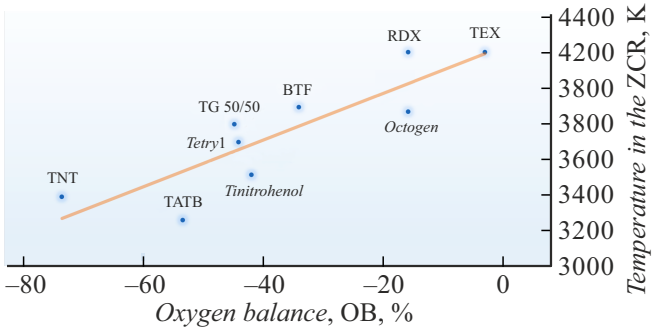


Рис. 3. Зависимость температуры взрыва от кислородного баланса ВВ, $T = 14 \cdot \text{КБ} + 4300$.

Таблица 3. Параметры в ЗХР и выхода ДНА для рекомендуемых полинитроароматических соединений

№	ВВ	Плотность заряда (ρ), g/sm^3		Соотношение реальной плотности ВВ и монокристалла	КБ, % (расчет по новой методике)	Температура в ЗХР, К	Эксперимент скорость детонации (D), m/s	Расчетные данные			
		Монокристалл	Реал					Давл. в плоск. ЧЖ, (P), GPa	Время химической реакции (τ), μs	Длина зоны химической реакции (L), mm	Выход ДНА, (Y), mass%
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	2,4,6-Тринитроанилин	1.762	1.75	99.3	−56.16	3593	8100 [37] 6963*	28.3 [37] 21.8*	0.11 [37] 0.15*	0.47 [37] 0.7*	7.4 [37]
2	Гексанитродифенил	1.79	1.60	89.4	−52.8	3581	7100 [37] 7180*	20.8 [37] 23.*	0.13 [37] 0.14*	0.88 [37] 0.70*	4.2 [37]
3	Гексил (гексанитродифениламин)	1.78	1.6	89.9	−52.8	3581 7180*	7145 [37] 23.5*	21.1 [37] 0.14*	0.13 [37] 0.14*	0.86 [37] 0.70*	4.4 [37]
4	1,3-диамино-2,4,6-тринитробензол (DATB)	1.837	1.79	97.4	−56.0	3535	7450 [37] 6973*	23.4 [37] 21.8*	0.12 [37] 0.15*	0.73 [37] 0.70*	5.4 [37]
5	2,3,4,6-Тетранитроанилин	1.867	1.60	85.7	−32.2	3877	7630 [37] 8515*	24.7 [37] 33.9*	0.12 [37] 0.09*	0.66 [37] 0.45*	5.9 [37]
6	1,2,4,5-Тетранитробензол	1.82	1.82	100.0	−31.0	3895	8000 [37] 8592*	27.5 [37] 34.5*	0.11 [37] 0.09*	0.51 [37] 0.45*	7.1 [37]
7	Тринитроанизол	1.708	1.60	93.7	−62.6	3440	7640 [37] 6546*	24.8 [37] 18.5*	0.12 [37] 0.16*	0.65 [37] 0.80*	6.6 [37]
8	Тринитробензол	1.688	1.65	97.7	−56.3	3531	7300 [37] 6954*	22.3 [37] 21.7*	0.12 [37] 0.17*	0.79 [37] 0.85*	4.9 [37]

Примечание: * — расчетные параметры по найденным зависимостям.

В табл. 2, столбец 7 и табл. 3, столбец 8 приведены экспериментальные данные по скорости детонации ВВ при высоких плотностях заряда. Отличия по величинам, в зависимости от эксперимента, как правило незначительны и на рис. 4 многие данные укладываются в прямо пропорциональную зависимость, опять же в диапазоне $-25\%-\,-65\%$. Значительно выпадает ТАТБ; тринитроанилин и смесь ТГ 70/30, что возможно, говорит об ошибке при определении скорости их детонации (далее из рисунков и расчетов данные по этим трем веществам не используем). Формула (2), описывающая найденную зависимость, имеет вид $D = 64 \cdot \text{ОВ} + 11\,000$ с погрешностью 11% и пригодна для определения D других ВВ и их смесей.

В табл. 2, столбец 12 указано экспериментально определенное давление в плоскости ЧЖ (для ряда зарядов). Из приведенных данных видно, что разница в $P_{Ch.-J.}$ может также составлять для одних и тех же зарядов от ~ 1.5 до ~ 9 GPa, что составляет значительную величину. Приблизить $P_{Ch.-J.}$ ближе к реальным значениям в диапазоне КБ $-25\%-\,-65\%$ поможет отчетливо выраженная зависимость, на рис. 5 и выраженная в виде формулы (3) следующее выражение $P = 0.51 \cdot \text{КБ} + 50$ с погрешностью 7%. Здесь не обнаружено значительное выпадение данных от прямо пропорциональной зависимости. В табл. 3 для рекомендуемых ВВ для получения ДНА использование полученной формулы (3) привело к значениям $P_{Ch.-J.}$, мало отличающихся от рассчитанных прежде в работе [37].

В совокупности с влиянием плотности, типа ВВ и степени их дисперности, микротурбулентности, погрешностей различных методик, способов и критериев определения разных исследователей ЗХР получается достаточно большой разброс экспериментальных данных по определению времени существования ЗХР и ее ширины.

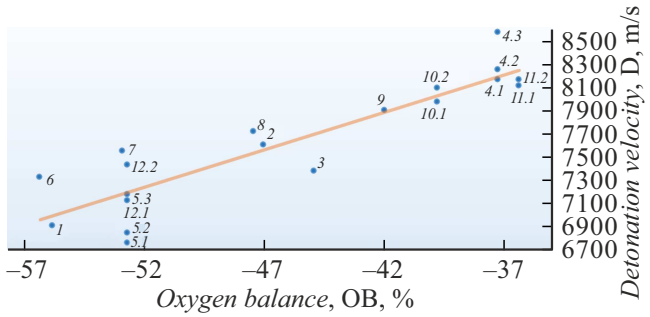


Рис. 4. Зависимость скорости детонации от кислородного баланса ВВ, где: *1* — тринитротриаминобензол (ТАТБ); *2* — тетрил; *3* — 2,4,6-тринитрофенол (пикриновая кислота); *4* — бензотрифуроксан; *5* — гексил (гексанитродифениламин); *6* — тринитробензол (ТНБ); *7* — ТГ 60/40; *8* — ТГ 50/50; *9* — ТГ 40/60; *10* — ТГ 36/64; *11* — ТГ 30/70; *12* — гексанитродифенил; $D = 64 \cdot \text{КБ} + 11000$.

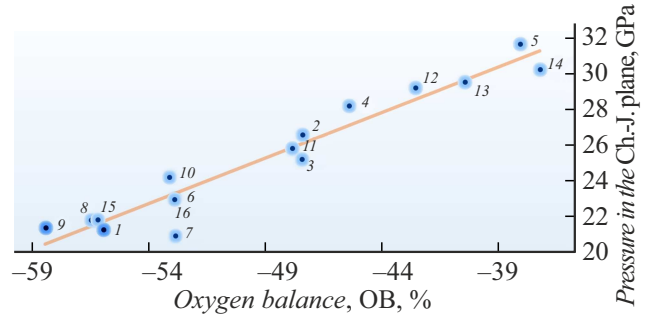


Рис. 5. Зависимость давления в плоскости ЧЖ от кислородного баланса ВВ, где *1* — ТАТБ; *2* — тетрил; *3* — тетрил; *4* — тринитрофенол; *5* — БТФ; *6*, *7* — гексил; *8* – ТНБ; *9* — ТГ 70/30; *10* — ТГ 60/40; *11* — ТГ 50/50; *12* — ТГ 40/60; *13* — ТГ 36/64; *14* — ТГ 30/70; *15* — 2,4,6-тринитроанилин; *16* — гексанитродифенил; $P = 0.51 \cdot \text{OB} + 50$.

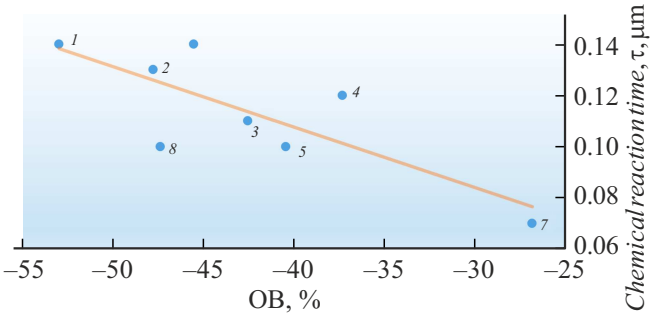


Рис. 6. Зависимость времени химической реакции в ЗХР от кислородного баланса ВВ, где: *1* — ТГ 60/40 литой; *2* — ТГ 50/50; *3* — ТГ 40/60 прессованный; *4* — ТГ 30/70 прессованный; *5* — гексоген; *6* — ТАТБ/октоген 70/30; *7* — октоген/ТНТ 90/10; *8* — тетрил; $\tau = -0.00214 \cdot \text{OB} + 0.013$.

На рис. 6 показана зависимость времени химических реакций в ЗХР (табл. 1) от кислородного баланса ВВ. Эта зависимость также носит характер, близкий к прямо пропорциональному. Из ряда выпадают данные для ТАТБ. Уравнение (4), $\tau = -0.00214 \cdot \text{КБ} + 0.013$ описывает эту зависимость и позволяет с точностью до 82 % определить величину τ от КБ для ВВ, имеющих КБ от −25 % до −65 %. Для ТАТБ и состава ТГ 70/30 имеющиеся величины τ, скорее всего, определены не верно.

Что касается такой характеристики как длина зоны химических реакций (табл. 2, столбец 14), то экспериментальная величина для одного и того же вещества при близкой плотности заряда может отличаться в несколько раз: для ТНТ — в 1.5 раза (№ 1), для гексогена — в 4 раза (№ 2), для ТАТБ — до 6 раз (№ 5), для сплава ТГ 36/64 — до 4.5 раза (№ 16). Это говорит о недостаточной точности определения этой величины. Между тем, если учесть установленное соотношение между временем и длиной ЗХР [33,37] как 1:5, то длину ЗХР можно легко определить (если, конечно, считать, что τ определено достаточно точно).

В табл. 3 приведены рассчитанные параметры взрыва, в первую очередь, по формуле (1), температура взрыва, остальные параметры рекомендуемых ВВ для получения ДНА с приемлемым выходом и сам выход ДНА (≥ 5 mass%) — по формулам в работе [37]. Из предложенных восьми ВВ шесть вполне могут быть использованы для синтеза наноалмазов. К ним можно отнести: 2,4,6-тринитроанилин; 1,3-диамино-2,4,6-тринитробензол; тетранитробензол; тринитроанизол и тринитробензол.

Выводы

1. Определено влияние КБ на выход ДНА и основные характеристики процесса: температуру в ЗХР, скорость детонации, давление в плоскости ЧЖ, время реакций в ЗХР. Найденные зависимости отображены в графическом виде и оцифрованы.

2. Показана зависимость выхода ДНА от кислородного баланса (КБ) мощных углеродсодержащих ВВ, определен оптимальный диапазон КБ — от −25 % до −65 %.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] K.V. Volkov, V.V. Danilenko, V.I. Elin. Combustion, Explosion and Shock Waves, **26** (3), 366 (1990). DOI: 10.1007/BF00751383

[2] V.Yu. Dolmatov, D.V. Rudenko, M.N. Kiselev, N.P. Satonkina, N.M. Lapchuk, M.A. Blinova, V.T. Senyut, S.D. Pisarevsky, A.V. Nozhkina, A.P. Ershov. J. Adv. Mater. Technol., **10** (1), 65 (2025).

[3] N.P. Satonkina. Combust. Explos. Shock Waves, **52** (4), 488 (2016). DOI: 10.1134/S0010508216040134
[4] V.Yu. Dolmatov, V. Myllymäki, A. Vehanen, A.O. Dorokhov, M.N. Kiselev. J. Superhard Materials, **41** (5), 1 (2019). DOI: 10.3103/S1063457619050071
[5] Б.А. Выскубенко, В.В. Даниленко, Э.Э. Лин, В.А. Мазанов, Т.В. Серова, В.И. Сухаренко, А.П. Толочко. Физика горения и взрыва, **28** (2), 108 (1992).
[6] В.В. Даниленко. *Синтез и спекание алмаза взрывом* (Энергоатомиздат, М., 2003)
[7] В.В. Даниленко, И.А. Петруша, Г.С. Олейник, Н.В. Даниленко. Сверхтвердые материалы, **4**, 53 (1998).
[8] В.В. Даниленко. Введение. Физика твердого тела, **46** (4), 581 (2004).
[9] V.V. Danilenko. Combustion, Explosion and Shcok Waves, **41** (5), 577 (2005). DOI: 10.1007/s10573-005-0072-5
[10] В.В. Даниленко. Сверхтвердые материалы, **4**, 11 (2009).
[11] В.В. Даниленко. *Взрыв: физика, техника, технология* (Энергоатомиздат, М., 2010)
[12] А.С. Артемов. ФТТ, **46** (4), 687 (2004).
[13] T. Kurobe, T. Fujimura, H. Ikeda. Physics Solid State, **46** (4), 751 (2004).
[14] O. Oka, K. Yoshino. *Method for producing functional composite* (Patent 1993106195, Jpn., 1995)
[15] G.K. Burkat, V.Yu. Dolmatov, R. Chosang, S. Byung-sun, M. Kwon, E.A. Orlova. *Compositechrome-diamond coating, coating layer andmanufacture method thereof* (Patent 1006341250000, S. Korea, 2006)
[16] Ю.В. Тимошков, Т.М. Губаревич, Т.И. Ореховская, И.С. Молчан, В.И. Курмашов. Гальванотехника и обработка поверхности, **7** (3), 20 (1999).
[17] В.Ю. Долматов, И.А. Макаров, А.С. Слобожанинова. Практика противокоррозионной защиты, **31** (2), 18 (2026). DOI: 10.31615/j.corros.prot.2026.120.2-2
[18] E.N. Loubnin, S.M. Pimenov, A. Blatter, F. Schwager, P.Ya. Detkov. New Diamond Front. Carbon Technol., **9** (4), 273 (1999).
[19] Н.В. Сиротинкин, А.П. Возняковский, А.Н. Ершова. ФТТ, **46** (4), 725 (2004).
[20] A.O. Pozdnyakov, A.P. Voznyakovskii, E.O. Popov, O.F. Pozdnyakov. Physics Solid State, **53** (11), 2365 (2011).
[21] A.P. Voznyakovskii, A.V. Smirnov, B.A. Fedorov, A.V. Esina, N.P. Boreiko. Intern. Polymer Sci. Technol., **44** (11), 9 (2017).
[22] A.P. Voznyakovskii, D. Rashidov, S.Kh. Tabarov, I.V. Shugalei, F.Kh. Sodikov, Sh.P. Ismatov, A.Yu. Neverovskaya, A.A. Voznyakovskii. Russ. J. General Chem., **94** (13), 1 (2024).
[23] V.I. Voshchikov, Y.A. Khamidulin, L.N. Krasilnikova, T.V. Khamova, S.N. Stepin, G.S. Sokolov, A.G. Ivanova, O.A. Shilova. Glass Phys. Chem., **51** (2), 233 (2025). DOI: 10.1134/S1087659625600164
[24] В.И. Вощикова, Я.А. Хамидулина, Л.Н. Красильникова, Т.В. Хамова, С.Н. Степин, Г.С. Соколов, А.Г. Иванова, О.А. Шилова. Физикохимия поверхности и защита материалов, **61** (3), 324 (2025). DOI: 10.31857/S0044185625030108
[25] Л.Н. Красильникова, В.А. Алексеев, О.А. Шилова. Лакокрасочные материалы и их применение, **1**, 32 (2025).
[26] J.-Ch. Arnault. *Nanodiamonds* (Imprint, Elsevier, 2017), p. 488. ISBN 978 0 323 43029 6
[27] A.S. Solomatin, R.Yu. Yakovlev, V.V. Teplova, N.I. Fedotcheva, M.N. Kondrachova, I.I. Kulakova, N.B. Leonidov. J. Nanoparticle Research (NANO), **20** (7), 201 (2018). DOI: 10.1007/s11051-018-4297-0
[28] А.С. Соломатин, Р.Ю. Яковлев, Н.Б. Леонидов, Г.А. Бадун, М.Г. Чернышова, И.И. Кулакова, А.Н. Ставрианиди, Г.В. Лисичкин. Вестник Московского ун-та. Серия 2: Химия, **59** (3), 179 (2018).
[29] A.S. Solomatin, R.Yu. Yakovlev, O.V. Efremenkova, I.G. Sumarukova, I.I. Kulakova, G.V. Lisichkin. Наносистемы: физика, химия, математика, **8** (4), 531 (2017).
[30] Р.Ю. Яковлев, И.И. Кулакова, Г.А. Бадун, Г.В. Лисичкин, А.В. Валуева, Н.Г. Селезенев, Н.Б. Леонидов. Разработка и регистрация лекарственных средств, **3** (16), 60 (2016).
[31] А.П. Карманов, В.Ю. Долматов, Л.С. Кочева, Н.Г. Рачкова, Н.И. Богданович, Н.С. Алмазова. Сверхтвердые материалы, **43** (3), 67 (2021).
[32] В.Ч. Игнатович, В.В. Несвижевский. Атомная энергия, **11** (2), 100 (2014).
[33] Е.В. Лычагин. *Отражатели очень холодных и холодных нейтронов на основе ультрадисперсных алмазов* (Дис. на соискание ученой степени доктора наук. ОИЯИ, Дубна, 2023), 183 с.
[34] A.V. Shvidenko, V.I. Kuular, M.S. Shestakov, E.B. Yudina, P.A. Romanov, A.D. Trofimuk, B.B. Tudupova, A.E. Aleksenskii. Catalysts, **12** (11), 1545 (2022). DOI: 10.1016/j.carbon.2026.121675
[35] T. Yoshikawa, H. Asakawa, T. Matsumoto, K. Ichikawa, A. Kaga, Sh. Yamamoto, R. Izumi, M. Ohno, T. Mahiko, M. Mutsuda, S. Yamasaki, N. Tokuda. Carbon, **218**, 1186 (2024). DOI: 10.1016/j.carbon.2023.118689
[36] V.Yu. Dolmatov, M.A. Blinova. Russ. Chem. Rev., **94** (9), (2025). DOI: 10.59761/RCR5178
[37] V.Yu. Dolmatov, A.N. Ozerin, E.D. Eidelman, A.S. Kozlov, S.Yu. Naryzhny, V.A. Martchukov, A. Vehanen, V.J. Myllymäki. Adv. Mater., **7** (2), 122 (2022).
[38] V.Yu. Dolmatov. J. Superhard Mater., **38** (5), 373 (2016). DOI: 10.3103/S1063457616050099
[39] V.Yu. Dolmatov, A.N. Ozerin, I.I. Kulakova, O.O. Bochechka, N.M. Lapchuk, V. Myllymäki, A. Vehanen. Russ. Chem. Rev., **89** (12), 1428 (2020). DOI: 10.1070/RCR4924
[40] V.Yu. Dolmatov, A.O. Dorokhov, A.S. Kozlov, V.A. Marchukov, V. Myllymäki, A. Vehanen. J. Superhard Mater., **43** (2), 93 (2021). DOI: 10.3103/s1063457621020052
[41] V.Yu. Dolmatov, D.V. Rudenko, A.O. Dorokhov, A.A. Malygin, A.S. Kozlov, V.A. Marchukov. Combustion, Explosion, and Shock Waves, **57** (2), 232 (2021). DOI: 10.1134/s001050822102012x
[42] K. Tanaka. *National Chemical Laboratory for Industry* (Tsukuba Research Center, Tsukuba, Jpn., 1983)
[43] В.Ф. Жилин, В.Л. Збарский, Н.В. Юдин. *Малочувствительные взрывчатые вещества* (РХТУ им. Д.И. Менделеева, М., 2008)
[44] *Энергетические конденсированные системы: краткий энциклопедический словарь*, под. ред. Б.П. Жукова (Янус-К, М., 1999)
[45] Н.П. Сатонкина. *Физическая модель электропроводности при детонации конденсированных взрывчатых веществ вида* $C_aH_bN_cO_d$ (Дисс. на соискание ученой степени д-ра физ.-мат. наук, ИГиЛ СО РАН, Новосибирск, 2023)

[46] Е.Ю. Орлова. *Химия и технология бризантных взрывчатых веществ* (Химия, Л., 1973)
[47] *Энергетические конденсированные системы: краткий энциклопедический словарь*, под. ред. Б.П. Жукова (Янус-К, М., 2000)
[48] А.И. Лямкин. *Образование наноалмазов при динамическом воздействии на углеродосодержащие соединения* (Дисс. на соискание ученой степени д-ра физ.-мат. наук (КГТУ и КНЦ СО РАН, Красноярск, 2004)
[49] В.В. Даниленко. Физика горения и взрыва, **41** (5), 104 (2005).
[50] Ch.L. Mader. *Numerical modeling of Detonation* (B: UC Press, 1979)
[51] Л.П. Орленко. *Физика взрыва и удара* (Физматлит, М., 2008)
[52] А.В. Федоров, А.П. Михайлов, Л.К. Антонюк, Д.В. Назаров, С.А. Финюшин. Физика горения и взрыва, **48** (3), 62 (2012). DOI: 10.1134/S0010508212030070
[53] А.Ю. Долгобородов, М.А. Бражников, М.Н. Мохов, Н.Е. Сафронов, В.П. Кирчленко. Физика горения и взрыва, **49** (6), 112 (2013). DOI: 10.1134/S0010508213060129
[54] S.S. Batsanov, A.N. Osavchuk, S.P. Naumov, A.E. Efimov, B.G. Mendis, D.C. Apperley, A.S. Batsanov. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, **40** (1), 39 (2015).
[55] А.В. Уткин, С.А. Колесников, С.В. Першин. Физика горения и взрыва, **38** (5), 111 (2002).