

CÂN BẰNG Ô XY CỦA CHẤT NỔ VÀ VIỆC TÍNH TOÁN SẢN PHẨM NỔ

KS. NGUYỄN CÔNG THAO

Công ty Công nghiệp Hóa chất mỏ Nam Bộ

Sản phẩm của phản ứng nổ là rất phức tạp, do đó để tính toán được sản phẩm nổ thực sự là công việc hết sức khó khăn. Việc tính toán sản phẩm nổ có ý nghĩa rất quan trọng trong lĩnh vực quân sự cũng như trong các lĩnh vực dân sinh khác liên quan đến chất nổ. Trong lĩnh vực vật liệu nổ công nghiệp, việc tính toán sản phẩm nổ nhằm phục vụ cho việc thiết kế khối nổ đảm bảo an toàn, hiệu quả và bảo vệ môi trường khi tiến hành khai thác tài nguyên hay xây dựng công trình...

Quá trình sử dụng thuốc nổ đòi hỏi phải tính toán sản phẩm nổ để xác định các chỉ tiêu, thông số nổ, xây dựng các biện pháp ngăn ngừa những sản phẩm độc hại như CO, NO_x. Khi tính được sản phẩm nổ sẽ đưa ra các biện pháp khắc phục bằng cách thêm các chất khác nhau để điều chỉnh phản ứng nổ hoặc điều chỉnh các chỉ tiêu, thông số nổ nhằm đạt hiệu quả cao nhất.

Khi sử dụng chất nổ công nghiệp để phá vỡ đất đá việc tính toán sản phẩm nổ nhằm xác định các thông số nổ lý thuyết như: nhiệt độ nổ ban đầu, nhiệt lượng nổ, thể tích sản phẩm khí nổ... là rất quan trọng, vì nó cơ sở để tính toán các chỉ tiêu, thông số nổ mìn.

Việc tính toán sản phẩm nổ có thể bằng phương pháp đo thực nghiệm hay lý thuyết. Phương pháp đo thực nghiệm là tốt nhất nhưng không phải lúc nào cũng thực hiện được hoặc là cho kết quả như mong muốn. Vì vậy việc tính toán lý thuyết không thể thiếu được trong quá trình nghiên cứu.

Để tính toán được sản phẩm nổ theo lý thuyết cần phải xây dựng được phương trình phản ứng phân hủy của chất nổ. Có rất nhiều nguyên tắc để xác lập phương trình cân bằng sản phẩm nổ, trong đó hằng số cân bằng oxy có ảnh hưởng lớn đến việc xác lập phương trình.

1. Hằng số cân bằng oxy

Hằng số cân bằng oxy không phải là đại lượng đặc trưng cho mức bão hòa oxy của phân tử chất nổ mà nó biểu thị cho số gam oxy chứa trong 100 gam chất nổ. Hằng số cân bằng oxy (Ω) được xác định bằng hiệu số giữa lượng oxy tính theo gam có trong phân tử chất nổ và lượng oxy tính theo gam cần thiết để oxy hóa hoàn toàn các nguyên tố cháy. Nếu phân

tử chất nổ có chứa vừa đủ oxy để biến đổi tất cả C thành CO₂; H₂ thành H₂O và tất cả kim loại thành oxyt kim loại thì người ta nói rằng chất nổ đó có cân bằng oxy bằng không. Nếu phân tử chất nổ đó không đủ oxy để chuyển các nguyên tố cháy thành phần về các oxyt có oxy hóa cao nhất tương ứng thì chất nổ đó có cân bằng oxy âm và ngược lại là chất nổ đó có cân bằng oxy dương.

Công thức tính toán hằng số cân bằng oxy của chất nổ có công thức phân tử C_aH_bN_cO_d, có khối lượng phân tử là M như sau:

$$\Omega = 1600(d - 2a - b/2)/M, \%$$

Ví dụ: Chất nổ hexogen có công thức phân tử là C₃H₆N₆O₆

$$\Omega = 1600(6 - 2 \cdot 3 - 6/2)/222 = -21,62 \%$$

2. Phương trình phân hủy chất nổ

2.1. Khi hằng số cân bằng oxy dương

Có thể xảy ra sự tương tác giữa 4 nguyên tố C, H, N, O theo các phản ứng khác nhau trong 1 chất nổ. Khi tương tác giữa 4 nguyên tố C, H, N, O nhiệt lượng tỏa ra lớn nhất khi C, H được oxy hoàn toàn thành CO₂ và H₂O. Do đó biến hóa nổ của chất nổ có hằng số cân bằng oxy dương ta có thể áp dụng nguyên tắc đơn giản là tất cả C thành CO₂; H₂ thành H₂O còn lượng nitơ và oxy thừa ở dạng đơn chất.

$$\text{Ví dụ: } C_3H_5N_3O_9 = 3CO_2 + 2,5H_2O + 1,5N_2 + 0,25O_2$$

Giữa các sản phẩm nổ có thể xảy ra phản ứng nổ thứ cấp như: 2CO₂=2CO+O₂; 2H₂O=2H₂+O₂; N₂+O₂=2NO. Nhưng lượng CO, H₂, NO và các chất phụ khác trong sản phẩm nổ không đáng kể nên các phản ứng này ít được xem xét đến trừ khi tiến hành công tác nổ ở mỏ hầm lò hoặc trong điều kiện kín.

2.2. Khi hằng số cân bằng oxy âm

Phương trình phân hủy tổng quát có dạng:

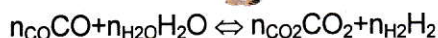
$$C_aH_bN_cO_d = n_{CO}CO + n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2}H_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{N_2}N_2 + n_{C}C$$

Trong đó: n_{CO}, n_{CO₂} ... là số mol của sản phẩm tương ứng.

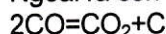
$$n_{CO} + n_{CO_2} + n_C = a; n_{H_2} + n_{H_2O} = b;$$

$$2n_{N_2} = c; n_{CO} + n_{CO_2} + n_{H_2O} = d$$

Giữa các sản phẩm nổ tồn tại phản ứng thuận nghịch (phản ứng khí ướt):

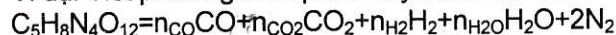


Ngoài ra còn có thể xảy ra phản ứng lò cao:



Để xác định các hệ số chưa biết phải xác định nhiệt độ nổ, nhiệt độ sản phẩm nổ và dùng phương pháp giải gần đúng liên tiếp.

Ví dụ: Viết phương trình phân hủy thuốc nổ "ten".



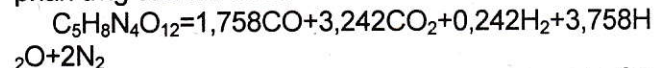
Chọn nhiệt độ nổ giả định $T_n = 4.000^\circ K$. Ở nhiệt độ này hằng số cân bằng phản ứng khí ướt là 8,418. Chúng ta có hệ phương trình sau:

$$n_{CO} + n_{CO_2} = 5; n_{H_2} + n_{H_2O} = 8$$

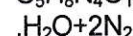
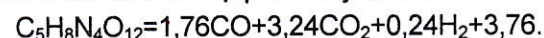
$$n_{CO} + n_{CO_2} + n_{H_2O} = 12$$

$$(n_{CO} \cdot n_{H_2O}) / (n_{CO_2} \cdot n_{H_2}) = 8,418$$

Giải hệ phương trình trên ta tìm được $n_{CO} = 1,758$; $n_{CO_2} = 3,242$; $n_{H_2} = 0,242$; $n_{H_2O} = 3,758$. Phương trình phản ứng của ten sẽ là:



Nhiệt độ tính theo phương trình này là $4.304^\circ K$, hằng số cân bằng ở nhiệt độ này là 8,531. Ta lại giải hệ phương trình trên 1 lần nữa và tìm được phương trình mới biểu diễn sự phân hủy của ten:



Nhiệt độ nổ tính theo phương trình này là $4.303^\circ K$

3. Dùng nguyên tắc Kistiakovski-Wilson để tính toán sản phẩm nổ

Bảng 1. Nguyên tắc chuyển đổi từ các đơn chất về oxyt tương ứng

Thành phần của chất nổ	Sản phẩm của sự phân hủy	Trạng thái của sản phẩm
Kim loại và Clo	Muối kim loại của Clo	Rắn
Hidro	HCl	Khí
Kim loại và oxy	Kim loại oxit	Rắn
Carbon và oxy	CO	Khí
Hidro và oxy	H ₂ O	Khí
CO và oxy	CO ₂	Khí
Nitơ	N ₂	Khí
Thừa oxy	O ₂	Khí
Thừa Hidro	H ₂	Khí
Thừa Carbon	C	Rắn

Bảng 2.

Tên chất	Công thức	% theo KL	KL mol	Tỷ lệ mol trong 1kg của HH	Số mol nguyên tử trong 1kg HH			
					C	H	N	O
AN	H ₄ N ₂ O ₃	0,94	80	11,75	0	47,00	23,50	35,25
FO	CH ₂	0,06	14	4,29	4,29	8,58	0	0
Tổng					4,29	55,58	23,50	35,25

Nguyên tắc sử dụng bảng trên:

❖ Nếu hằng số cân bằng ô xy $\Omega < -40\%$ thì xem như tất cả nguyên tử H chuyển về H₂O trước.

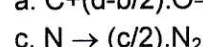
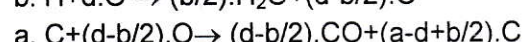
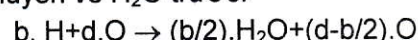
❖ Nếu hằng số cân bằng ô xy $\Omega > -40\%$ thì xem như tất cả nguyên tử C chuyển về CO trước.

Trình tự tính toán sản phẩm nổ:

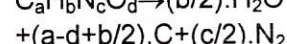
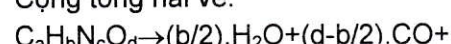
❖ Bước 1 - Lập công thức giả định của chất nổ (Trong trường hợp chất nổ là hỗn hợp của 2 hay nhiều chất khác nhau).

❖ Bước 2 - Tính hằng số cân bằng ô xy

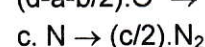
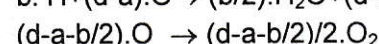
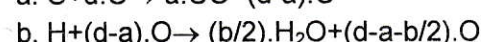
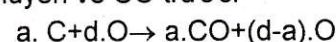
❖ Bước 3 - Viết phương trình phân hủy chất nổ
Nếu hằng số cân bằng ô xy $\Omega < -40\%$ thì tất cả H chuyển về H₂O trước.



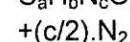
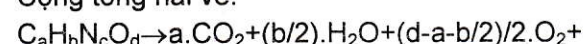
Cộng tổng hai vế:



Nếu hằng số cân bằng ô xy $\Omega > -40\%$ thì tất cả C chuyển về CO trước.



Cộng tổng hai vế:



❖ Bước 4 - Tính thể tích sản phẩm khí nổ

+ Trường hợp $\Omega < -40\%$:

Tổng số mol khí tạo thành:

$$n = b/2 + (d-b/2) + c/2$$

Thể tích khí sinh ra ở ĐKTC là:

$$[b/2 + (d-b/2) + c/2] \cdot 22,4/M; (\text{lít}).$$

+ Trường hợp $\Omega > -40\%$:

Tổng số mol khí tạo thành:

$$n = a + b/2 + (d-2a-b/2) + c/2$$

Thể tích khí sinh ra ở ĐKTC là:

$$[a + b/2 + (d-2a-b/2) + c/2] \cdot 22,4/M; (\text{lít}).$$

Ví dụ: Tính toán sản phẩm khí khi phân hủy nổ của ANFO (94/6)

❖ Bước 1 - Lập công thức giả định của ANFO (Bảng 2).

Ta có công thức giả định chung của ANFO là:

$C_{4,29}H_{55,58}N_{23,50}O_{35,25}$ và $M=1.000,06$.

❖ Bước 2 - Tính hằng số cân bằng ô xy

$\Omega = 1.600 \cdot [35,25 - (2 \cdot 4,29) - (55,58/2)] / 1.000,06 = -1,79$

❖ Bước 3 - Viết phương trình sơ bộ

Do $\Omega > -40\%$ nên tất cả C chuyển về CO trước.

$4,29.C + 35,25.O \rightarrow 4,29.CO + 30,96.O$

$55,58.H + 30,96.O \rightarrow 27,79.H_2O + 3,17.O$

$4,29.CO + 3,17.O \rightarrow 3,17.CO_2 + 1,12.CO$

$23,50.N \rightarrow 11,75.N_2$

Tổng cộng 2 vế:

$C_{4,29}H_{55,58}N_{23,50}O_{35,25}$

$\rightarrow$

$3,17.CO_2 + 1,12.CO + 27,79.H_2O + 11,75.N_2$

❖ Bước 4 - Tính thể tích sản phẩm khí nổ

Tổng số mol khí tạo thành là:

$n = 3,17 + 1,12 + 27,79 + 11,75 = 43,83 \text{ mol}$.

Thể tích khí sinh ra ở ĐKTC khi phân hủy 1 gam hỗn hợp chất nổ trên là: $43,83 \times 22,4 / 1.000,06 = 0,982 \text{ lít}$.

4. Kết luận

Việc xác định thành phần và các thông số sản phẩm nổ là yếu tố cần thiết cho việc tính toán nhiệt nổ và lựa chọn các biện pháp thiết kế khối nổ, ngăn ngừa những sản phẩm độc hại tới môi trường.

Trên cơ sở xác lập phương trình phân hủy nổ cho các chất nổ hay hỗn hợp các chất nổ đưa ra được nguyên tắc tính toán chung cho mọi thuốc nổ bất kỳ. Việc ứng dụng nguyên tắc này có thể nhanh chóng xác định được thành phần và thể tích sản phẩm nổ của một phản ứng nổ. □

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Lê Duy Bình và cộng sự. Cơ sở lý thuyết tính toán cân bằng sản phẩm phân hủy nổ của các chất nổ. Tạp chí Nghiên cứu khoa học và công nghệ quân sự. Số đặc biệt. 10-2009.
2. Website www.knowleggerush.com.
3. Website www.fact-index.com.

Người biên tập: Hồ Sỹ Giao

SUMMARY

The paper shows the methods calculating the blasting products on the process activating some explosives in real conditions.

CÁC YẾU TỐ CƠ BẢN...

(Tiếp theo trang 18)

3. Các yếu tố kinh tế-tổ chức

Khi các yếu tố tự nhiên đã biết (cố định), các thông số của HTKT, các loại thiết bị và yêu cầu mức độ đập vỡ đất đá đã biết thì việc sử dụng các thông số nổ mìn, loại thuốc nổ và phương tiện nổ là vấn đề rất được quan tâm và có ảnh hưởng đáng kể tới giá thành nổ mìn. Một vấn đề rất quan trọng ảnh hưởng đến hiệu quả công tác nổ mìn là công tác tổ chức. Công tác tổ chức hợp lý sẽ tiết kiệm được chi phí thuốc nổ và phương tiện nổ nâng cao chất lượng nổ mìn.

Ví dụ: cần có biện pháp tổ chức thi công phù hợp giữa khoan và nổ, có biện pháp bảo quản lỗ khoan trước khi nạp thuốc, kiểm tra từng lỗ khoan về mực nước, độ sâu, kiểm tra chiều cao cột thuốc và chiều cao búa, giám sát quá trình thi công nạp mìn,...

Tóm lại, khi tiến hành thiết kế một bãi mìn, người kỹ sư phải nắm vững và chỉ rõ các vùng địa chất, tính chất cơ lý của đất đá cụ thể trong bãi khoan, phải hiểu rõ những yếu tố ảnh hưởng cơ bản về kỹ thuật-công nghệ có ảnh hưởng trực tiếp tới hiệu quả nổ mìn để tính toán và lựa chọn các thông số, chỉ tiêu cũng như các phương tiện nổ, chất nổ hợp lý, nhằm góp phần mang lại hiệu quả công tác nổ mìn nói riêng và hiệu quả sản xuất nói chung. □

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Đình Ấu, Nhữ Văn Bách. Phá vỡ đất đá bằng phương pháp khoan nổ mìn. NXB Giáo dục. Hà Nội, 1996.
2. Hồ Sĩ Giao, Trần Mạnh Xuân, Nguyễn Sỹ Hội. Khai thác mỏ vật liệu xây dựng. NXB Giáo dục. Hà Nội. 1996.
3. TAMROC-The Quarry.
4. ICI Explosives- Chương trình huấn luyện cho các mỏ than lộ thiên. Quảng Ninh, 1994
5. Nick Eliith (ICI explosives). Phương pháp nổ mìn an toàn, hiệu quả trên mỏ lộ thiên, mỏ đá và công trình xây dựng.

Người biên tập: Hồ Sỹ Giao

SUMMARY

The paper shows the nature factors, technical factors, technological factors and economical factors influencing directly on the blasting results. The study results may be to help the blasting projectors to choose and calculate the proper parameters for blasting on the open pit mining.