https://doi.org/10.36073/2025/2026-1/63-75

ბალისტიტური უტილიზირებული დენთების აფეთქებით გარდაქმნის თერმოდინამიკური ანალიზი პროგრამა ASTRA 4-ის გამოყენებით

თამარ იაშვილი[1,2], ქეთევან უკლება[3]

[1] სსიპ გრიგოლ წულუკიძის სამთო ინსტიტუტი
[2] საქართველოს ტექნიკური უნივერიტეტი
[3] სსიპ ფერდინანდ თავაძის მეტალურგიისა და მასალათმცოდნეობის ინსტიტუტი

ანოტაცია. უტილიზირებული ფეთქებადი ნივთიერებების შემდგომი გამოყენების პრობლემის გადაჭრის ერთ-ერთი გზაა დეტონაციური ნარევის გამოყენება საბოლოო პროდუქტის ნანოალმასების მისაღებად. ნანოალმასების მიღების ერთ-ერთ გავრცელებულ მეთოდს წარმოადგენს ფეთქებადი ნივთიერებების დეტონაციის პროცესებში ალმასების სინთეზი. სტატიაში წარმოდგენილია ალმასის შემცველი დეტონაციური ნარევის მიღების პროცესის თერმოდინამიკური ანალიზი, რომლის საფუძველზე ექსპერიმენტული კვლევების ჩატარებამდე, შეგვიძლია თეორიულად განვსაზღვროთ სხვადასხვა ტემპერატურაზე რა შესაძლო კონდენსირებული ფაზები წარმოიქმნება. თერმოდინამიკური ანალიზის შედეგები საშუალებას გვაძლევს ვმართოთ ექსპერიმენტული ნაწილი სამიზნე პროდუქტის მისაღებად, კერძოდ მოვახდინოთ ექსპერიმენტების რაოდენობის მინიმიზაცია.

საკვანძო სიტყვები: ფეთქებადი ნივთიერება; დეტონაციური სინთეზი; ნახშირბადი; თერმოდინამიკური ანალიზი; ნანოალმასები.

შესავალი

უტილიზირებულ ფეთქებადი ნივთიერებების შემდგომი გამოყენების პრობლემების გადაჭრის გზები შესაძლოა მოძიებულ იქნას მხოლოდ ინტერდისციპლინური კვლევებით. ცნობილია რომ დეტონაციის პროდუქტს წარმოადგენს ნახშირბადი, რომლის ერთ-ერთ სტრუქტურულ ფორმასაც წარმოადგენს ალმასი. მისი სინთეზი ხდება მაღალი ტემპერატურისა და წნევების დიაპაზონში. არსებობს ხელოვნური ალმასების მიღების სხვადასხვა მეთოდი. მათი გამოყენების არეალი დიდია და სულ უფრო ფართოვდება. მათ შორის, სულ უფრო იზრდება მოთხოვნები ნანოალმასებზე. ისინი გამოირჩევიან უნიკალური მექანიკური, ელექტრული, თერმული და სხვა ფიზიკურ-ქიმიური თვისებებით, ამიტომ ფართოდ გამოიყენება: მიკროელექტრონიკაში, ბიოტექნოლოგიებში, სამედიცინო სფეროში, კომპოზიტური მასალების წარმოებაში და ა.შ. შესაბამისად მზარდია კვლევების რიცხვი ნანოალმასების მიღების ტექნოლოგიების სრულყოფა-განვითარებისთვის. ნანოალმასების მიღების ერთ-ერთ გავრცელებულ მეთოდს წარმოადგენს ფეთქებადი ნივთიერებების დეტონაციის პროცესებში ალმასების სინთეზი. ამ დროს მიღებულ პროდუქტს დეტონაციურ ნანოალმასებს უწოდებენ. აღნიშნულ მეთოდს მრავალი

უპირატესობა გააჩნია სხვა მეთოდებთან შედარებით (რაციონალური ტექნოლოგია, მიღებული პროდუქტის სისუფთავე და სხვა).

მრავალი შრომა ეძღვნება დეტონაციური ნანოალამასების წარმოების ტექნოლოგიებს და სინთეზის მექანიზის შესწავლას. თუმცა, ადრეულ ეტაპზე ნახშირბადის კონდენსაციის პროცესის შესასწავლად საჭიროა ახალი მეთოდები. ასეთ მეთოდად ითვლება მცირე კუთხიანი სინქროტრონული გამოსხივების (SR) რენტგენული გაფანტვა, ის საშუალებას იძლევა აკონტროლოს დეტონაციის პროცესში ნახშირბადის კონდენსაციის დინამიკა [1-4].

ცნობილია, რომ ალმასების მიკროკრისტალების მიღება შესაძლებელია დეტონაციური სინთეზით წყლიან გარემოში, ტრინიტროტოლუოლის, როგორც ამაფეთქებელი ნივთიერების გამოყენებით. ნარევში ალმასის მიკრონაწილაკების გამოჩენა დაფიქსირებულია ოპტიკური და ელექტრონული მიკროსკოპიით და რენტგენოფაზური ანალიზის გამოყენებით. დეტონაციის სინთეზის პირობები უზრუნველყოფს ალმასის ფაზის ნაწილაკების წარმოქმნას 1-დან 140 მიკრონამდე დიაპაზონში, რომლებსაც აქვთ მკაფიო წახნაგები და დამახასიათებელი ბრწყინვალება ოპტიკურ დიაპაზონში [5].

ლიტერატურაში არსებული ერთ-ერთი გამოგონების თანახმად, თავისუფალი ნახშირბადი გამოიყოფა არა მხოლოდ დეტონაციური დაშლის ბოლო ეტაპზე, როგორც ეს ტარვერის მიერ შემოთავაზებული ყველაზე ცნობილი კინეტიკური მექანიზმის შემთხვევაშია, არამედ მთელი პროცესის განმავლობაში, რაც იწვევს ალმასის ან არაალმასური ფაზის წარმოქმნას, რაც დამოკიდებულია გარემოს ცვალებად წნევაზე, ტემპერატურასა და შემადგენლობაზე [6-9].

ასევე ცნობილია მყარი ასაფეთქებელი ნივთიერებების დეტონაციის იდეალური პროცესის მათემატიკური მოდელი, რომლის საფუძველზეც შემუშავდა DETO 1.0 პროგრამული უზრუნველყოფა. შეიქმნა ასაფეთქებელი ნივთიერებების კომპონენტებისა და დეტონაციის პროდუქტების თერმოდინამიკური თვისებების მონაცემთა ბაზა[10].

პროგრამული უზრუნველყოფა საშუალებას იძლევა სამრეწველო ასაფეთქებელი ნივთიერებების დეტონაციური პარამეტრების (დეტონაციის სიჩქარე და წნევა ჩეპმენ-ჟუგეს წერტილში) პროგნოზირებისა, რაც განსაკუთრებით საინტერესოა ახალი ასაფეთქებელი ნივთიერებების ძიებისა და კვლევის დროს. DETO 1.0 პროგრამული უზრუნველყოფის უპირატესობებია: მარტივი ინტერფეისი, თერმოდინამიკური თვისებების სახით ასაფეთქებელი ნივთიერებების კომპონენტებისა და დეტონაციის პროდუქტების მონაცემთა ბაზა; საწყისი მონაცემების ავტომატური შეყვანა, პროგრამული უზრუნველყოფის გამოყენების სიმარტივე. DETO 1.0-ის გამოთვლის შედეგები საკმარისი სიზუსტით ემთხვევა ექსპერიმენტულ მონაცემებს; DETO 1.0 ალგორითმი საშუალებას იძლევა შევავსოს და შევიმუშავდეს სხვა კომპიუტერული პროგრამები, რომლებიც შექმნილია სამრეწველო ასაფეთქებელი ნივთიერებების ინიცირების, დეტონაციისა და მუშაობის მოდელირებისთვის [11-13].

ნანოსტრუქტურული ალმასების მიღების ერთ-ერთ ნედლეულად შესაძლებელია გამოყენებილ იქნას საბრძოლო მასალების უტილიზაციის დროს გამონთავისუფლებული ვადაგასული ტროტილი და დენთები. ამიტომ სამიზნე პროდუქტის მისაღებად ექსპერიმენტების ჩატარებამდე აუცილებელია თეორიული ანალიზი, ამის ერთ-ერთი საშუალებაა პროცესების თერმოდინამიკური ანალიზი.

დეტონაციური ნახშირბადის (ულტრადისპერსული ალმასების) მიღების თერმოდინამიკური კვლევა ეფუძნება, მაღალი ტემპერატურისა და მაღალი წნევის პროცესების (30-40 გპა, 3000-5000 K) მოდელირებას, უარყოფითი ჟანგბადის ბალანსის

მქონე მეორადი ასაფეთქებელი ნივთიერებების დეტონაციის დროს. მოდელირება (TDS კოდი) ითვალისწინებს პროდუქტების მრავალფაზიან ბუნებას და მათ ქიმიურ წონასწორობას ნახშირბადის ფაზური გადასვლების გამოსათვლელად, მათ შორის ალმასის ფაზაში კონდენსაციის ჩათვლით. დეტონაციური ნახშირბადის თერმოდინამიკური ანალიზის ძირითადი ელემენტებია: 1) კონდენსაციის პირობები: თერმოდინამიკური გამოთვლები აჩვენებს, რომ ნახშირბადი წარმოიქმნება დეტონაციური ტალღის ფრონტის უკან რეაქციის ზონაში, სადაც მიიღწევა ალმასის სტაბილურობის შესაბამისი პარამეტრები და ამ დროს ალმასის ფაზის წილი, დამოკიდებულია ასაფეთქებელი ნივთიერებების შემადგენლობისა და სიმკვრივის პარამეტრებზე; 2) ჟანგბადის ბალანსი: უარყოფითი ჟანგბადის ბალანსის მქონე ასაფეთქებელი ნივთიერებების გამოყენება უზრუნველყოფს თავისუფალი ნახშირბადის გამოყოფას, რომელიც მაღალი წნევის გამო კონდენსირდება არა გრაფიტში, არამედ ალმასში; 3) თერმოდინამიკური კოდი (TDS): საშუალებას გვაძლევს გამოთვალოთ პროდუქტების წონასწორული შემადგენლობა, მათ შორის მყარი ნახშირბადი, მათი ტემპერატურა და წნევა.

თერმოდინამიკა ხელს უწყობს ასაფეთქებელი ნარევების შემადგენლობის ოპტიმიზაციას, ულტრადისპერსული ალმასის გამოსავლიანობის გასაზრდელად, აფეთქების ენერგიასა და ნახშირბადის კონდენსაციის პირობებს შორის ოპტიმალური ურთიერთობის განსაზღვრით [14-16].

მოცემულ სტატიაში წარმოდგენილია სამთო ინსტიტუტის საცავში დაცული უტილიზირებული ფეთქებადი ნივთიერებების, კერძოდ: ტროტილის, ბალისტიტური, გრაფიტიზირებული, კოლოიდური და პიროქსილინური დენთების დეტონაციის პროცესებისა და ნახშირბადის გამოყოფის მექანიზმის შესწავლისათვის თერმოდინამიკური ანალიზი, რომლის საფუძველზე ექსპერიმენტული კვლევების ჩატარებამდე, შესაძლებელია თეორიულად განისაზღვროს სხვადასხვა ტემპერატურაზე რა შესაძლო კონდენსირებული ფაზები წარმოიქმნება და ამით მართული იქნას ექსპერიმენტული ნაწილი სამიზნე პროდუქტის მისაღებად, კერძოდ მოხდეს ექსპერიმენტების რაოდენობის მინიმიზაცია.

ძირითადი ნაწილი

პროგრამა **ASTRA 4**-ის გამოყენებით შესრულდა მაღალ წნევებზე აფეთქების პროცესის მოდელირება. თერმოდინამიკური ანალიზის შედეგები წარმოდგენილია დიაგრამების (სურ.1-6) და ცხრილების (ცხრ. 1-15) სახით.

თერმოდინამიკური გათვლებისათვის აუცილებელია, პროცესში მონაწილე ელემენტების და ნაერთების თერმოდინამიკური მნიშვნელობების საიმედო მონაცემების არსებობა. **ASTRA 4**-ის პროგრამის ბანკის მონაცემების გაცნობისას, აღმოჩნდა, რომ აღნიშნული კვლევისათვის საჭირო ნაერთების მონაცემები არ მოიპოვება. გაირკვა ისიც რომ, ამ ნაერთების ზოგიერთი თერმოდინამიკური ფუნქციის მნიშვნელობები არც სამეცნიერო ცნობარებში მოიძებნა, ამიტომ საჭირო გახდა მათი გაანგარიშება და პროგრამის ბანკში შეტანა.

კერძოდ გაანგარიშებული იქნა შემდეგი თერმოდინამიკური ფუნქციების მნიშვნელობები: C_p, $\Delta H_{\text{დნ.}}$, S^0_{298}, $H^0_{298}-H^0_0$, $C_{p\text{თხ.}}$, [12-17]. მიღებული შედეგები შეტანილი იქნა **ASTRA 4**-ის მონაცემთა ბანკში.

კომპლექსური პროგრამა **ASTRA 4**-ის გამოყენებით შესრულდა სხვადასხვა შედგენილობის ფეთქებადი ნივთიერებების (დენთების) მაღალ წნევებზე აფეთქების

პროცესის მოდელირება. ჩატარებული გაანგარიშება საშუალებას იძლევა განისაზღვროს წვის ტემპერატურა და აჩვენებს, რომელი კონდენსირებული ფაზები წარმოიქმნება.

აფეთქების პროცესების ენთალპიების გათვლის საშუალებით ნაჩვენებია პროცესების ეგზოთერმულობა და მათი ტემპერატურული შუალედები.

1) ტროტილი - $C_7H_5N_3O_6$. ლიტერატურიდან ცნობილია, რომ ტროტილის აფეთქების ძირითადი პროდუქტებია, აირები: CO, N_2, H_2. თანმდევი პროდუქტები: CH_4, NH_3, NO, NO_2, და H_2O. ჟანგბადის ნაკლებობის გამო აფეთქების დროს წარმოიქმნება მყარი **C** - ნახშირბადი, ზოგჯერ არომატიზირებული ნახშირწყალბადები და ნიტონაერთები, თუ დაშლა არასრულია.

გათვლების შედეგები:

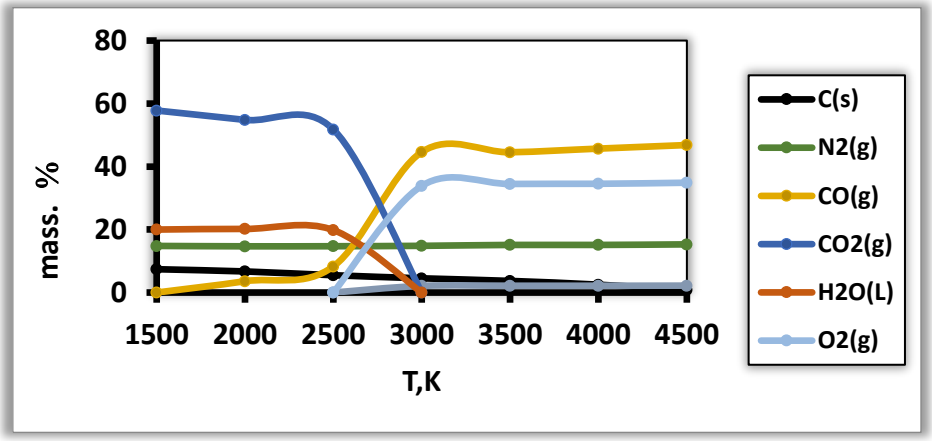
ცხრილი 1

აფეთქების პროდუქტების პროცენტული წილი %

ფეთქებადი ნივთიერება	T, K	P,MPa	H_2(g)	C(s)	N_2C(g)	CH_4(g)
ტროტილი	2259	19000	0.02	**42.8**	53.9	3.38

2) ბალისტიტური დენთი - ფუძეა ნიტროცელულოზა ($C_6H_7O_{11}N_3$) (40–70%) და ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$)/(ფლასიფიკატორი). შემადგენლობაში შედის: ქიმიური მდგრადობის სტაბილიზატორები, წვის კატალიზატორები და ტექნოლოგიური დანამატები. ახასიათებს ერთგვაროვანი სტრუქტურა, მაღალი სიმკვრივე, წვის დროს კვამლს არ წარმოქმნის, აქვს მაღალი ენერგია (წვის სითბო დაახლ. 900 კკალ/კგ.). გამოიყენება რეაქტიულ ყუმბარებში და საატრილერიო შეიარაღებაში.

საწყისი შედგენილობა: ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$) - 10%, ნიტროცელულოზა ($C_6H_7O_{11}N_3$) - 90%, p = 20000 MPa;



სურ. 1. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

როგორც დიაგრამიდან ჩანს, კონდენსირებული ნახშირბადი **C(s)** გამოიყოფა **1500 K**-ზე, მისი რაოდენობა მაქსიმუმია **7.41%,** ხოლო შემდგომ იწყებს შემცირებას და **4500 K** -ზე აღწევს 0.8 %-ს; 1500 K-ზე გამოყოფას იწყებს H_2O, შემდგომ მცირდება და 3000 K-ზე მთლიანად ქრება; აიროვანი ფაზები გამოიყოფა: 1500 K-ზე CO_2, CO, N_2, ხოლო 2500 K-ზე O_2, H_2.

ანალიზის შედეგები, პროდუქტების პროცენტული წილი მოცემულია ცხრ.2-ში.

ცხრილი 2

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	N_2(g)	H_2(g)	O_2(g)	CO(g)	CO_2(g)	H_2O(L)
1500	**7.41**	14.8	-	-	-	57.79	20.0
2000	6.7	14.68	-	-	3.6	54.82	20.2
2500	5.5	14.71	-	-	8.3	51.67	19.83
3000	4.52	14.83	2.12	33.89	44.64	-	-
3500	3.7	15.12	2.16	34.48	44.54	-	-
4000	2.5	15.12	2.16	34.53	45.7	-	-
4500	0.8	15.3	2.2	34.87	46.83	-	-

გათვლილი იქნა ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე.

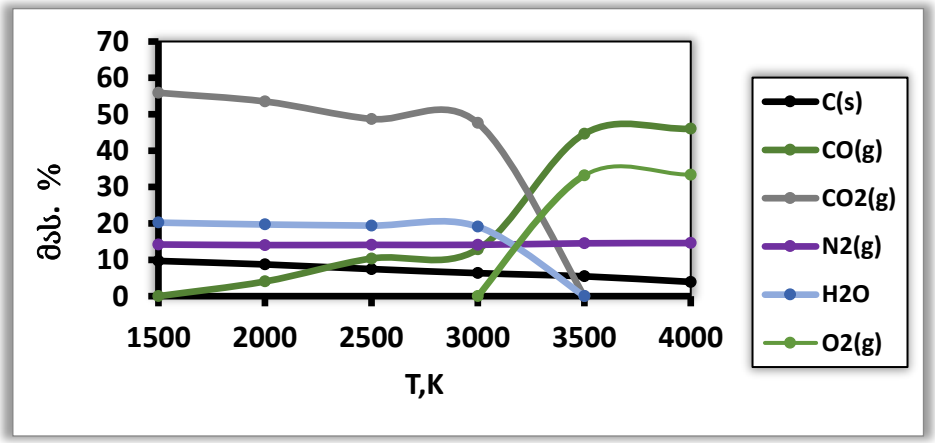
ცხრილი 3

K	1500	2000	2500	3000	3500	4000	4500
ΔH კკალ	- 945	- 619	- 282	49	376	711	1057

პროცესი მიმდინარეობს ეგზოთერმულად **1500-2500 K** ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0,** ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული

3) გრაფიტიზირებული დენთი - გრაფიტიზაცია აუმჯობესებს ფხვიერებას, ხელს უშლის შეწებებას და ამცირებს დაელექტროებას, იგი არის გამტარი, რაც ხელს უშლის ნაპერწკლების წარმოქმნას, ამით უზრუნველყოფს უსაფრთხო შენახვას და მარტივ დოზირებას. გრაფიტის საფარი ასევე ხდის მარცვლებს უფრო გლუვს, რაც კრიტიკულად მნიშვნელოვანია ერთგვაროვანი დამუხტვისათვის. გრაფიტიზებული დენთი გამოიყენება პიროტექნიკისათვის და ზოგიერთი სახეობა საბრძოლო მასალის დასამზადებლად. არსებობს: ერთფუძიანი - ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$), ორფუძიანი - ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$) + ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$), სამფუძიანი - ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$) + ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$) + ნიტროგუანიდინი ($CH_5N_5O_2$).

3.1 **საწყისი შედგენილობა (ერთფუძიანი):** ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$) - 98%, დეფენილამინი ($C_{12}H_{11}N_1$) – 1.0%, C – 1.0%, p = 20000 MPa;



სურ. 2. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

ანალიზის შედეგებიდან ჩანს, რომ კონდენსირებული ნახშირბადი **C(s)** გამოიყოფა 1500 K -დან და მისი მნიშვნელობაა მაქსიმუმი 9.68%, ხოლო სემდგომ მცირდება და 4000 K -ზე 3.92%-ია. 1500 K -დან ძირითადად გამოიყოფა აირები: CO, CO_2, N_2, O_2 და H_2O. მიღებული პროდუქტების პროცენტული წილის მონაცემები იხ.ცხრილი 4.

ცხრილი 4

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	CO(g)	CO_2(g)	N_2(g)	H_2O	O_2(g)
1500	**9.68**	-	55.9	14.2	20.22	-
2000	8.72	4.03	53.52	14.04	19.7	-
2500	7.45	10.35	48.71	14.1	19.4	-
3000	6.33	12.86	47.6	14.11	19.1	-
3500	5.45	44.63	-	14.53	-	33.2
4000	3.92	46.03	-	14.59	-	33.4

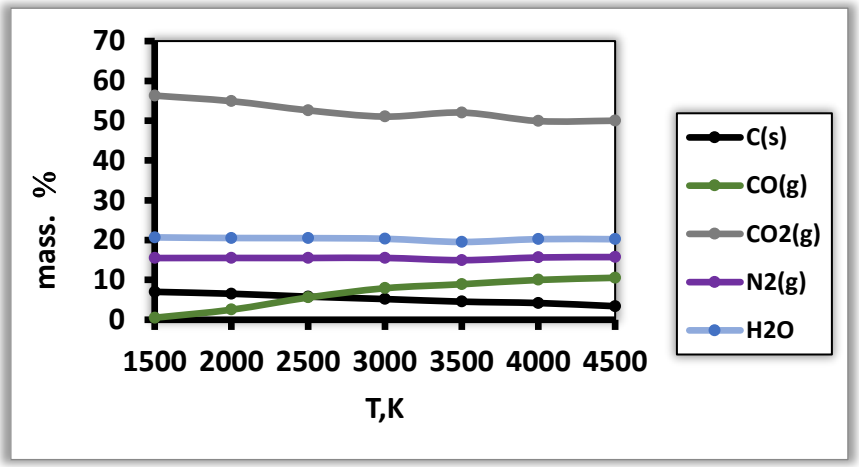
გათვლილი ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე.

ცხრილი 5

K	1500	2000	2500	3000	3500	4000
ΔH კკალ	-929	-603	-263	71	403	746

პროცესი ეგზოთერმულია **1500-2500 K** ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0,** ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული.

3.2. საწყისი შედგენილობა: ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$) - 63%, ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$) - 35%, დეფენილამინი ($C_{12}H_{11}N_1$) – 1.0%, C – 1.0%, p = 20000 MPa;



სურ. 3. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

ანალიზის შედეგებმა აჩვენა, რომ ნახშირბადი **C(s)** გამოიყო 1500 K-ზე და შეადგინა **7%,** შემდეგ მცირდება და 4500 K-ზე არის 3.4%. გამოიყოფა აგრეთვე H_2O და აირები: CO, CO_2, N_2. შედეგად მიღებული პროდუქტების პროცენტული წილი მოცემულია ცხრილში 6.

ცხრილი 6

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	CO(g)	CO_2(g)	N_2(g)	H_2O
1500	**7.01**	0.5	56.3	15.5	20.69
2000	6.53	2.52	54.9	15.52	20.53
2500	5.8	5.58	52.6	15.51	20.5
3000	5.2	7.91	51.03	15.53	20.34
3500	4.54	8.92	52.04	14.96	19.54
4000	4.2	10	49.91	15.64	20.25
4500	3.4	10.54	50	15.74	20.23

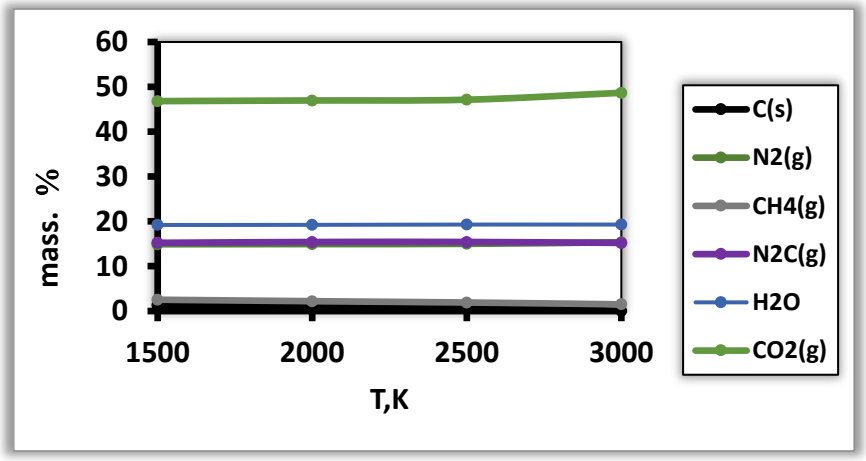
გათვლილი იქნა ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე.

ცხრილი 7

K	1500	2000	2500	3000	3500	4000
ΔH კკალ	-913	-589	-258	69.5	393	719

1500-2500 K ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0,** ე.ი. პროცესი ეგზოთერმულია, ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** პროცესი ხდება ენდოთერმული.

3.3 საწყისი შედგენილობა: ნიტროცელულოზა ($C_6H_7N_3O_{11}$) - 45%, ნიტროგლიცერინი ($C_3H_5N_3O_9$) - 16%, ნიტროგუანიდინი ($CH_5N_5O_2$)- 35%, დეფენილამინი ($C_{12}H_{11}N_1$) – 3.0%, C – 1.0%, p = 20000 MPa;



სურ. 4. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

სამიზნე პროდუქტი ნახშირბადი **C(s)** გამოიყოფა 1500 K-ზე მცირე რაოდენობთ 1.34%, 3000 K -ზე მთლიანად ქრება, 1500-3000 K ტემპერატურულ შუალედში გამოიყოფა აგრეთვე H_2O და აირები: CO_2, N_2, CH_4, N_2C. მიღებული პროდუქტების წილი %-ში მოცემულია ცხრილ 6-ში.

ცხრილი 8

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	N_2(g)	CO_2(g)	H_2O	CH_4(g)	N_2C(g)
1500	**1.34**	14.9	46.82	19.2	2.53	15.22
2000	1.33	14.94	46.96	19.22	2.2	15.4
2500	1.27	14.99	47.13	19.29	1.91	15.41
3000	-	15.34	48.67	19.29	1.5	15.2

ენთალპიის **ΔH** გათვლილი მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე მოცემულია ცხრილ 9-ში.

ცხრილი 9

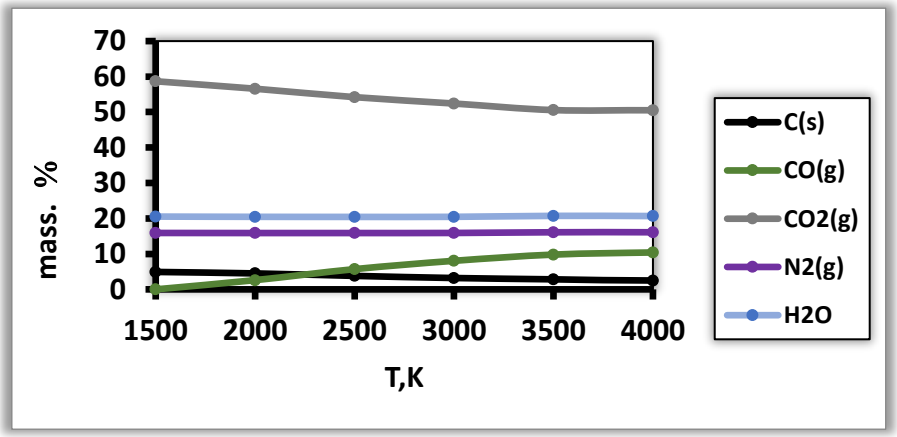
K	1500	2000	2500	3000
ΔH კკალ	-2216	-1067	99	1349

პროცესი მიმდინარეობს ეგზოთერმულად 1500-2000 K ტემპერატურულ შუალედში ΔH<0, ხოლო შემდგომ ΔH>0, ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული.

4) კოლოიდური დენთი - კოლოიდური დენთი (ხშირად უწოდებენ უბოლოს ან მცირებოლიან დენთს) არის თანამედროვე ტიპის ფეთქებადი ნივთიერება, რომელიც მიიღება ნიტროცელულოზის (პიროქსილინის) პლასტიფიცირებითა და დამუშავებით. ის წარმოადგენს ერთგვაროვან, მკვრივ მასას, რომელიც არ შეიცავს მექანიკურ ნაწილაკებს. ძირითადი მახასიათებლებია:

1) შემადგენლობა: ნიტროცელულოზა (C6H7O11N3), გამხსნელი და სტაბილიზატორები (ხშირად ნიტროგლიცერინის (C3H5N3O9) დამატებით). 2) თვისებები: იწვის მაღალი სიჩქარით, თითქმის უბოლოდ (მცირე კვამლით), მაღალი ენერგეტიკული ეფექტურობით. 4) გამოყენება: ძირითადად გამოიყენება თანამედროვე იარაღის ვაზნებში, რადგან არ აბინძურებს ლულას და იძლევა უკეთეს ბალისტიკურ მაჩვენებლებს. ეს არის დამუშავებული, პლასტიფიცირებული ნიტროცელულოზური დენთი.

საწყისი შედგენილობა: ნიტროგლიცერინი (C3H5N3O9) - 40%, ნიტროცელულოზა (კოლოქსილინი) (C6H7O11N3) - 60%, p = 20000 MPa;



სურ. 5. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

გრაფიკიდან ჩანს, რომ ნახშირბადი გამოიყოფა 1500 K-ზე და შეადგენს 4.91 %-ს, შემდეგ იკლებს და 4000 K-ზე შეადგენს 2.5%. 1500 K-ის ზემოთ გამოიყოფა H_2O და აიროვანი ფაზები CO, CO_2, N_2. ანალიზის შედეგები, პროდუქტების პროცენტული წილი ასახულია ცხრილი 10.

ცხრილი 10

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	CO(g)	CO_2(g)	N_2(g)	H2O
1500	**4.91**	-	58.67	15.90	20.52
2000	4.5	2.6	56.57	15.88	20.45
2500	3.8	5.70	54.20	15.88	20.43
3000	3.2	8.05	52.4	15.9	20.45
3500	2.83	9.8	50.55	16.1	20.72
4000	2.5	10.4	50.5	16.1	20.67

ცხრილ 11-ში მოცემულია ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე.

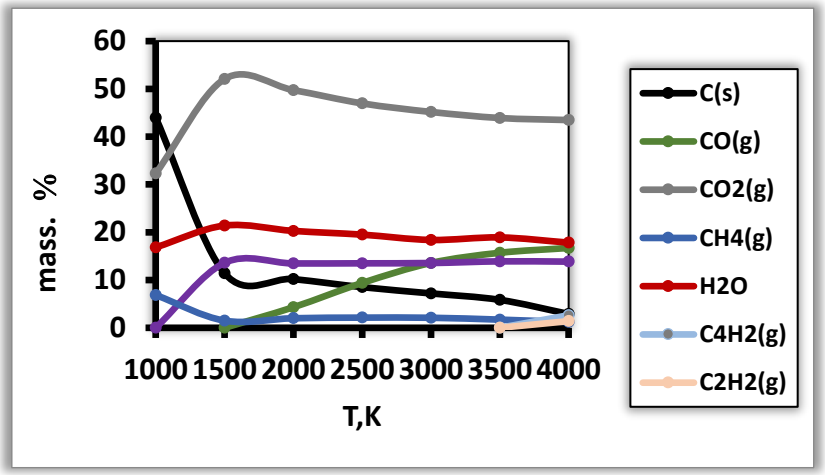
ცხრილი 11

K	**1500**	**2000**	**2500**	**3000**	**3500**	**4000**
ΔH კკალ	-942	-618	-287	39	359	677

1500-2500 K ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0** პროცესი ეგზოთერმულია**,** ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული.

5) პიროქსილინური დენთი - არის უკვამლო დენთის სახეობა, შექმნილი ნიტროცელულოზაზე (პიროქსილინის) ფუძეზე. იგი შეიცავს 91–96 % პიროქსილინს ($C_6H_7O_{11}N_3$), სტაბილიზატორებს (დიფენილამინი) ($C_{12}H_{11}N_1$), ფლეგმატიზატორებს და გრაფიტს. გამოიყენება მცირე ზომის იარაღში, საარტილერიო სისტემებში, სპორტულ და სანადირო ვაზნებში. ცეცხლსასროლ იარაღში გამოყენებისას, ის პრაქტიკულად უკვამლოდ იწვის, აქვს 1.56–1.64 გ/სმ³ სიმკვრივე და უზრუნველყოფს ტყვიის მაღალ სიჩქარეს. ძირითადი ნაკლოვანებებია შენახვის დროს ბალისტიკური მახასიათებლების ცვლილებები აქროლადი ნივთიერებებისა და ტენიანობის დაკარგვის გამო, ასევე ხანგრძლივი წარმოების ციკლი.

შედგენილობა №1: ნიტროცელულოზა ($C_6H_7O_{11}N_3$) - 93%, სპირტი (C_2H_6O) – 2.7%, დეფენილამინი ($C_{12}H_{11}N_1$) – 1.5%, პარაფინი ($C_{18}H_{38}$) – 2.5%, გრაფიტი - 0.3%, ϑ = 20000 MPa;



სურ. 6. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

სამიზნე პროდუქტი ნახშირნადი **C(s)** გამოიყოფა 1000 K-ზე და მისი რაოდენობა შეადგენს 44%-ს, ხოლო 1000-4000 K ტემპერატურულ შუალედში გამოიყოფა H_2O და აიროვანი ფაზები CO, CO_2, N_2, CH_4, C_4H_2 და C_2H_2. ანალიზის შედეგები მოცემულია ცხრილი 12.

ცხრილი 12

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	CO(g)	CO_2(g)	N_2(g)	CH_4(g)	H_2O	C_4H_2(g)	C_2H_2(g)
1000	**44**		32.3	0	6.86	16.84	-	-
1500	11.43	0	52.07	13.6	1.5	21.4	-	-
2000	10.2	4.30	49.75	13.47	2	20.28	-	-
2500	8.51	9.39	46.97	13.5	2.13	19.5	-	-
3000	7.2	13.57	45.18	13.56	2.1	18.39	-	-
3500	5.85	15.7	43.91	13.91	1.71	18.92	-	-
4000	2.9	16.71	43.48	13.85	1.2	17.83	2.63	1.4

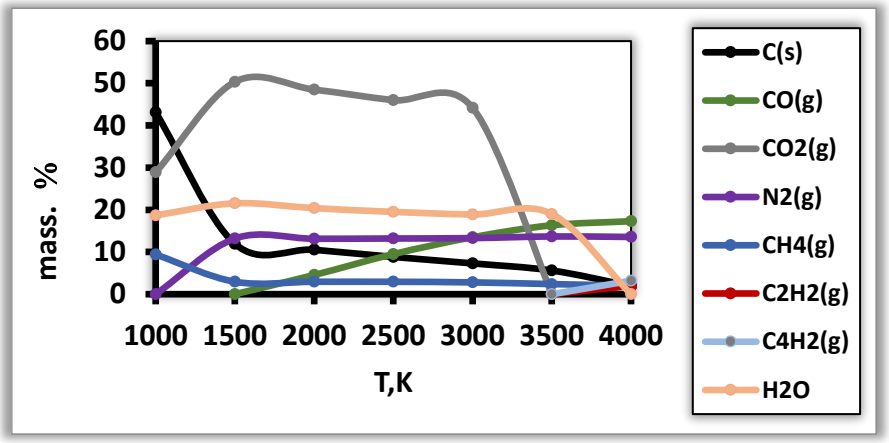
გათვლილი იქნა ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადსხვა ტემპერატურებზე.

ცხრილი 13

K	1000	1500	2000	2500	3000	3500	4000
ΔH კკალ	-1202	- 889	- 553	- 202	147	502	890

პროცესი მიმდინარეობს ეგზოთერმულად **1000-2500 K** ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0,** ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული.

შედგენილობა №2: ნიტროცელულოზა ($C_6H_7O_{11}N_3$) - 91%, სპირტი (C_2H_6O) – 5.0%, დეფენილამინი ($C_{12}H_{11}N_1$) – 1.5%, პარაფინი ($C_{18}H_{38}$) – 2.2%, გრაფიტი - 0.3%, p = 20000 MPa;



სურ. 7. აფეთქების პროდუქტების რაოდენობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

დიაგრამა გვიჩვენებს, 1000 K-ზე გამოყოფილი ნახშირბადის **C(s)** რაოდენობა 43.1%-ია, შემდგომ მცირდება და 4000 K-ზე 1.95%-ია, აგრეთვე 1000 K-ზე ზემოთ გამოიყოფა H_2O აირები CO, CO_2, N_2, CH_4, C_4H_2 და C_2H_2. ანალიზის შედეგები წარმოდგენილია ცხრილის 14 სახით.

ცხრილი 14

პროდუქტების პროცენტული წილი %

K	C(s)	CO(g)	CO_2(g)	N_2(g)	CH_4(g)	C_2H_2(g)	C_4H_2(g)	H_2O
1000	**43.1**	-	28.9	-	9.4	-	-	18.7
1500	11.95	-	50.35	13.2	2.95	-	-	21.55
2000	10.53	4.55	48.5	13.14	2.95	-	-	20.4
2500	8.83	9.5	46	13.21	2.94	-	-	19.52
3000	7.3	13.5	44.2	13.3	2.8	-	-	18.9
3500	5.61	16.34	-	13.69	2.4	-	-	19.01
4000	1.95	17.31	-	13.57	2.01	1.95	3.2	-

ცხრილ 15-ში მოცემულია გათვლილი ენთალპიის **ΔH** მნიშვნელობები სხვადასხვა ტემპერატურებზე.

ცხრილი 15

K	1000	1500	2000	2500	3000	3500	4000
ΔH კკალ	-1198	- 881	- 538	- 179	180	549	963

შედეგები აჩვენებს, რომ პროცესი მიმდინარეობს ეგზოთერმულად **1000-2500 K** ტემპერატურულ შუალედში **ΔH<0,** ხოლო შემდგომ **ΔH>0,** ე.ი. პროცესი ხდება ენდოთერმული.

დასკვნა

კომპლექსური პროგრამა **ASTRA 4** - ის გამოყენებით შესრულდა მაღალ წნევებზე (**p = 20000 MPa**) აფეთქების პროცესის მოდელირება. დადგენილ იქნა, რომ:

1. სამიზნე პროდუქტის ნახშირბადის **C(s)** რაოდენობა **ტროტილის** შემთხვევაში **2259 K** ტემპერატურზე შეადგენს მაქსიმუმს **42.8%**-ს;

2. მოცემული შედგენილობის **ბალისტიტური დენთის** შემთხვევაში ნახშირბადის **C(s)** პროცენტული მაქსიმუმია **7% 1500 K**-ზე, ხოლო შემდგომ ტემპერატურის ზრდასთან ერთად მცირდება;
3. სხვადსხვა ფუძიანი **გრაფიტიზირებული დენთის** შემთხვევაში ყველაზე მაღალი პროცენტული რაოდენობიოთ **C(s)** მიიღება ერთფუძიანი დენთის შემთხვევაში **1500 K**-ზე **9.68%;**
4. **კოლოიდური დენთის** შემთხვევაში **1500 K**-ზე **C(s)** პროცენტული მაქსიმუმია **4.91%;**
5. **პიროქსილინური დენთის** აფეთქებისას ორივე შედგენილობისათვის **C(s)** პროცენტული მაქსიმუმი **43-44%**-ია **1000 K**-ზე;
6. გათვლილი იქნა აფეთქების პროცესების ენთალპიები, რაც საშუალებას იძლევა მკაფიოდ გამოჩნდეს პროცესების ეგზოთერმულობა და მათი ტემპერატურული შუალედები.

შესრულებული გამოთვლები საშუალებას იძლევა მართული იქნას ექსპერიმენტული ნაწილი სამიზნე პროდუქტის მისაღებად.

მადლიერება

აღნიშნული სტატია შესრულებულია შოთა რუსთაველის საქართველოს ეროვნული სამეცნიერო ფონდის მიერ დაფინანსებული საგრანტო პროექტის (საგრანტო ხელშეკრულება № FR-24-4102) ფარგლებში.

ლიტერატურა

[1] Antipov A., Kalachyov A. Nanoalmazy dlya uluchshennyh galvanicheskih pokrytij // Nanoindustriya N4. 2012. s. 30-31.
[2] V. Yu. Dolmatov, D. V. Rudenko, A. O. Dorohov, A. A. Malygin, A. S. Kozlov, V. A. Marchukov. Poluchenie detonacionnyh almazov iz individualnyh vzryvchatyh veshestv. Fizika goreniya i vzryva, t. 57, № 2, 2021.
[3] M.V. Kazutin, N.V. Kozyrev, E.A. Petrov, M.V. Komarova. Sintez nanoalmaza pri Detonacii zaryadov TNT/CL-20. Polzunovskij vesnik № 4 T.1, 2016.
[4] Rubcov I. A. Dvuhstadijnaya model kondensacii ugleroda pri detonacii kondensirovannyh vzryvchatyh veshestv. Sibirskij fizicheskij zhurnal. Tom 17, № 2, 2022.
[5] V.D. Blank, A.A. Golubev, V.A. Gorbachev, A.A. Deribas, G.A. Dubickij, N.R. Serebryanaya, N.V. Shevchenko. Mikroalmazy detonacionnogo sinteza. HIMIYa I HIMIChESKAYa TEHNOLOGIYa. tom 55, vyp. 6. 2012.
[6] Detkov P. Ya., Petrov I. L. Sposob detonacionnogo sinteza nanoalmazov. Patent. RU 2 676 614C1, 2013.
[7] V. F. Anisichkin. On the Mechanism of the Detonation of Organic High Explosives. ISSN 19907931, Russian Journal of Physical Chemistry B, Vol. 10, No. 3, 2016. pp. 451–455.
[8] M. Bagge-Hansen, S. Bastea, J.A. Hammons, M.H. Nielsen and others. Detonation synthesis of carbon nano-onions via liquid carbon condensation. Nature Communications, 2019.
[9] Dolmatov V. Yu. Sposob polucheniya detonacionnyh nanoalmazov. Patent. Kod dokumenta: RU2711599C1.
[10] Yu. A. Komissarov, Dam Kuang Shang. Kompyuternoe obespechenie dlya opredeleniya Detonacionnyh i termodinamicheskih parametrov promyshlennyh vzryvchatyh veshestv. Vestnik AGTU. Ser.: Upravlenie, vychislitelnaya tehnika i informatika. № 3. 2016.

[11] K.P. Mishenko, A.A. Ravdel. Kratkij spravochnik fiziko-himicheskih velichin. Himiya, 1974. 200 s.
[12] N.M. Baron, A.M. Ponomareva, A.A. Ravdel, Z.N. Timofeeva. Kratkij spravochnik fiziko-himicheskih velichin. Himiya, 1983. 232 s.
[13] D. Stall, E. Vestrom, G. Zinke. Himicheskaya termodinamika organicheskih soedinenij Izdatelstvo «Mir», Moskva, 1971.
[14] V.A. Ryabin, M.A. Ostroumov, T.F. Svit. Termodinamicheskie svojstva veshestv. Spravochnik. Izd., Himiya,1977.
[15] M.H. Karapetyanc, M.L. Karapetyanc. Osnovnye termodinamicheskie kon¬stanty neorganicheskih i organicheskih veshestv. Izd., Himiya, Moskva, 1968.
[16] Pirospravka. Spravochnik po vzryvchatym veshestvam poroham i pirotehnicheskim Sostavam (Izdanie 6), Moskva, 2012.

IASHVILI TAMAR, UKLEBA KETEVAN

THERMODYNAMIC ANALYSIS OF THE SYNTHESIS PROCESS OF DETONATING NANODIMONDS FROM UTILIZED EXPLOSIVES OF VARIOUS COMPOSITIONS

ANNOTATION. One of the ways to solve the problem of further use of utilized explosives is to use the detonating mixture to obtain the final product nanodiamonds. One of the common methods for obtaining nanodiamonds is the synthesis of diamonds in the detonation processes of explosives. The article presents a thermodynamic analysis of the process of obtaining a diamond-containing detonating mixture, on the basis of which, before conducting experimental studies, we can theoretically determine what possible condensed phases are formed at different temperatures. The results of the thermodynamic analysis allow us to control the experimental part to obtain the target product, in particular, to minimize the number of experiments.

KEYWORDS: explosive; detonating synthesis; carbon; thermodynamic analysis; nanodiamonds.