

Национальный исследовательский Томский государственный университет
АО «Федеральный научно-производственный центр «Алтай»
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики
и медицинской химии РАН
Научный совет РАН по горению и взрыву
Научный совет РАН по химии, технологии и применению
энергетических конденсированных систем
Лаборатория исследований высокоэнергетических материалов (HEMRL)

ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И СПЕЦИАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ: АНТИТЕРРОРИЗМ, БЕЗОПАСНОСТЬ И ГРАЖДАНСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ

Сборник научных трудов
XIX Международной конференции «HEMs-2024»
12–14 сентября 2024 г.
(Томск, Россия)

Томск
Издательство Томского государственного университета
2024

National Research Tomsk State University, Russia
JSC «Federal Research & Production Center «Altai», Russia
The Scientific Council of the Russian Academy
of Sciences on Combustion and Explosion, Russia
The Scientific Council of the Russian Academy of Sciences on Chemistry,
Technology and Application of energy condensed systems, Russia
High Energy Materials Research Laboratory (HEMRL), India

**HIGH ENERGY
AND SPECIAL MATERIALS:
ANTITERRORISM, SECURITY
AND CIVIL APPLICATIONS**

Proceedings

19th International Workshop "HEMs-2024"

September 12–14, 2024

(Tomsk, Russia)

Tomsk
TSU Publishing
2024

УДК 662.3:658.149.3(063)

ББК 3.35

В93

В93 **Высокоэнергетические и специальные материалы: антитерроризм, безопасность и гражданское применение** : сборник научных трудов XIX Международной конференции «HEMs-2024». 12–14 сентября 2024 года (Томск, Россия). – Томск : Издательство Томского государственного университета, 2024. – 132 с.

ISBN 978-5-907890-20-6

Сборник содержит труды участников XIX Международной конференции «HEMs-2024» «Высокоэнергетические и специальные материалы: антитерроризм, безопасность и гражданское применение». В сборнике отражены последние достижения в области разработки высокоэнергетических материалов, специальных металлических и композиционных материалов и фармацевтических субстанций. Приведены результаты исследований в области научного обеспечения антитеррористических задач.

Для научных сотрудников, аспирантов, молодых ученых и специалистов, занимающимся вопросами создания высокоэнергетических и специальных материалов, химических субстанций двойного назначения и медико-биологических материалов; исследования и разработки специальных металлических и композиционных материалов, нанотехнологиями (в том числе в медицине, фармацевтике, металлургии); проблемами биобезопасности.

УДК 662.3:658.149.3(063)

ББК 3.35

СОПРЕДСЕДАТЕЛИ ОРГКОМИТЕТА КОНФЕРЕНЦИИ

А.Б. Ворожцов

Томск, Россия

Б.В. Певченко

Бийск, Россия

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Грузнов В.М.

ИНГТ СО РАН, д-р техн. наук, Новосибирск, Россия

Максимов Е.М.

ФГКУ «В/Ч 68240», д-р техн. наук, Москва, Россия

Медвецкий С.В.

ФГКУ «В/Ч 68240», д-р техн. наук, Москва, Россия

Никитин Р.Г.

АО «ФНПЦ «Алтай», канд. техн. наук, Бийск, Россия

Рашковский С.А.

ИПМех РАН, д-р физ.-мат. наук, Москва, Россия

Сакович Г.В.

ИПХЭТ СО РАН, академик РАН, Бийск, Россия

Смирнов В.С.

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, канд. хим. наук, Черногловка, Россия

Султанов В.Г.

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, д-р физ.-мат. наук, Черногловка, Россия

Титов С.С.

ИПХЭТ СО РАН, канд. техн. наук, Бийск, Россия

Sameer Abdul Azeez

Посольство Индии, Москва, Россия

Prasanta Kumar Adak

Лаборатория исследований высокоэнергетических материалов, Пуна, Индия

Anil Prasad Dash

Лаборатория исследований высокоэнергетических материалов, Пуна, Индия

Luigi DeLuca

Миланский политехнический университет, Милан, Италия

Keiichi Hori

Японское агентство аэрокосмических исследований, Цукуба, Япония

Andreas Koleczko

Фраунгоферский институт химической технологии, Карлсруэ, Германия

Christian Paravan

Миланский политехнический университет, Милан, Италия

Raphaël Terreux

Лионский университет I им. Клода Бернара, Лион, Франция

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Секретарь конференции

Хмелева М.Г.

НИ ТГУ, канд. физ.-мат. наук, Томск

Мин О.В.

НИ ТГУ, Томск

Пикушак Е.В.

НИ ТГУ, канд. физ.-мат. наук, Томск

Соколов С.Д.

НИ ТГУ, Томск

ISBN 978-5-907890-20-6

© Томский государственный университет, 2024

UDC 3.35
LBC 662.3:658.149.3(063)

High Energy and Special Materials: Antiterrorism, Security and Civil Applications : Proceedings of the 19th International Workshop "HEMs-2024". September 12–14, 2024 (Tomsk, Russia). – Tomsk : TSU Publishing, 2024. – 132 p.

ISBN 978-5-907890-20-6

The proceedings contain the works of the participants of the 19th International Workshop "HEMs-2024": High-Energy and Special Materials: Antiterrorism, Security and Civil Applications.

The proceedings reflect the latest achievements in the development of high-energy materials, special metal and composite materials, and pharmaceutical substances. It also presents some research findings on the scientific support of antiterrorist activities.

The proceedings are intended for research fellows, postgraduate students, young scientists, and professionals involved in the creation of high-energy and special materials, dual-purpose chemical substances, and medico-biological materials; research and development of special metal and composite materials, nanotechnologies (in such fields as medicine, pharmaceuticals, metallurgy); biosecurity.

UDC 3.35
LBC 662.3:658.149.3(063)

CONFERENCE CO-CHAIRS

Prof. Alexander Vorozhtsov
Tomsk, Russia

Dr. Boris Pevchenko
Biysk, Russia

PROGRAM COMMITTEE

Mr. Sameer Abdul Azeez	Embassy of India, Moscow, Russia
Dr. Anil Prasad Dash	High Energy Materials Research Laboratory, Pune, India
Mr. Prasanta Kumar Adak	High Energy Materials Research Laboratory, Pune, India
Prof. Luigi DeLuca	Politecnico di Milano, Milan, Italy
Dr. Vladimir Gruznov	IPGG SB RAS, Novosibirsk, Russia
Prof. Keiichi Hori	JAXA/ISAS, Sagami-hara, Japan
Mr. Andreas Koleczko	Fraunhofer ICT, Pfinztal, Germany
Dr. Evgeniy Maksimov	FGKU "V/Ch 68240", Moscow, Russia
Dr. Sergey Medvetsky	FGKU "V/Ch 68240", Moscow, Russia
Dr. Roman Nikitin	JSC FR&PC "Altai", Biysk, Russia
Dr. Christian Paravan	Politecnico di Milano, Milan, Italy
Dr. Sergey Rashkovskiy	IPMech RAS, Moscow, Russia
Acad. Gennadiy Sakovich	IPCET SB RAS, Biysk, Russia
Dr. Vladimir Smirnov	FRC PCP MC RAS, Chernogolovka, Russia
Dr. Valery Sultanov	FRC PCP MC RAS, Chernogolovka, Russia
Prof. Raphaël Terreux	Université Lyon 1, Lyon, France
Dr. Sergey Titov	IPCET SB RAS, Biysk, Russia

ORGANIZING COMMITTEE

Workshop Secretary

Dr. Marina Khmeleva	Tomsk State University, Tomsk
Ms. Olga Min	Tomsk State University, Tomsk
Dr. Elizaveta Pikushchak	Tomsk State University, Tomsk
Mr. Sergey Sokolov	Tomsk State University, Tomsk

ISBN 978-5-907890-20-6

© Tomsk State University, 2024

материалов – продукции химической промышленности: пластификаторы, антиоксиданты, антипирены и пр. Некоторые из этих веществ обладают доказанной эндокринной активностью и другими вредными факторами воздействия на организм. Так же наблюдаются следы медицинских препаратов; этиловые эфиры жирных кислот, являющиеся маркерами употребления этанола; у наркозависимых – следы наркотических веществ и их метаболиты. В качестве примера применения разрабатываемого подхода для терапевтического мониторинга с высоким временным разрешением приведены результаты определения следов кофеина на поверхности кожи пальцев рук после употребления кофе. В ходе экспериментов наблюдается рост содержания кофеина в пробах ЛПС, начиная с 5-й минуты, с фонового уровня 0,01 до 0,7 нг

Заключение. В результате исследований показано, что предложенный подход к экспрессному неинвазивному контролю экзогенных веществ в ЛСК может быть использован для разработки новых методов биомониторинга, а также для расширения арсенала технико-криминалистических методов, использующихся для решения задач противодействия терроризму.

Дальнейшие работы в данном направлении предполагают, как изучение фундаментальных аспектов механизмов процессов биотрансформации и переноса целевых веществ, так и исследования, ориентированные на разработку, апробацию и внедрение новых экспрессных методов скрининга, мониторинга и контроля химических маркеров в ЛСК на базе малогабаритной масс- и хромато-масс-спектрометрической аппаратуры.

Работа выполнена за счет средств ПФНИ РФ: проект «Новые технологии внелабораторного химического анализа и контроля, прецизионных измерений физических полей природных и техногенных объектов» FWZZ-2022-0027.

Литература

1. Makas A.L., Troshkov M.L. Field gas chromatography – mass spectrometry for fast analysis // Journal of Chromatography B. 2004. No. 800. P. 55–61.
2. Makas A.L., Troshkov M.L., Kudryavtsev A.S., Lunin V.M. Miniaturized mass-selective detector with atmospheric pressure chemical ionization // Journal of chromatography B. 2004. V. 800, No. 1-2. P. 63–67.
3. Патент 218361 РФ, МПК G01N 30/04. Устройство для отбора и подачи проб труднолетучих веществ на химический анализ / Макасы А.Л., Трошков М.Л., Кудрявцев А.С. Заявлено 20.03.2023. Опубликовано 23.05.2023. Бюл. № 15.

УДК 51-73

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ПАРОВ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ В ПОЧВЕ В ЗАДАЧЕ ГУМАНИТАРНОГО РАЗМИНИРОВАНИЯ

Кудряшова О.Б.^{1✉}, Соколов С.Д.¹, Ворожцов А.Б.¹

¹ *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

✉ *E-mail: olgakudr@inbox.ru*

Аннотация. Проблема гуманитарного разминирования остается актуальной на глобальном уровне из-за большого количества неразорвавшихся боеприпасов и мин, оставшихся в почве. Важной задачей в этой области является обнаружение таких боеприпасов, которые не могут быть найдены с помощью стандартных методов, таких как металлодетекторы или инфракрасная съемка. В таких случаях остается возможность поиска следовых количеств взрывчатых веществ в воздухе над почвой и в ее поверхностных слоях. Эффективность и

пригодность этих методов обнаружения зависят от понимания процессов переноса химических сигнатур взрывчатых веществ через почву. В данной работе предложена и исследована математическая модель переноса паров взрывчатых веществ через слой почвы. Основное внимание уделено диффузии как главному механизму перемещения паров через воздушные поры в почве. Исследовано влияние влажности почвы на скорость перемещения паров; на основе анализа размерностей задачи введено характерное время, необходимое для обнаружения паров ВВ над поверхностью почвы.

MODELING OF EXPLOSIVE VAPOR TRANSPORT IN SOIL IN THE PROBLEM OF HUMANITARIAN DEMINING

Kudryashova O.B.^{1✉}, Sokolov S.D.¹, Vorozhtsov A.B.¹

¹ National Research Tomsk State University, Tomsk

✉ E-mail: olgakudr@inbox.ru

Abstract. *The problem of humanitarian demining remains relevant at the global level due to the large number of unexploded ordnance and mines remaining in the soil. An important task in this area is the detection of such munitions that cannot be found using standard methods such as metal detectors or infrared imaging. In such cases, it remains possible to search for trace amounts of explosives in the air above the soil and in its surface layers. The efficiency and suitability of these detection methods depend on understanding the processes of transfer of chemical signatures of explosives through the soil. In this paper, a mathematical model of the transfer of explosive vapors through the soil layer is proposed and investigated. The main attention is paid to diffusion as the main mechanism of vapor movement through air pores in the soil. The effect of soil moisture on the rate of vapor movement is studied; based on the analysis of the problem dimensions, a characteristic time required to detect explosive vapors above the soil surface is introduced.*

Введение. Около ста миллионов неразорвавшихся снарядов и мин остается в земле более чем в шестидесяти странах, что приводит к тысячам жертв ежегодно, в том числе среди детей. Гуманитарное разминирование направлено на удаление мин и неразорвавшихся боеприпасов (НБ) для обеспечения безопасности населения и восстановления экономики.

Традиционные методы разминирования, такие как использование металлодетекторов, имеют ограничения, включая высокую степень ложных тревог и неспособность обнаружить неметаллические боеприпасы [1].

Современные модели переноса молекул ВВ учитывают диффузию, конвекцию и сорбцию. Однако для практического применения требуется создание более простых моделей, сосредоточенных на ключевых процессах, таких как диффузия. Настоящая работа направлена на развитие и анализ диффузионной модели транспорта паров ВВ в почве для прогнозирования концентрации паров на поверхности земли.

Математическая модель. Представлена диффузионная модель транспорта паров ВВ от закопанного в почву источника, следуя работе [2]. Пусть на глубине z_0 в почве в течение времени t находится источник ВВ от неразорвавшихся боеприпасов. Почва характеризуется влажностью ϕ , насыпной плотностью ρ_b , истинной плотностью ρ_T , пористостью, $\rho_b = \rho_{bd} (1 + \phi)$, где ρ_{bd} – насыпная плотность сухой почвы. Вещество характеризуется плотностью насыщенных паров C_A^{sat} , скоростью диффузии паров в воздухе D_A , константами взаимодействия с почвой и водой (константа Генри и др.) Необходимо найти плотность паров ВВ в поверхностном слое почвы $W(z,t)$ [мг/кг].

Уравнение для концентрации паров ВВ на расстоянии z от источника:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{R_f} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \quad (1)$$

с начальным условием $t = 0, z > 0, C_A = 0$, с граничными условиями: $z = 0$ (точка размещения источника паров ВВ, мина): $C_A = C_A^{sat}$; $z = \infty$ (далеко над поверхностью): $C_A = 0$.

Эффективный коэффициент диффузии: $D_{eff} = D_A \varepsilon_a^{0,33} / \varepsilon_T^2$, где ε_a – пористость, заполненная воздухом, и ε_T – общая пористость почвы, $\varepsilon_T = 1 - \rho_b / \rho_T = \varepsilon_a + \varepsilon_w$. Коэффициент замедления за счет сорбции: $R_f = \varepsilon_a \rho_b K_{SA}$, где K_{SA} – константа распределения почва-воздух (л/кг) (свободный параметр моделию)

Аналитическое решение уравнения (1):

$$C_A(z, t) = C_A^{sat} e^{-k_1 t} \operatorname{erfc} \left(\frac{z}{\sqrt{4D_R t}} \right). \quad (2)$$

Здесь $D_R = D_{eff} / R_f$, $W(z, t) = K_{SA} \cdot C_A(z, t)$. Уравнение (2) в безразмерном виде:

$$C = \operatorname{erfc} \left(\frac{2\xi}{\sqrt{\theta}} \right). \quad (3)$$

Здесь $C = C_A / C_A^{sat}$ – безразмерная концентрация (отношение концентрации паров к концентрации насыщенных паров), $\xi = z / z_0$, $\theta = t / t_0$. Масштаб времени: $t_0 = z_0^2 / (16D_R)$. Физический смысл этого параметра – время достижения максимальной концентрации вещества в поверхностном слое.

Результаты. Проведены расчеты эффективной диффузии и характерного времени достижения максимальной концентрации вещества в песчаной почве для трех типов ВВ (таблица). В расчетах приняты данные для песка: истинная плотность $\rho_T = 2500 \text{ кг/м}^3$, насыпная плотность $\rho_b = 1550 \text{ кг/м}^3$. Результаты приведены на рис. 1.

Характеристики паров ВВ (при 25°C)

ВВ	TNT	PETN	RDX
$C_A^{sat}, 10^{-6} \text{ г/см}^3$	84,98	0,1383	0,00441
$D_A, 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$	5,68	5,53	6,16

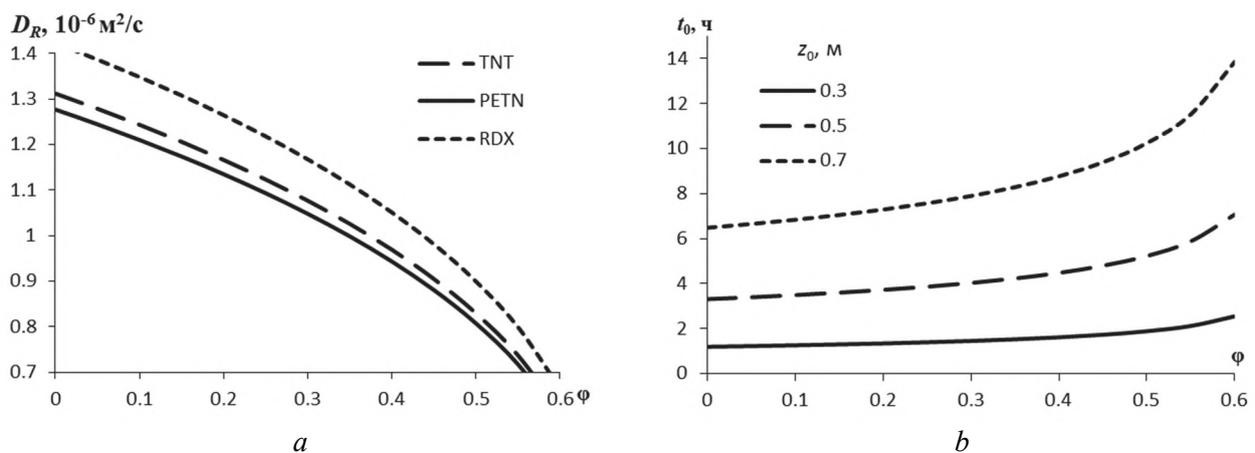


Рис. 1. Зависимость эффективной диффузии в порах D_R (a) и характерного времени t_0 (расчет для TNT) (b) от влажности почвы ϕ

С ростом влажности почвы уменьшается объем заполненных газом пор, в которых могут распространяться пары вещества, поэтому, начиная, примерно, с $\phi = 0.4-0.5$ коэффициент диффузии быстро уменьшается, стремясь к нулю. Характерное время распространения паров в толще почвы растет с ростом влажности.

Заключение. Предложенная математическая модель позволяет предсказать некоторые зависимости для концентрации паров вещества на поверхности почвы в зависимости от влажности почвы, времени появления источника паров, глубины источника, а также физико-химических свойств почвы и ВВ. В результате проведенных исследований выявлен важный параметр модели – масштаб времени t_0 . Оценка масштаба t_0 позволяет определить время с момента захоронения, когда источник паров ВВ может быть обнаружен.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2024-557 от 25.04.2024).

Литература

1. Badia S.B., Verschure P.F.M.J. Humanitarian demining using an insect based chemical unmanned aerial vehicle // Humanitarian Demining. Rijeka : IntechOpen, 2008. 31 p.
2. Ravikrishna R., Valsaraj K.T., Price C.B., Brannon J.M., Hayes C.A., Yost S.L. Vapor-phase transport of explosives from buried sources in soils // Journal of the Air & Waste Management Association. 2004. V. 54, No. 12. P. 1525–1533. doi: 10.1080/10473289.2004.10471017

УДК 681.78; 535.35; 621.396; 539.1.074.2

КОНСТРУКТИВНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕРНИЗАЦИЯ ДЕТЕКТОРА ПАРОВ НИТРОСОЕДИНЕНИЙ ЗАСЛОН-М

Баранова А.А.¹, Бояринцев А.И.¹, Хохлов К.О.¹✉

¹ ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург

✉ E-mail: k.o.khokhlov@urfu.ru

Аннотация. В настоящей работе представлен вариант модернизации детектора паров нитросоединений Заслон-М, заключающийся в возможности беспроводного способа оповещения обнаружения в различных конфигурациях, а также в добавлении модуля индикатора радиоактивности для повышения функционала устройства.

CONSTRUCTIVE AND TECHNOLOGICAL MODERNIZATION OF THE VAPOR DETECTOR OF ZASLON-M NITRO COMPOUNDS

Baranova A.A.¹, Boyarintsev A.I.¹, Khokhlov K.O.¹✉

¹ Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education «Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin», Ekaterinburg

✉ E-mail: k.o.khokhlov@urfu.ru

Abstract. This paper presents a variant of upgrading the Zaslون-M nitro compound vapor detector, which consists in the possibility of a wireless detection notification method in various configurations, as well as the addition of a radioactivity indicator module to enhance the functionality of the device.