

高压物理学报

GAOYA WULI XUEBAO

1987 年 9 月创刊

2019 年主题专刊

· 炸药起爆及安全性 ·

目 次

高聚物黏结炸药的分子模拟进展	龙 瑶, 陈 军
铝粒径及成型压强对 Al/PTFE 冲击反应的影响	刘元斌, 任会兰, 李 尉, 宁建国
组合装药的撞击安全性与内爆威力试验研究	张广华, 屈可朋, 沈 飞, 王 辉
近场爆炸冲击波对屏蔽压装 TNT 的冲击引爆试验和仿真	
.....	陈兴旺, 王金相, 唐 奎, 陈日明, 周 莲, 郝春杰
金属隔层对同轴双元装药爆轰波形及驱动性能的影响	沈 飞, 王 辉, 罗一鸣
《高压物理学报》2019 年主题专刊名录	《高压物理学报》编辑部



官方网站: www.gywlxb.cn

官方邮箱: gaoya@caep.cn

联系电话: 0816-2490042



《高压物理学报》2019 年主题专刊名录

- ✧ 高压物性实验研究
- ✧ 高压物性的计算与模拟
- ✧ 高压合成新材料
- ✧ 高压地球科学
- ✧ 高压实验技术
- ✧ 高压下材料动态响应的计算与模拟
- ✧ 高压下材料动态响应实验研究
- ✧ 脆性材料的动态响应
- ✧ 界面不稳定性
- ✧ 高压科学应用——炸药起爆及安全性
- ✧ 高压科学应用——水下爆炸
- ✧ 高压科学应用——侵彻与防护
- ✧ 高压科学应用——气相爆炸

★ 获取地址：<http://www.gywlxb.cn/topics>

高聚物黏结炸药的分子模拟进展

龙瑶, 陈军

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 回顾了近年来在高聚物黏结炸药(PBX)原子和分子尺度数值模拟方面取得的进展, 主要研究领域包括以下6个方面: 炸药分子力场、热力学参数计算、耗散/输运性能、相图/相变动力学、动力学响应行为和热点形成机制。针对当前研究现状, 介绍了各领域的代表性工作和主要研究成果。目前对PBX炸药的结构和静力学性能已有较充分的认识, 但对炸药的动力学响应行为和细观起爆机制尚缺少系统的科学认识, 存在一系列挑战性问题, 如结构缺陷在爆轰反应后期的形态和表征, 以及初始缺陷对爆轰波波畸变的影响机制。需要将理论计算与实验相结合, 以解决爆轰物理领域中的难点问题。

关键词: PBX炸药; 分子动力学; 热力学参数

中图分类号: O521.2

文献标识码: A

含能材料在现代国防工业、武器装备和民用工程中有广泛的应用, 是先进武器战斗部、航天器推进剂和工程爆破装置的主要做功元件。目前, 高聚物黏结炸药(PBX)已逐步取代传统炸药成为武器系统主装药。与梯恩梯(TNT)等传统单质炸药相比, PBX炸药由基底炸药、降感剂、黏结剂、耦联剂、增塑剂、热安定剂组成, 各组分的形态和性能存在较大差异。性能迥异的组分结合在一起使得PBX炸药在外界刺激下表现出复杂的物理-力学耦合行为。

对PBX炸药物性、安全性和起爆特性的数值模拟研究涉及多个方面, 包括热力学参数、缺陷演化、热点起爆等。PBX炸药由于具有复杂的组分和构型, 其内部存在多种缺陷和微结构, 如孔洞、位错、界面、裂纹等。缺陷在外界刺激作用下的演化过程使得PBX炸药表现出复杂的力学响应行为和热点起爆机制, 因此缺陷演化是预测PBX炸药安全性和爆轰性能的重要依据。目前对PBX炸药的主要物性和起爆机制已开展了大量实验测量和数值模拟工作。如: 通过X射线衍射、荧光光谱分析和中子散射技术对炸药的振动模式、缺陷形态和反应机理开展了系统的实验研究, 积累了大量数据; 通过第一性原理计算、分子动力学模拟、蒙特卡罗方法、物质点法、有限元法对炸药从微观到宏观的物理参数和动力学行为开展了大规模数值模拟, 取得大量新成果。本文主要回顾近年来在微观数值模拟领域取得的成果, 分6个方面阐述相关研究进展: (1)对炸药分子力场的研究工作, 包括单质炸药力场、界面力场和化学反应力场; (2)对单晶、界面和复合炸药体系的热力学参数计算; (3)对PBX炸药耗散、输运性能的研究, 包括热传导率和热耗散率; (4)对炸药相图和相变动力学的研究; (5)对动力学响应行为和本构关系的研究; (6)对炸药起爆初期的热点形成机制和降感机理研究。下面依次介绍各方面的研究工作。

1 PBX炸药分子力场研究

在微观数值模拟研究中, 原子间相互作用势是材料模拟的关键。目前对金属材料、半导体材料、

* 收稿日期: 2019-04-03; 修回日期: 2019-04-25

基金项目: 科学挑战专题(TZ2016001)

作者简介: 龙瑶(1980—), 男, 博士, 研究员, 主要从事含能材料研究. E-mail: long_yao@iapcm.ac.cn

通信作者: 陈军(1969—), 男, 博士, 研究员, 主要从事计算物理研究. E-mail: jun_chen@iapcm.ac.cn

陶瓷材料已构建了较为成熟的嵌入原子势、 Tersoff 势等势模型。无机材料的势模型较容易构建, 因为只需考虑原子间的相互作用。含能材料一般是分子晶体结构, 需要考虑分子内部的相互作用和分子间的长程作用, 力场构建较复杂。现在对于分子间相互作用机理的科学认识存在不足, 只是简单地将该作用分为氢键、范德华力等。早期的炸药分子力场由于计算条件的限制, 假定分子为刚体, 只需要描述分子间的范德华力, 由 Sorescu 等^[1]完成。该力场在预测奥克托金 (HMX) 炸药的晶格常数和等温线方面取得了一定成果^[2]; 但由于其将分子设定为刚体, 因此该力场无法正确描述在高压条件下炸药的分子形变过程, 对高压区域的状态方程和物性预测不准确。

包含分子内和分子间相互作用的完整炸药力场是由 Smith 等^[3-5]开发的。该力场的总能可写为

$$E_{\text{total}} = E_{\text{pair}} + E_{\text{Coul}} + E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}} + E_{\text{improper}} \quad (1)$$

式中: E_{pair} 表示范德华相互作用能, E_{Coul} 表示库仑作用, E_{bond} 表示键能, E_{angle} 表示角度项, E_{dihedral} 表示二面角项, E_{improper} 表示奇异项。该力场能够正确预测晶体结构^[4-5]、状态方程^[6]、弹性常数^[6]和热导率^[7-9], 得到科研人员的广泛使用。Smith 力场采用价键相互作用描述分子内部的力场, 要求在分子动力学模拟过程中炸药分子不能发生断键和热分解行为, 因此对描述炸药高温区域的性能有些不足。其他关于炸药体系的价键力场包括 Gee 开发的三氨基三硝基苯 (TATB) 分子力场^[10], 以及宋华杰开发的黑索金 (RDX) 分子力场^[11], 均得到广泛的应用。

在炸药添加剂的研究方面, 孙淮等^[12-13]开发了适合聚合物添加剂的 COMPASS 力场, 能够描述 PBX 炸药里常用的黏结剂, 如石蜡、F2311、F2312、F2313、F2314、维通橡胶等。COMPASS 力场的能量表达式为

$$E_{\text{total}} = \sum_b [k_2(b-b_0)^2 + k_3(b-b_0)^3 + k_4(b-b_0)^4] + \sum_\theta [k_2(\theta-\theta_0)^2 + k_3(\theta-\theta_0)^3 + k_4(\theta-\theta_0)^4] + \sum_{b,b'} k_{b,b'}(b-b_0)(b'-b'_0) + \sum_{b,\theta} k_{b,\theta}(b-b_0)(\theta-\theta_0) + \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} \left[2 \left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^9 - 3 \left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

式中: 等号右边第 1 项表示键能, 第 2 项表示键角能, 第 3 项是化学键耦合能, 第 4 项是键长-键角耦合能, 第 5 项是库仑相互作用, 第 6 项是范德华相互作用。COMPASS 力场采用一种特殊的价键形式, 考虑了键-键耦合等更为复杂的相互作用类型, 能够比较准确地描述聚合物的链状分子结构。其他添加剂 (如石墨) 可以用传统的 Tersoff 力场^[14]描述。

陈军等^[15-19]基于大量由第一性原理计算的界面黏结能曲线, 建立了炸药/添加剂界面原子势库, 可以描述 (RDX、HMX、TATB)/(石墨、石蜡、氟聚物) 等三十余种界面。该参数库主要采用 Morse 势描述界面原子间的吸引力, 采用指数衰减函数描述排斥力

$$\varphi_{\text{Morse}} = D_0 \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right], \quad \varphi_{\text{Exp}} = Ae^{-r/\rho} \quad (3)$$

式中: r 表示原子间距离, D_0 、 r_0 、 α 为 Morse 力场参数, A 、 ρ 为指数力场参数。图 1 给出了计算得到的 TATB/氟聚物界面原子势曲线。采用二体相互作用描述炸药/添加剂界面是因为该界面间没有化学成键现象, 只有较弱的范德华相互作用, 因此可以采用对势模型。经过检验, 基于第一性原理黏结能曲线推导出的对势模型具有良好的移植性, 能够正确描述样本库之外的界面构型能量曲面。

为解决传统分子力场在描述炸药热分解行为的缺陷, Goddard 等^[20-21]基于键序理论和典型过渡态能垒曲线建立了化学反应力场 (REAXFF), 可以描述典型炸药的热分解反应过程及中间产物。键序 (BO) 的计算考虑了 σ 键、 π 键和 $\pi\pi$ 键, 计算公式如下

$$\text{BO}_{ij} = \exp \left[p_{\text{bo},1} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^\sigma} \right)^{p_{\text{bo},2}} \right] + \exp \left[p_{\text{bo},3} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^\pi} \right)^{p_{\text{bo},4}} \right] + \exp \left[p_{\text{bo},5} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\pi\pi}} \right)^{p_{\text{bo},6}} \right] \quad (4)$$

式中: $p_{\text{bo},1} \sim p_{\text{bo},6}$ 表示键序参数。基于键序建立的总能计算公式为

$$E_{\text{total}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{over}} + E_{\text{under}} + E_{\text{val}} + E_{\text{pen}} + E_{\text{tors}} + E_{\text{conj}} + E_{\text{vdW}} + E_{\text{Coul}} \quad (5)$$

REAXFF 力场模拟得到的热分解终态产物和实验一致。但使用该力场模拟得到的 HMX 炸药常温热力

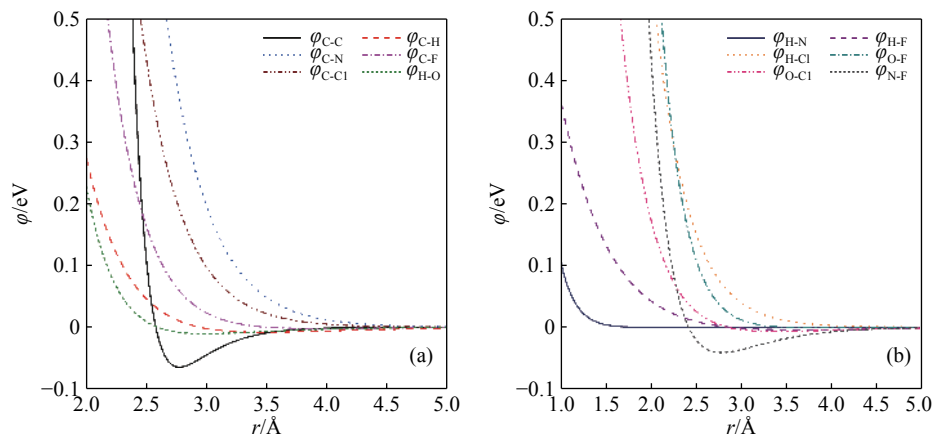


图 1 TATB/氟聚物界面原子势曲线

Fig. 1 The potential curves for the TATB/fluoropolymer interface

学参数与实验有一定误差,如计算获得的弹性常数偏小、热膨胀系数偏大等。Goddard 团队应用反应力场研究了典型炸药的热分解过程^[22]、热点形成过程^[23-24]、冲击起爆过程^[25]等。

2 热力学参数计算

高能炸药的热力学参数(如弹性常数、热容、热膨胀系数等)研究对于炸药的宏观应用具有重要的意义,如状态方程构建、添加剂配方设计、弹药安全性评估等。利用第一性原理方法和分子动力学方法计算炸药的热力学参数是目前的主要研究手段。主要的算法介绍如下。

- (1) DFT+vdW 方法: 计算炸药晶体结构、弹性常数、生成焓。
- (2) 简谐声子理论: 计算自由能、热膨胀系数、热容、相变曲线。
- (3) 非谐声子理论: 计算热导率。
- (4) 分子动力学模拟: 计算弹性常数、热膨胀系数、状态方程。
- (5) 非平衡分子动力学: 计算热导率、黏性系数。
- (6) 涨落理论: 计算比热、弹性系数。
- (7) 线性响应理论: 计算热导率、热耗散率、黏性系数、扩散系数。

PBX 炸药的物性研究包括 3 部分: 单晶热力学参数、界面热力学参数和复合炸药热力学参数。在算法方面,弹性常数通过对能量-应变曲线求二阶导数获得。热膨胀系数通过对晶格长度-温度的关系求一阶导数获得。比热通过 NPT 系综下求温度涨落获得,计算公式为

$$C_V = \frac{kT^2}{\Delta T^2} \quad (6)$$

式中: C_V 为定容比热容, k 为玻尔兹曼常数, T 为温度, ΔT 为温度的涨落。雨贡纽关系通过求解雨贡纽方程获得

$$E - E_0 = \frac{1}{2}(P + P_0)(V_0 - V) \quad (7)$$

等熵线通过求解等熵方程获得

$$\frac{dP}{dT} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P \left[V - \left(\frac{\partial H}{\partial P} \right)_T \right] \quad (8)$$

式中: H 表示焓, E 表示能量, P 表示压力, V 表示体积。

PBX 炸药由于结构的复杂性,通过分子动力学计算得到的能量-应变曲线不够光滑,需要先将它拟合成二次曲线才能获得二阶导数,从而计算弹性常数。但用这种方法计算高压下 PBX 炸药弹性常数

会带来较大误差,无法正确反映压力对弹性常数的影响。对PBX炸药高压弹性性能的研究可通过拟合等温线获得体模量随压力变化的关系。

另外,通过涨落理论计算炸药的等容比热容也存在一定误差,一般只能获得零压下的热容。采用(6)式计算得到的炸药高压热容因误差的关系看不出与零压下的差别。实际上由于压缩导致体积缩小会使声子的运动熵降低,从而降低热容。要获得热容与压力的关系,需要计算炸药在不同压缩率下的声子频谱,通过声子自由能公式推导热容。

目前的线性响应方法和声子理论在研究炸药高压热力学参数时都遇到一定困难。采用线性响应方法计算热力学参数需要对关联函数进行时间积分,由于分子动力学计算得到的关联函数存在较大涨落误差,计算结果难以反映物性随压力的变化趋势。采用声子理论能得到较准确的高压热力学参数,但目前计算声子谱的力常数理论用于高压条件下容易产生虚频,需要改进算法以降低虚频的数量。

在单晶热力学参数研究方面,肖鹤鸣等^[26-27]、肖继军等^[28-30]计算了大量新型炸药的分子结构、键能和生成焓等参数。Zerilli等^[31]采用密度泛函理论计算了HMX炸药的体模量、热膨胀系数、比热、格林爱森参数随温度和压力的变化规律。Valenzano等^[32]采用B3LYP密度泛函近似计算了TATB和太安(PETN)的弹性常数。Sewell等^[6]采用分子动力学方法计算了HMX的晶格常数、弹性常数和等温线。Smith等^[5]计算了TATB炸药在高压下的弹性常数。姬广富等^[33]采用COMPASS力场和分子动力学方法计算了HMX炸药 α 、 β 、 δ 相的晶格常数和弹性常数随温度/压力的变化趋势。目前对炸药在常温、常压下的热力学参数已有较充分的研究,取得了与实验一致的计算结果;但是对高压下热力学参数的计算较为困难。现阶段能够计算的高压参数只有部分弹性常数,对高压区域的热容、热膨胀系数等参数的研究工作较少。

在炸药/添加剂界面力学性能研究方面,目前已报导了关于(HMX、TATB)/(石墨、石蜡、氟聚物)等界面拉伸力学性能的系统性研究工作^[15-17,34],获得了界面拉伸势垒和拉伸应力。研究方法是通过对分子动力学模拟了界面的拉伸断裂过程,获得系统总能与拉伸距离的关系。拉伸能量曲线的最高点与最低点之差即为拉伸势垒,最大斜率即为拉伸应力。图2给出了HMX/F2312界面在拉伸断裂过程中的界面构型变化。肖鹤鸣等^[35-36]计算了各种聚合物分子在基底炸药上的吸附构型,获得了界面黏结能。通过上述研究发现,界面力学性能与添加剂成分、界面取向和缺陷分布都有关系。根据目前的研究结果,界面处的结构缺陷一般会降低拉伸应力,因为在拉伸过程中,缺陷处成为应力集中区域,容易首先发生断裂,然后裂纹再扩展到其他区域。

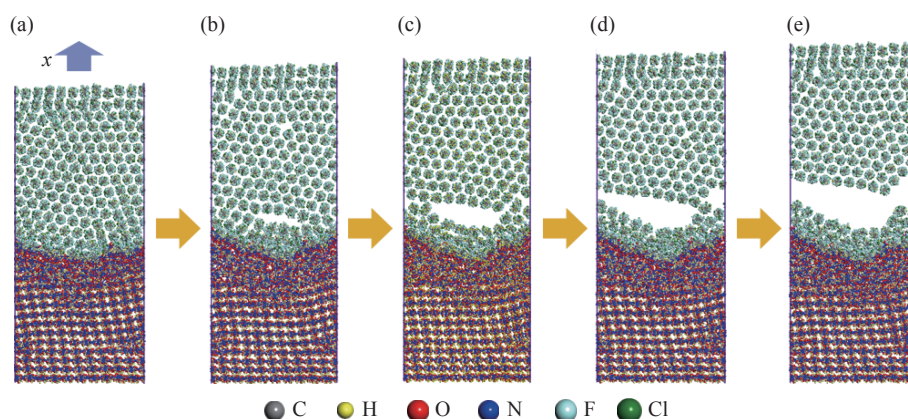


图2 HMX/F2312界面的拉伸断裂过程

Fig. 2 The tensile process for the HMX/F2312 interface

在PBX炸药物性研究方面,肖鹤鸣等^[35-37]应用COMPASS力场计算了一系列PBX炸药的构型和弹性力学性能,提出了添加剂对PBX炸药物学性能的影响机制。Jaidann等^[38-39]采用分子动力学方法计算了以RDX和FOX-7为基的PBX炸药的界面吸附能和弹性系数。上述工作采用的模型是在基底

炸药上吸附一个添加剂分子, 然后计算整个体系的弹性系数。用这种模型可以定性比较不同添加剂对炸药力学性能的影响, 从而选出最适合做黏接剂、增塑剂的添加剂类型。

更复杂的 PBX 炸药模型是添加剂包覆在多个基底炸药颗粒外形成的混合模型^[15-19]。基于多晶包覆模型计算了 RDX、HMX、TATB 基复合炸药的热力学参数^[15-19], 包括二元、三元和四元体系。图 3(a)~图 3(c) 分别给出了 RDX 多晶、石蜡包覆 RDX、F2311 包覆 RDX 3 种 PBX 炸药的初始结构。这类多晶包覆模型和实际的 PBX 炸药微观构型比较接近, 计算结果具有合理性。所计算的热力学参数包括体模量、弹性常数、热容、热膨胀系数、格林爱森参数、等温线、等熵线和雨贡纽线。通过大量的数值计算和理论分析发现, PBX 炸药物性预测的难点在于炸药的总体物性不仅与组分有关, 还与各组分之间的界面有关。例如加入的添加剂的热膨胀系数小于基底炸药时, 在升温过程中炸药颗粒膨胀速度大于包覆层, 在包覆层上会产生热应力, 抑制颗粒的膨胀。因此, 界面热应力显著地影响了 PBX 炸药的总体热膨胀性能。除了界面热应力之外, 界面声阻抗匹配和界面折射效应对 PBX 炸药的冲击、耗散性能也有显著的影响。

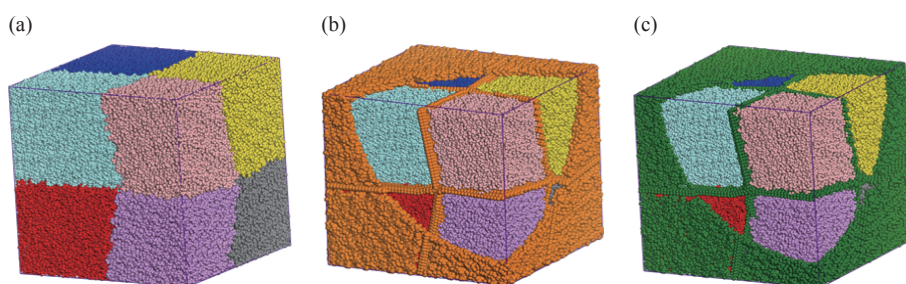


图 3 (a) RDX 多晶, (b) 石蜡包覆 RDX, (c) F2311 包覆 RDX

Fig. 3 (a) RDX polycrystal, (b) paraffin coated RDX, (c) F2311 coated RDX

3 耗散和输运性能研究

PBX 炸药的耗散与输运性能包括热传导、热耗散、黏性、扩散等性能, 是分析炸药在外界刺激作用下热耗散、热累积过程的关键参数, 对评估炸药的安全性和起爆机制有重要意义。目前对炸药耗散与输运性能的理论计算工作难度较大, 并且方法也有限。传统计算方法主要有 3 种: Green-Kubo 方法^[40]、非简谐声子理论^[41-43] 和非平衡分子动力学^[44]。Green-Kubo 方法基于线性响应理论, 通过对关联函数积分获得热导率, 可计算晶体材料的各向异性热导张量。非简谐声子理论基于量子多体理论, 需要第一性原理方法计算三阶力常数, 通过声子输运模型计算热导率, 同样适用于晶体结构。对炸药来说, 由于单晶原子数较多, 获得三阶力常数需要完成数万个构型的电荷自洽计算, 计算量很大。非平衡分子动力学按一定频率交换原子动量获得热流, 通过分子动力学模拟获得温度梯度, 两者相除即为热导, 计算量较小。并且非平衡分子动力学方法可获得单晶和界面系统的热导率。

Smith 等^[7,45] 采用非平衡分子动力学方法计算了 HMX 炸药的热导率。Sewell 等^[8-9,46] 采用非平衡分子动力学方法计算了 TATB 炸药的热导率。非平衡分子动力学方法可计算不同晶格取向的热导率, 但仅限于热导张量的对角项。非对角项只能通过声子输运模型或 Green-Kubo 方法得到。

陈军等针对 PBX 炸药的热导性能开展了较为系统的研究工作, 发展了多种方法计算单晶、界面和 PBX 炸药的热导率。针对含能材料分子晶体的结构特征, 发展了利用二阶力常数计算声子寿命的方法, 其思路是声子热应力改变了材料的声速, 声速影响德拜频率, 从而反过来改变声子频率, 由此可推导出声子-声子相互作用模型, 获得声子寿命。基于该方法获得的声子寿命公式为

$$\tau = \frac{1}{\omega \left| \lambda + \mu E \left(\frac{h\omega_0}{2\pi kT} \right) \right|}, \quad E(x) = \frac{9}{x^4} \int_0^x \frac{y^3}{e^y - 1} dy \quad (9)$$

式中: τ 为声子寿命, ω 为声子频率, k 为玻尔兹曼常数, h 为普朗克常数, T 为温度, λ 和 μ 为材料的特征物理参数。采用该方法计算了 HMX、TATB 炸药的各向异性热导张量^[47-50]。并且声子输运的方法可解析出每种振动模式对热导的贡献, 从而获得对热导起关键作用的分子振动模式。对于 TATB 炸药, 总共发现二十余种关键分子振动模式, 图 4 给出了其中两种模式的振动图谱。

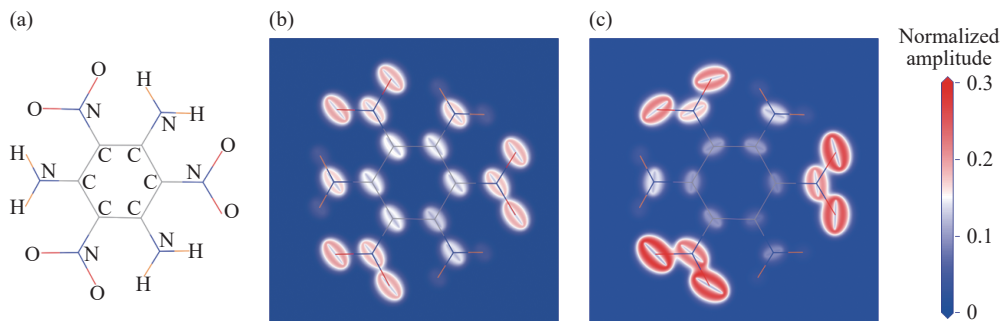


图 4 对 TATB 热导起关键作用的部分分子振动模式: (a) TATB 分子结构, (b) 振动模式 1, (c) 振动模式 2

Fig. 4 Some key vibrational modes for thermal conduction in TATB: (a) TATB molecular structure, (b) the first vibrational mode, (c) the second vibrational mode

针对炸药/添加剂界面体系, 基于线性响应理论和力常数理论发展了两种计算界面声子折射率的方法^[50-54], 并基于声子折射率推导了界面热导率的计算公式

$$\lambda = \frac{1}{kT^2V} \sum_{\mathbf{c}, n>0} g_i \hbar^2 \omega_i^2 P_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} \frac{e^{\hbar\omega_i/kT}}{(e^{\hbar\omega_i/kT} - 1)^2} \quad (10)$$

式中: λ 表示界面热导率, V 表示晶胞体积, $\mathbf{n}$ 表示界面法向, ω_i 表示声子频率, g_i 表示声子简并度, $\mathbf{c}_i$ 表示声子速度, P_i 表示声子的界面折射率。界面热导率研究的关键是界面声子折射率的计算, 这一步通过力常数理论或线性响应理论均可完成。后续的声子输运公式是通用的。应用上述方法研究了 (HMX、TATB)/(石墨、石蜡、氟聚物) 界面, 计算了界面热导率与温度的关系, 如图 5 所示。基于均匀热流模型, 在单晶热导率和界面热导率的研究基础上推导了 PBX 炸药的总热导, 发现 PBX 炸药热导与颗粒粒度有关。总热导率 (κ_{PBX}) 的计算公式为

$$\kappa_{\text{PBX}} = \frac{\kappa_1 \kappa_C d}{\kappa_1 d + 2\kappa_C} \quad (11)$$

式中: κ_C 为基底炸药的热导率, κ_1 为炸药/添加剂界面热导率, d 为颗粒直径。

在热耗散率研究方面, Smith 等^[52] 采用线性响应方法计算了 HMX 炸药单晶黏性系数与温度的关系。单晶黏性系数 (η) 的计算公式为

$$\eta = \frac{V}{10kT} \int_0^\infty \sum_{i,j} q_{ij} \langle \sigma_{ij}(t) \sigma_{ij}(0) \rangle dt \quad (12)$$

式中: σ_{ij} 为应力分量。根据计算结果, 获得了含能材料黏性系数与温度的关系

$$\eta = \eta_0 e^{-\Delta E/kT} \quad (13)$$

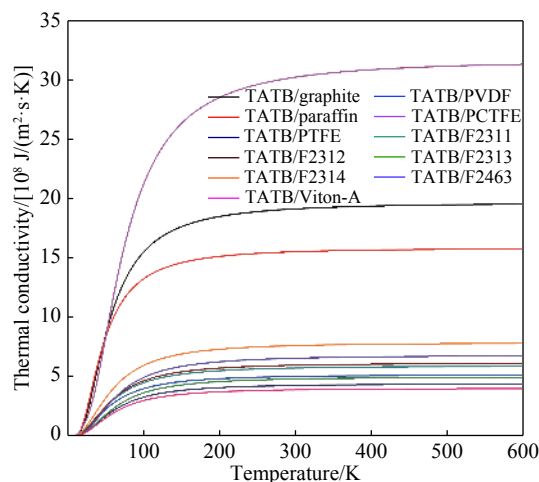


图 5 TATB/添加剂界面热导率的计算结果

Fig. 5 The interfacial thermal conductivity vs. temperature for TATB/additive interfaces

界面热耗散效应的研究主要基于线性响应理论,发现不同加载强度下 PBX 炸药具有不同的热耗散机制:低强度加载下,界面热耗散主要通过弹性波散射机制完成;中等强度加载下,界面热耗散通过界面摩擦造成;强冲击作用下,热耗散通过界面塑性功完成。基于上述机制推导了界面黏性系数、界面摩擦系数和弹性波散射率的计算公式^[53],并应用于 HMX/(TATB、石墨、石蜡、氟聚物)界面体系。界面摩擦系数 (η) 的计算公式如下

$$\eta = \frac{kT}{S \int_0^\infty \langle \delta v(0) \delta v(\tau) \rangle d\tau} \quad (14)$$

式中: S 表示界面面积, δv 表示界面两侧的相对质心速度。通过分析弹性波耗散率与频率的关系发现,高频条件下热耗散系数与分子振动频率有关,低频条件下热耗散系数与频率的平方成正比。

4 相图和相变动力学研究

含能材料是分子晶体结构,在加压、加温条件下分子会发生形变从而产生大量新相,如 HMX 具有 4 种常见晶型,CL-20 具有 6 种常见晶型,TATB、RDX 在加压至 5~7 GPa 时产生高压相结构。相变发生后,颗粒体积的变化会在 PBX 炸药内部造成孔洞、裂纹等缺陷;同时冲击加载条件下的高压相变会在冲击波波前形成相变波。由于炸药不同晶相之间的感度差异较大,并且相变可能导致相变潜热、裂纹和相变波,因此有关炸药相结构和相图的研究对评估炸药的安全性和武器系统的可靠性具有重要意义。

在相结构研究方面,Kholod 等^[54]采用密度泛函理论计算了 CL-20 各晶相的拉曼谱和红外谱。肖鹤鸣等^[55]计算了 CL-20 的 4 种晶相的声子能带和声子态密度分布。Brand 等^[56]采用第一性原理方法计算了 HMX α 、 β 、 δ 相的特征振动频谱。Munday 等^[57]采用分子动力学方法研究了 RDX 的高压相结构。魏冬青等^[58]采用分子动力学模拟得到了 HMX 的高压相变点。目前实验上对 RDX、HMX 等典型炸药高压相的研究主要基于拉曼谱,通过拉曼谱的峰值变化确定新相是否产生。对 RDX 在单轴加载和动加载条件下找到了很多新相,但无法确定新相的分子结构。需要大量理论计算工作的配合,来预测实验获得的相结构。

在相变动力学研究方面,Smilowitz 等^[59-63]建立了 HMX 炸药相变速率唯象模型,获得了 β 相到 δ 相的相变曲线。Levitas 等^[61]基于熔化成核理论提出了描述炸药固-固相变过程的物理模型,根据该模型获得的相界面扩散速度 (v) 为

$$v = v_0(e^{-\Delta E_1/RT} - e^{-\Delta E_2/RT}) \quad (15)$$

式中: T 为相变点温度, ΔE_1 为正向相变活化能, ΔE_2 为反向相变活化能。理论预测的相变速率与实验一致。Brill 等^[62]提出了 CL-20 固-固相变的速率模型,并计算了相变活化能。Sewell 等^[63]采用分子动力学方法计算了 TATB 炸药的固液相变曲线,同时计算了液相的黏性系数和热导率。对炸药相变动力学的研究基本是基于阿雷尼乌斯公式,通过拟合实验数据获得相变活化能。目前通过过渡态理论直接计算相变活化能的工作较少。由于相变过程和化学反应过程的相似性,实际可以将化学反应研究中的过渡态方法应用于相变研究中。

在冲击相图和相变波研究方面,目前针对含能材料体系发展了较为精确的电子-声子自由能模型^[64-68],应用该模型计算了 HMX 炸药在高温、高压区域的准静态相变和冲击相变曲线。炸药电子-声子自由能计算公式如下

$$F(V, T) = E_c(V) - kT \ln Z_m(T) - kT \ln Z_c \left[T \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}} \right] - kT \ln Z_\chi \left[T \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{2}{3}} \right] - kT \ln Z_e(T, \mu) + N_e \mu \quad (16)$$

式中: F 为自由能, V 为体积, T 为温度, E_c 为冷能, Z_m 为分子振动配分函数, Z_c 为晶格振动配分函数, Z_χ 为高阶声子配分函数, Z_e 为电子配分函数, μ 为费米能级, N_e 为电子数。准静态相变点通过对比两相的吉布斯自由能获得,冲击相变点通过对比两相在相同飞片撞击速度下的熵获得。图 6 给出了基于德

拜声子理论计算得到的 HMX 炸药相图。实际计算表明炸药的准静态相变曲线和冲击相变曲线不重合,这是分析相变对炸药冲击起爆的影响机制时需要注意的。

另外,陈军等^[65]应用爆轰物理领域中 CJ 理论的物理思想研究相变波。由于不同固体相之间的界面天然地不连续,因此由相变传递造成的相变波是间断波,符合定常流体力学方程的间断解,可用雨贡纽方程表征。以 β 相作为起始相,通过以下公式求解三的雨贡纽线

$$\begin{cases} E_{\alpha} - E_0 = \frac{1}{2}(P_{\alpha} + P_0)(V_0 - V_{\alpha}) \\ E_{\beta} - E_0 = \frac{1}{2}(P_{\beta} + P_0)(V_0 - V_{\beta}) \\ E_{\delta} - E_0 = \frac{1}{2}(P_{\delta} + P_0)(V_0 - V_{\delta}) \end{cases} \quad (17)$$

式中: E_0 、 P_0 、 V_0 表示初始状态下 β -HMX 的能量、压力和体积。根据 CJ 理论,从初始状态 (O 点) 出发的瑞利线与 α 、 δ 相雨贡纽线的切点代表相变波的稳定传播状态。图 7 给出了 HMX 三的雨贡纽线和 CJ 点 (A 、 B 、 C 、 D 点)。根据理论分析,原点 (O) 左边的 CJ 点 (A 、 B) 表示冲击作用下的 $\beta \rightarrow \alpha$ 和 $\beta \rightarrow \delta$ 相变波,对应的相变波波速 (D_p) 分别为 3796 m/s 和 4625 m/s。原点右边的 CJ 点 (C 、 D) 表示自发相变的 $\beta \rightarrow \alpha$ 和 $\beta \rightarrow \delta$ 相变波,对应的相变波波速分别为 1800 m/s 和 1531 m/s。相变波波速通过瑞利线的斜率计算得到。计算结果表明,冲击作用下形成的相变波波速略高于炸药声速,非冲击条件下形成的相变波波速低于炸药声速。

5 动力学响应行为和本构关系研究

炸药的动力学响应行为指外界刺激作用下炸药表现出的应力弛豫现象。对 PBX 炸药来说,由于压制成型过程中产生了大量内应力,应力弛豫现象可能导致局部内应力的释放,通过热-功转换形成热点,产生安全性问题。同时,应力弛豫关系可用来构造炸药的黏弹性本构方程,为宏观有限元模拟提供模型和参数。

在炸药的动力学响应行为研究方面,目前根据声子数重分布机制和分子旋转机制发展了两种物理模型描述典型炸药的动力学响应行为^[66]。两种机制分别介绍如下:在正应力作用下,炸药晶体的声子谱发生变化,故声子数需重分布以适应新的态密度,声子重分布所需时间造成了声子热应力响应的滞后,即表现为应力-应变响应效应;在剪切作用下,分子需发生旋转,由于转动惯量和分子间摩擦力的存在,该旋转相对于应变有一定滞后,使剪切应力表现出应力-应变响应行为。因此上述两种机制代表了正应变和剪切应变的动力学响应关系。基于上述物理机制,正应力的应力弛豫关系为

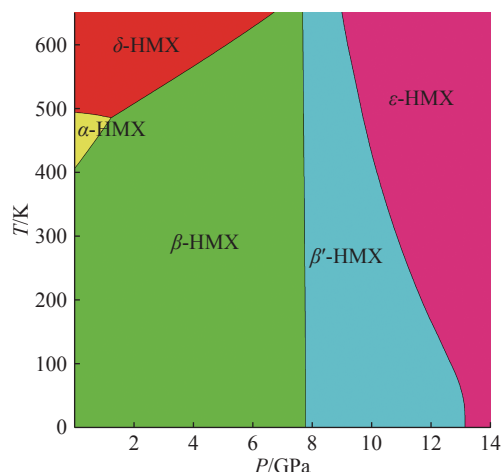


图 6 通过德拜声子理论计算得到的 HMX 的三相相图 (β' 表示 β 相通过声子软化形成的新相)

Fig. 6 The phase diagram of HMX, obtained by Debye theory (The β' phase is the phonon soften state of β phase.)

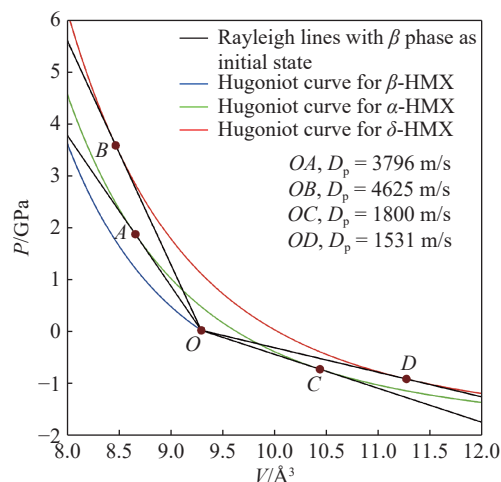


图 7 HMX 三的雨贡纽线和瑞利线

Fig. 7 The Hugoniot curves and Rayleigh curve for the three phases of HMX

$$P(t) = \lambda_1 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\tau_1} \varepsilon(\tau) d\tau + \lambda_2 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\tau_2} \varepsilon(\tau) d\tau + \lambda_3 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\tau_3} \varepsilon(\tau) d\tau + \sum_{n=0}^{\infty} \mu_n \frac{d^n \varepsilon}{dt^n} \quad (18)$$

式中: P 为正应力, t 为时间, ε 为正应变, $\lambda_i (i=1, 2, 3)$ 为应力弛豫系数, τ_i 为应力弛豫时间, μ_n 为高阶黏性系数。剪切应力的动力学响应关系为

$$\sigma(t) = \varepsilon\gamma + C_1 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\eta_1} \varepsilon(\tau) d\tau + C_2 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\eta_2} \varepsilon(\tau) d\tau + C_3 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\eta_3} \varepsilon(\tau) d\tau \quad (19)$$

式中: σ 表示剪切应力, γ 表示剪切形变弹性系数, C_i 表示应力弛豫系数, η_i 表示剪切应力的弛豫时间。计算得到的 HMX 炸药应力弛豫时间随温度的升高而降低。

在本构关系研究方面, Jones、Wilkins 和 Lee 建立的 JWL 状态方程^[67] 被广泛应用于描述固体炸药和爆轰产物。该方程的等熵形式为

$$\begin{cases} P = Ae^{-R_1 V/V_0} + Be^{-R_2 V/V_0} + C \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\omega-1} \\ E = \frac{A}{R_1} e^{-R_1 V/V_0} + \frac{B}{R_2} e^{-R_2 V/V_0} + \frac{C}{\omega} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\omega} \end{cases} \quad (20)$$

式中: A 、 B 、 C 、 R_1 、 R_2 和 ω 为状态方程参数, P 为等熵条件下压力, E 为等熵条件下能量, V 为体积。朱建士等建立的朱-王-唐本构模型^[68-72] 被用于研究炸药的冲击损伤过程。该模型的本构方程为

$$\sigma = C_0 \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + C_1 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\theta_1} \varepsilon(\tau) d\tau + C_2 \int_0^t e^{-(t-\tau)/\theta_2} \varepsilon(\tau) d\tau \quad (21)$$

式中: σ 为应力, ε 为应变, C_0 、 C_1 、 C_2 、 α 、 β 为应力弛豫系数, θ_1 、 θ_2 为应力弛豫时间。赵艳红等^[70-71] 研究了炸药爆轰产物的状态方程, 提出了产物状态方程的混合规则, 能够描述多种产物组成的混合体系。杨明理等^[72] 研究了爆轰产物的相分离机制, 计算了多相产物体系的热力学参数和输运系数, 为状态方程建模提供了参数。目前对未反应炸药和爆轰产物的状态方程研究较多, 但对爆轰的中间产物、碳聚物的状态方程研究较少。实际上, 现在对爆轰中间产物的种类、分子结构和碳聚物的相图缺少系统的科学认识, 需要加强这方面的研究工作。

6 热点形成机制和降感机理研究

炸药的缺陷演化和热点形成过程是理解冲击起爆微观机制的重要途径, 受到国内外科研人员的广泛关注。PBX 炸药内部的典型缺陷包括孔洞、位错、剪切带、裂纹等。外界刺激作用下不同缺陷产生耦合演化行为, 表现出复杂的力学响应行为。如: 强冲击作用下, 炸药内部孔洞塌缩, 并在塌缩点周围产生微裂纹; 孔洞塌缩过程和裂纹扩展过程相互耦合, 形成复合缺陷。近年来对 PBX 炸药缺陷演化和热点形成过程的研究已成为含能材料领域的前沿方向。

Menikoff^[73-74] 应用欧拉-拉格朗日方法模拟了冲击条件下 PBX 炸药的孔洞塌缩和热点形成过程, 提出了热点质量这一概念。Austin 等^[75-76] 模拟了 HMX 炸药的孔洞塌缩过程, 发现孔洞附近产生了微裂纹。Springer 等^[77] 模拟了强冲击作用下的孔洞塌缩过程, 获得了由孔洞塌缩造成的热点形貌和温度场分布。Goddard 等^[23-24] 模拟了复合炸药的冲击起爆过程, 发现界面处容易形成热点。周婷婷等^[78] 采用分子动力学方法研究了典型炸药的孔洞塌缩过程, 获得了热点温度随时间演化的规律。

陈军等^[79-81] 研究了 PBX 炸药的缺陷演化和热点形成机制, 提出冲击条件下 PBX 炸药的结构缺陷附近容易产生塑性功, 使得局部快速升温形成热点。主要的塑性功机制包括 3 种: 界面摩擦、包覆层扭曲和孔洞塌缩。其中孔洞塌缩导致的热点升温速率最快。炸药塑性功 (ΔE) 的计算思路为总能减去冲击绝热压缩的能量, 剩下部分即为塑性功

$$\Delta E(\mathbf{x}) = U(\mathbf{x}) - E(u(\mathbf{x})) \quad (22)$$

式中: $\mathbf{x}$ 表示位置; U 表示总能分布函数; u 表示流体速度分布; E 为冲击绝热压缩的能量, 通过雨贡纽关

系获得。基于塑性功研究了热点的形成和演化过程,发现热点温度场的径向分布符合 Bessel 函数,随时间的演化符合指数关系。温度场方程可写为

$$T(r,t) = T_0 + T e^{-t/\eta} J_0 \left(r \sqrt{\frac{\rho C}{\kappa \eta}} \right) \quad (23)$$

式中: η 为热点弛豫时间, ρ 为材料密度, C 为热点热容, κ 为热点热导, J_0 为零阶 Bessel 函数。通过 (23) 式获得的热点半径 (R) 与热点弛豫时间 (η) 的关系为

$$R = x_0 \sqrt{\frac{\kappa \eta}{\rho C_w}} \quad (24)$$

式中: x_0 为 Bessel 函数的零点。因此热点弛豫时间与热点半径的平方成正比。

另外,通过研究典型炸药缺陷演化的细观机制发现孔洞在强冲击作用下会演变为微裂纹^[79-81],如图8所示。微裂纹的分布比较有规律,呈现“X”形,与孔洞的初始形状和冲击速度无关。通过分析孔洞塌缩初期的稀疏波提出了微裂纹的产生机制:孔洞塌缩过程中水平方向产生稀疏波,垂直方向产生冲击波,稀疏波和冲击波交叠的区域产生强剪切应力,导致该方向出现微裂纹。孔洞塌缩和裂纹扩展造成的塑性功是热点产生的重要机制。

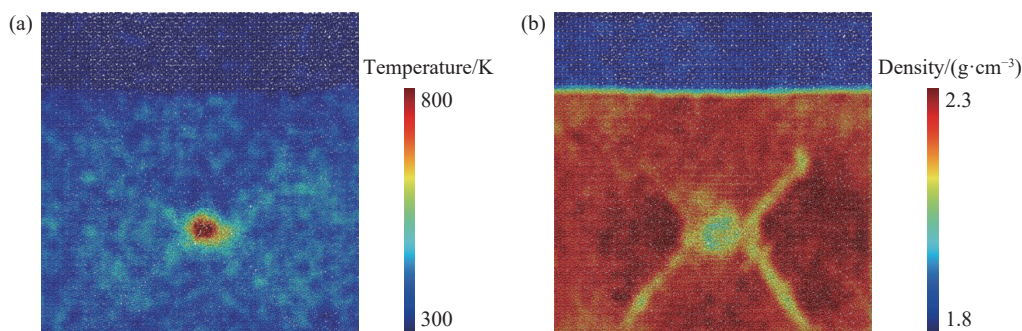


图8 孔洞塌缩后的场分布: (a) 温度场, (b) 密度场

Fig. 8 The temperature field (a) and density field (b) after pore collapsing

在炸药降感机制研究方面,张朝阳^[82-83]研究了添加剂对炸药的降感机制,提出石墨、石蜡等添加剂对 HMX 炸药颗粒的表面有润滑作用,从而降低了机械感度。陈军等^[84]分析了冲击后 PBX 炸药内部的能量场分布,基于能量禁锢机制提出了层状、链状添加剂对基底炸药的降感机制。基本思路是层状添加剂在 PBX 炸药中由于界面张力的原因具有较高的声速,炸药受到冲击后,添加剂层中的冲击波能量扩散速度较快,结合炸药/添加剂界面的折射效应分流了炸药颗粒中的冲击能量,因此降低了感度。基于上述机制,添加剂的降感能力可通过界面能禁锢率表征。该禁锢率的物理意义是冲击条件下被添加剂包覆层分流的冲击波能量。界面能量禁锢率 (λ) 的计算公式为

$$\lambda = \int_0^{\min \left\{ \frac{\pi}{2}, \arcsin \sqrt{\frac{Y d \rho_2}{\sigma \rho_1}} \right\}} \frac{\sin \theta \sin 2\theta \sin \left[\arctan \frac{\sigma \sin \theta}{\sqrt{C_{33} d} \sqrt{\frac{Y d \rho_2}{\rho_1} - \sigma \sin^2 \theta}} \right]}{\sin \left[\theta + \arctan \frac{\sigma \sin \theta}{\sqrt{C_{33} d} \sqrt{\frac{Y d \rho_2}{\rho_1} - \sigma \sin^2 \theta}} \right]} d\theta \quad (25)$$

式中: θ 为入射角, ρ_1 、 ρ_2 为界面两侧材料密度, Y 为基底炸药杨氏模量, C_{33} 为添加剂剪切模量, σ 为界面

张力。图9给出了对一系列 HMX/(石墨、石蜡、氟聚物) 界面的计算结果。

7 结 论

目前,对 PBX 炸药的结构和热力学性能已有较充分的研究,系统计算了复合炸药的弹性常数、状态方程和雨贡纽关系;但对 PBX 炸药的耗散、输运性能研究较少,对炸药热导率、热耗散率的大部分理论计算工作还局限于单晶或熔融态。需要对界面和复合炸药系统的耗散和输运性能开展进一步的研究工作。

在相图和相变动力学研究方面:对炸药的高压相变研究较多,因为高压相变通过焓判定,较容易计算;对高温区域的相结构变化由于涉及精确的吉布斯自由能计算,理论工作较少。需要针对炸药分子晶体体系开发高置信度的自由能算法。在相变动力学研究方面:实验工作比较多,通过差式热计量仪能够测量相变速率,但理论建模工作较少。可将化学反应理论中的过渡态方法用于研究炸药的相变过程,通过理论计算获得相变速率模型,并与实验进行比较。

在损伤演化和热点形成机制方面,目前已有大量数值模拟工作研究冲击作用下缺陷的演化过程和热点的产生;但对结构缺陷在炸药爆轰反应后期的形态和表征研究较少。在炸药化学反应阶段,初始的缺陷可能会转换形态,变成爆轰波的局部畸变区,对 PBX 炸药的爆轰延迟和非理想爆轰现象构成影响。结构缺陷对炸药爆轰波形态的影响机制是爆轰物理学研究中的难点问题,需要建立新的理论框架和物理模型。

总的来说,对 PBX 炸药的结构和静力学行为已开展大量工作,但对炸药的耗散/输运性能、相变动力学、动力学响应行为、损伤演化机制等方面研究尚不充分,需要在理论算法和物理模型上进一步开展工作。

参考文献:

- [1] SORESCU D C, RICE B M, THOMPSON D L. A transferable intermolecular potential for nitramine crystals [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 1998, 102(43): 8386–8392.
- [2] SORESCU D C, RICE B M, THOMPSON D L. Isothermal-isobaric molecular dynamics simulations of 1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetraazacyclooctane (HMX) crystals [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 1998, 102(35): 6692–6695.
- [3] SMITH G D, BHARADWAJ R K. Quantum chemistry based force field for simulations of HMX [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 1999, 103(4): 3570–3575.
- [4] BEDROV D, AYYAGARI C, SMITH G, et al. Molecular dynamics simulations of HMX crystal polymorphs using a flexible molecule force field [J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2001, 8: 77–85.
- [5] BEDROV D, BORODIN O, SMITH G, et al. A molecular dynamics simulation study of crystalline 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2009, 131: 224703.
- [6] SEWELL T D, MENIKOFF R, BEDROW D, et al. A molecular dynamics simulation study of elastic properties of HMX [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2003, 119(14): 7417–7426.
- [7] BEDROV D, SMITH D. Thermal conductivity of molecular fluids from molecular dynamics simulations: application of a new imposed-flux method [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, 113(18): 8080–8084.
- [8] KROONBLAWD M P, SEWELL T D. Theoretical determination of anisotropic thermal conductivity for crystalline 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB) [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2013, 139: 074503.

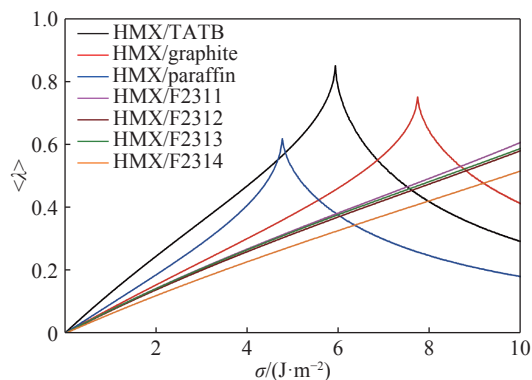


图9 HMX/添加剂界面能量禁钢率和界面张力的关系。

Fig. 9 The energy constraint rate vs. interfacial tension curves for HMX/additive interfaces

- [9] KROONBLAWD M P, SEWELL T D. Theoretical determination of anisotropic thermal conductivity for initially defect-free and defective TATB single crystals [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2014, 141: 184501.
- [10] GEE R, ROSZAK S, BALASUBRAMANIAN L, et al. *Ab initio* based force field and molecular dynamics simulations of crystalline TATB [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2004, 120(15): 7059–7066.
- [11] SONG H J, ZHANG Y G, LI H, et al. All-atom, non-empirical, and tailor-made force field for α -RDX from first principles [J]. *RSC Advances*, 2014, 4(76): 40518–40533.
- [12] SUN H. COMPASS: An *ab initio* force-field optimized for condensed-phase applications-overview with details on alkane and benzene compounds [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 1998, 102: 7338–7364.
- [13] BUNTE S, SUN H. Molecular modeling of energetic materials: the parameterization and validation of nitrate esters in the COMPASS force field [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2000, 104(11): 2477–2489.
- [14] TERSOFF J. Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon [J]. *Physical Review Letters*, 1988, 61(25): 2879–2882.
- [15] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. Force-field derivation and atomistic simulation of HMX/graphite interface and polycrystal systems [J]. *Communications in Theoretical Physics*, 2012, 57(1): 102–114.
- [16] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. The force-field derivation and atomistic simulation of HMX-fluoropolymer mixture explosives [J]. *Colloid & Polymer Science*, 2012, 290(18): 1855–1866.
- [17] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. Force-field derivation and atomistic simulation of HMX-TATB-graphite mixture explosives [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, 20(6): 065010.
- [18] LONG Y, CHEN J. The force-field derivation and application of explosive/additive interfaces [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, 24(7): 075013.
- [19] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of the interfacial force-field, thermodynamic property, and heat stress for plastic bonded explosives [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2017, 121(5): 2778–2788.
- [20] STRACHAN A, DUIN A, GODDARD W, et al. Shock waves in high-energy materials: the initial chemical events in nitramine RDX [J]. *Physical Review Letters*, 2003, 91: 098301.
- [21] LIU L, LIU Y, GODDARD W, et al. ReaxFF-Ig: correction of the ReaxFF reactive force field for London dispersion, with applications to the equations of state for energetic materials [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2011, 115(40): 11016–11022.
- [22] ZHANG L, ZYBIN S V, DUIN A, et al. Carbon cluster formation during thermal decomposition of octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine and 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene high explosives from ReaxFF reactive molecular dynamics simulations [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2009, 113(40): 10619–10640.
- [23] AN Q, ZYBIN S V, GORRDAR W A, et al. Elucidation of the dynamics for hot-spot initiation at nonuniform interfaces of highly shocked materials [J]. *Physical Review B: Condensed Matter*, 2011, 84: 220101.
- [24] AN Q, GORRDAR W A, ZYBIN S V, et al. Highly shocked polymer bonded explosives at a nonplanar interface: hot-spot formation leading to detonation [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(50): 26551–26561.
- [25] CHERUKARA M J, WOOD M A, KOBER E M, et al. Ultra-fast chemistry under non-equilibrium conditions and the shock to deflagration transition at the nanoscale [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, 119: 22008–22015.
- [26] 肖鹤鸣, 居学海. 高能体系中的分子间相互作用 [M]. 北京: 科学出版社, 2004.
- [27] 肖鹤鸣, 许晓娟, 邱玲. 高能量密度材料的理论设计 [M]. 北京: 科学出版社, 2008.
- [28] 肖继军, 朱卫华, 朱伟, 等. 高能材料分子动力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2013.
- [29] XIAO J J, WANG W R, CHEN J, et al. Study on the relations of sensitivity with energy properties for HMX and HMX-based PBXs by molecular dynamics simulation [J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2012, 407(17): 3504–3509.
- [30] CAO Q, XIAO J J, GAO P, et al. Molecular dynamics simulations for CL-20/TNT co-crystal based polymer-bonded explosives [J]. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 2017, 16: 1750072.
- [31] ZERILLI F J, KUKLJA M. *Ab initio* equation of state of the organic molecular crystal: β -Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2010, 114(16): 5372–5376.
- [32] VALENZANO L, SLOUGH W J, PERGER W. Accurate prediction of second-order elastic constants from first principles: PETN and TATB [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426: 1191–1194.
- [33] CUI H, JI G F, CHEN X, et al. Phase transitions and mechanical properties of octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-

- tetrazocine in different crystal phases by molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2010, 55(9): 3121–3129.
- [34] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. Theoretical study of breaking and slipping processes for HMX/graphite interface [J]. *Applied Surface Science*, 2012, 258(7): 2384–2392.
- [35] QIU L, XIAO H M. Molecular dynamics study of binding energies, mechanical properties, and detonation performances of bicyclo-HMX-based PBXs [J]. *Journal of Hazardous Material*, 2009, 164(1): 329–336.
- [36] XIAO J, HUANG H, LI J S, et al. A molecular dynamics study of interface interactions and mechanical properties of HMX-based PBXs with PEG and HTPB [J]. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2008, 851(1): 242–248.
- [37] XIAO J, ZHANG H, HUANG H, et al. NPT ensemble MD simulation investigation on the mechanical properties of HMX/F2311 polymer-bonded explosive [J]. *Chinese Journal of Chemistry*, 2008, 26(11): 1969–1972.
- [38] JAIDANN M, LUSSIER L S, BOUAMOUL A, et al. Effects of interface interactions on mechanical properties in RDX-based PBXs HTPB-DOA: molecular dynamics simulations [C]//Computational Science-ICCS 2009. Heidelberg: Springer-Berlin, 2009: 131–140.
- [39] JAIDANN M, LUSSIER L S, BOUAMOUL A, et al. Atomistic studies of RDX and FOX-7-based plastic-bonded explosives: molecular dynamics simulation [J]. *Procedia Computer Science*, 2011, 4: 1177–1185.
- [40] KUBO R, TODA M, HASHITSUME N. Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics [M]. Springer-Verlag, 1997.
- [41] PARLINSKI K, LI Z Q, KAWAZOE Y. First-principles determination of the soft mode in cubic ZrO_2 [J]. *Physical Review Letters*, 1997, 78(21): 4063–4066.
- [42] MARADUDIN A, FEIN A. Scattering of neutrons by an anharmonic crystal [J]. *Physical Review*, 1962, 128(6): 2589–2608.
- [43] TOGO A, CHAPUT L, TANAKA I. Distributions of phonon lifetimes in Brillouin zones [J]. *Physical Review B: Condensed Matter*, 2015, 91: 094306.
- [44] MÜLLER-PLATHE F. Reversing the perturbation in nonequilibrium molecular dynamics: an easy way to calculate the shear viscosity of fluids [J]. *Physical Review E*, 1999, 59: 4894–4898.
- [45] BEDROV D, SMITH G D, SEWELL T D. Thermal conductivity of liquid octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine (HMX) from molecular dynamics simulations [J]. *Chemical Physics Letters*, 2000, 324: 64–68.
- [46] KROONBLAWD M P, SEWELL T D. Predicted anisotropic thermal conductivity for crystalline 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB): temperature and pressure dependence and sensitivity to intramolecular force field terms [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2016, 41(3): 502–513.
- [47] LONG Y, CHEN J, LIU Y G, et al. A direct method to calculate thermal conductivity and its application in solid HMX [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2010, 22: 185404.
- [48] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. A method to calculate the thermal conductivity of HMX under high pressure [J]. *Philosophical Magazine*, 2012, 92(8): 1023–1045.
- [49] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of the phonon-phonon scattering mechanism and the thermal conductive coefficients for energetic material [J]. *Philosophical Magazine*, 2017, 97: 2575–2595.
- [50] LONG Y, CHEN J. A theoretical study of wave dispersion and thermal conduction for HMX/additive interfaces [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2014, 22: 035013.
- [51] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of the phonon spectrum, phonon refraction and thermodynamic properties for explosive/additive interfaces [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2018, 26: 015002.
- [52] BEDROV D, SMITH G D, SEWELL T D. Temperature-dependent shear viscosity coefficient of octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine (HMX): a molecular dynamics simulation study [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, 112(16): 7203–7208.
- [53] LONG Y, CHEN J. The heat dissipation model and desensitizing mechanism of the HMX/additive interfaces: a theoretical investigation based on linear response theory [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21: 055025.
- [54] KHOLOD Y, OKOVYTTY S, KURAMSHINA G, et al. An analysis of stable forms of CL-20: a DFT study of conformational transitions, infrared and Raman spectra [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2007, 843: 14–25.
- [55] XU X J, ZHU W H, XIAO H M. DFT Studies on the four polymorphs of crystalline CL-20 and the influences of hydrostatic pressure on ϵ -CL-20 crystal [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(8): 2090–2097.

- [56] BRAND H V, RABIE R L, FUNK D J, et al. Theoretical and experimental study of the vibrational spectra of the α , β and δ phases of octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2002, 106(41): 10594–10604.
- [57] MUNDAY L B, CHUNG P W, RICE B M, et al. Simulations of high-pressure phases in RDX [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2011, 115(15): 4378–4386.
- [58] LU L Y, WEI D Q, CHEN X R. The pressure-induced phase transition of the solid β -HMX [J]. *Molecular Physics*, 2009, 107(22): 2373–2385.
- [59] SMILOWITZ L, HENSON B F, ASAY B W, et al. The β - δ phase transition in the energetic nitramine-octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine: kinetics [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2002, 117(8): 3789–3798.
- [60] SMILOWITZ L, HENSON B F, ASAY B W, et al. The β - δ phase transition in the energetic nitramine-octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine: thermodynamics [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2002, 117(8): 3780–3788.
- [61] LEVITAS V I, HENSON B F, SMILOWITZ L B, et al. Solid-solid phase transformation via internal stress-induced virtual melting, significantly below the melting temperature. application to HMX energetic crystal [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, 110(20): 10105–10119.
- [62] LI J, BRILL T B. Kinetics of solid polymorphic phase transitions of CL-20 [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2007, 32(4): 326–330.
- [63] MATHEW N, KROONBLAWD M, SEWELL T D, et al. Predicted melt curve and liquid-state transport properties of TATB from molecular dynamics simulations [J]. *Molecular Simulation*, 2018, 44: 613–622.
- [64] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of phonon density of states, thermodynamic properties and phase transitions for HMX [J]. *Philosophical Magazine*, 2014, 94: 2656–2677.
- [65] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of the thermodynamic properties, phase transition wave, and phase transition velocity for octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 118: 115901.
- [66] LONG Y, CHEN J. A theoretical study of the stress relaxation in HMX on the picosecond time scale [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, 23: 085001.
- [67] KURY J W, HORNIG H C, LEE E L, et al. Metal acceleration by chemical explosives [C]//Proceedings of the 4th International Symposium on Detonation. Maryland: White Oak, 1966: 3–13.
- [68] WANG L L, ZHU X X, SHI S Q. An impact dynamics investigation on some problems in bird strike on windshield of high speed aircrafts [J]. *Chinese Journal of Aeronautics*, 1991, 12(3): 27–33.
- [69] 周风华, 王礼立, 胡时胜. 有机玻璃在高应变率下的损伤型非线性粘弹性本构关系及破坏准则 [J]. *爆炸与冲击*, 1992, 12(4): 333–341.
- ZHOU F H, WANG L L, HU S S. A damage-modified nonlinear visco-elastic constitutive relation and its failure criterion of PMMA at high strain rates [J]. *Explosion and Shock Waves*, 1992, 12(4): 333–341.
- [70] 赵艳红, 刘海风, 张弓木. PETN 炸药爆轰产物状态方程的理论研究 [J]. *高压物理学报*, 2009, 23(2): 143–149.
- ZHAO Y H, LIU H F, ZHANG G M. Equation of state of detonation products for PETN explosive [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2009, 23(2): 143–149.
- [71] 赵艳红, 刘海风, 张广财. PBX9502 炸药爆轰产物的状态方程 [J]. *爆炸与冲击*, 2010, 30(6): 647–651.
- ZHAO Y H, LIU H F, ZHANG G C. Equation of state of detonation products for PBX9502 explosive [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2010, 30(6): 647–651.
- [72] LÜ L, ZHANG L, YANG M L. Understanding the phase separation of N_2/H_2O and CO_2/H_2O binary systems through reactive force fields-based molecular dynamics simulations [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 124: 235901.
- [73] MENIKOFF R. Compaction wave profiles in granular HMX [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2002, 620: 979–982.
- [74] MENIKOFF R. Pore collapse and hot spots in HMX [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2004, 706: 393–396.
- [75] AUSTIN R A, BARTON N R, HOWARD W M, et al. Modeling pore collapse and chemical reactions in shock-loaded HMX crystals [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, 500: 052002.
- [76] AUSTIN R A, BARTON N R, REAUGH J E, et al. Direct numerical simulation of shear localization and decomposition reactions in shock-loaded HMX crystal [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 117: 185902.
- [77] SPRINGER H K, TARVER C M, BASTEA S. Effects of high shock pressures and pore morphology on hot spot mechanisms in HMX [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2017, 1793: 080002.

- [78] ZHOU T T, LOU J F, ZHANG Y G, et al. Hot spot formation and chemical reaction initiation in shocked HMX crystals with nanovoids: a large-scale reactive molecular dynamics study [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18(26): 17627–17645.
- [79] LONG Y, CHEN J. An investigation of the hot spot formation mechanism for energetic material [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 122: 175105.
- [80] LONG Y, CHEN J. A molecular dynamics study of the early-time mechanical heating in shock-loaded octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine-based explosives [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 116: 033516.
- [81] LONG Y, CHEN J. Theoretical study of the defect evolution for molecular crystal under shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125: 065107.
- [82] ZHANG C Y. Computational investigation on the desensitizing mechanism of graphite in explosives versus mechanical stimuli: compression and glide [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(22): 6208–6213.
- [83] ZHANG C Y. Understanding the desensitizing mechanism of olefin in explosives versus external mechanical stimuli [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2010, 114(11): 5068–5072.
- [84] LONG Y, LIU Y G, NIE F D, et al. Theoretical study of impacting and desensitizing for HMX-graphite mixture explosive [J]. *Shock Waves*, 2012, 22(6): 605–614.

Progress of Atomistic Simulations for Plastic Bonded Explosives

LONG Yao, CHEN Jun

(*Beijing Institute of Applied Physics and Computation Mathematics, Beijing 100088, China*)

Abstract: The recent atomistic simulations of plastic bonded explosive is reviewed in six aspects: the force-field, thermodynamic property, dissipation/transport property, phase transition, constitutive relation and ignition mechanism. In past decades, the structure and mechanical property of PBX are carefully investigated. However, the microscopic defect evolution and hot spot formation mechanisms are unclear. There are a set of challenging problems in detonation physics, such as the defect configuration at the chemical reaction zone, and the detonation wave deformation induced by defect. To investigate them, both atomistic simulation and experiment are required.

Keywords: plastic bonded explosive; molecular dynamics; thermodynamic properties

铝粒径及成型压强对 Al/PTFE 冲击反应的影响

刘元斌, 任会兰, 李 尉, 宁建国

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 采用模压烧结法制备了不同成型压强下铝粉粒径分别为 10、30 和 200 μm 的 Al/PTFE 试件, 基于分离式霍普金森压杆 (SHPB) 试验装置进行冲击引发试验, 试验过程中通过高速摄影装置记录活性材料的反应情况。试验结果表明: 随着成型压强增大, 试件的冲击反应速度阈值均呈现先增大后减小的趋势。铝粉粒径为 10 和 30 μm 时, 较高成型压强的试件能够于点火延迟时间 1000~1100 μs 处发生反应, 使试件冲击反应速度阈值骤降; 铝粉粒径为 200 μm 时, 活性材料点火延迟时间均在 600 μs 附近。在相同成型压强下, 试件的冲击反应速度阈值随铝粉粒径增大而升高。活性材料的冲击点火反应与材料的微观缺陷、应力波在 SHPB 装置中的传播、应力脉冲幅值以及材料的破坏过程等因素相关。

关键词: 铝-聚四氟乙烯; 活性材料; 分离式霍普金森压杆; 反应阈值

中图分类号: O383

文献标识码: A

铝-聚四氟乙烯 (Al/PTFE) 是一种新型氟聚物基活性材料, 具有高能 and 钝感双重特性, 在冲击作用下会发生剧烈的放热反应, 是典型的冲击引发型含能材料^[1-3]。活性材料可以依靠自身的动能和化学能对目标进行双重毁伤, 这种特性被广泛应用于防空、反导破障等军事领域, 成为一类重要的国防工业升级用和民用新型含能材料^[4], 具有广阔的发展前景。

国内外学者针对 Al/PTFE 活性材料的力学和反应性能开展了大量相关工作, 并对颗粒尺寸与材料力学性能的作用规律进行了系统性研究。Joshi 等^[5] 公布的铝-聚四氟乙烯模压烧结专利, 被广泛应用于 Al/PTFE 及相似含能材料的制备。阳世清等^[6] 采用冷压烧结法制备了 Al/PTFE 活性材料, 测试其理化性能、热分解性能和力学性能, 并进一步研究压制成型和烧结工艺参数的作用规律。赵鹏铎等^[7] 和徐松林等^[8] 研究了 Al 含量及应变率对 Al/PTFE 力学性能和反应特性的影响。Herbold 等^[9] 研究了 Al/PTFE 在不同填充物下的工程应变及性能变化。葛超等^[10-11] 从微观角度, 采用有限元方法系统研究了 Al 颗粒粒径及分布特征对 Al/PTFE 材料力学性能的影响。Osborne 等^[12] 研究了 Al 颗粒粒径对 Al/PTFE 热分解过程的影响。吴家祥等^[13] 对经过特殊热处理的 Al/PTFE 分别进行了准静态压缩和落锤撞击试验, 结果表明在较低应变率 ($10^{-2} \sim 10^2 \text{ s}^{-1}$) 范围内, 随着 Al 粒径增大, Al/PTFE 活性材料发生活化由易变难。Al/PTFE 作为一种复合材料, 其组分含量、粒径尺寸等原材料差异对材料力学性能及反应特性有显著影响。

在冲击引发及能量释放方面: 王海福等^[14] 针对活性破片毁伤威力评估问题, 提出了一种动态测量活性破片能量输出特性的方法; Mock 等^[15] 研究了 Al/PTFE 杆的冲击引发临界条件及准则, 并深入研究了能量释放与撞击速度的关系以及对 Al 颗粒增强特征尺寸的影响。葛超等^[16] 通过 16 mm 口径气枪发

* 收稿日期: 2019-01-17; 修回日期: 2019-02-26

基金项目: 国家自然科学基金 (11872124)

作者简介: 刘元斌 (1992—), 男, 硕士, 主要从事材料与结构冲击动力学研究。

E-mail: liuyuanbin_bit@163.com

通信作者: 任会兰 (1973—), 女, 博士, 教授, 主要从事材料与结构冲击动力学研究。

E-mail: huilanren@bit.edu.cn

射 Al/PTFE 圆柱破片碰撞靶板的试验和冲击压缩的理论分析,研究材料在冲击条件下的反应阈值,试验结果表明:碰撞应力和应变率均对 Al/PTFE 的冲击反应有影响,并且共同决定了材料的反应情况,只有在应变率和应力均高于相应阈值时,材料在撞击条件下才会发生反应。

为探究成型压强及铝粉粒径对 Al/PTFE 活性材料冲击反应特性的影响,采用分离式霍普金森压杆 (SHPB) 装置撞击 Al/PTFE 试件,并通过高速摄影记录冲击过程,用试件恰好发生反应时撞击杆的撞击速度表示试件反应阈值,通过分析试验曲线及高速摄影观察结果,探究不同成型压强下 Al/PTFE 反应难易程度以及铝粉粒径对其反应阈值的作用规律,为研究 Al/PTFE 活性材料的反应机理以及材料制备、生产、运输和储存过程中的安全性提供参考。

1 试验方法

1.1 试件制备

采用模压烧结法制备试验用试件,其中铝粉的平均粒径分别为 10、30 和 200 μm ,密度 2.72 g/cm^3 ; PTFE 粉体的平均粒径为 15 μm ,密度 2.17 g/cm^3 。基于 Al 和 PTFE 的主反应方程式 $4\text{Al}+3\text{C}_2\text{F}_4=4\text{AlF}_3+6\text{C}$,设置其质量分数分别为 26.5% 和 73.5%,按此配比称取材料粉体并加入适量无水乙醇混合,使用 V 型混粉机混粉 10 h。混粉均匀后将糊状原材料放在恒温鼓风干燥箱中烘干,干燥温度 55 $^{\circ}\text{C}$ 。干燥后,称取适量粉体于压制模具中,使用万能材料试验机压制成型,通过控制试验机压力调节成型压强,将压制成型的试件保压 200 s 后取下、脱模,静置 24 h 后置于氩气气氛的箱式气氛炉中无压烧结,经过一定处理后降至室温并取出。设计试件尺寸为 $\varnothing 10\text{ mm}\times 5\text{ mm}$,磨平称量后进行试验。试件制备流程如图 1 所示。

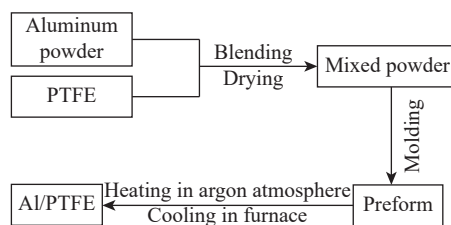


图 1 试件制备流程

Fig. 1 Flow chart of the specimens preparation

表 1 为不同铝粉粒径的 Al/PTFE 试件在不同成型压强下的孔隙率,可以看出:随着成型压强的升高,孔隙率降低,但试件材料整体孔隙率较小。

表 1 不同成型压强下 Al/PTFE 试件的孔隙率

Table 1 Porosities of Al/PTFE reactive materials prepared under different molding pressures

Molding pressure/MPa	Porosities of Al/PTFE/%		
	10 μm Al particle	30 μm Al particle	200 μm Al particle
30	4.9	4.8	3.8
50	4.0	3.6	3.2
80	3.1	2.9	2.5
100	2.5	2.4	1.4
120	2.3	1.9	1.2

1.2 试验过程

试验采用的分离式霍普金森压杆 (SHPB) 试验装置主要由加载驱动系统、弹性压杆系统、信号测试和数据处理系统组成。加载驱动系统依靠压缩空气提供动力源,弹性压杆系统由撞击杆、入射杆、透射杆和吸收杆组成,杆件直径均为 14.5 mm。撞击杆长度 300 mm,由不同气室压力驱动以产生不同幅值的压缩波,速度由入射杆前激光测速装置测得。试验用钢质入射杆和透射杆长度均为 1200 mm,通过分别贴在入射杆和透射杆相应位置的电阻应变片采集信号,并连接超动态信号测试分析系统。应变片接入电桥,根据应变片电阻变化得到输出电压波形,根据应变与输出电压的关系得到试验微应变数据并进行处理。

试验过程中通过高速摄影观察并记录材料冲击过程: 若材料发生反应, 则调节气室压力以降低撞击杆速度; 若未观察到材料发生反应, 则提高撞击杆速度。通过反复试验, 最终获得材料的冲击反应速度阈值。

图 2 显示由 SHPB 装置中应变片采集的数据曲线, 其中信号 1 和信号 2 分别为入射杆和透射杆上采集的信号。试验发现: 应力波在入射杆中往复传播, 对试件进行多次加载, 每次应力脉冲的时间间隔约为 $475\ \mu\text{s}$, 单次脉冲长度约为 $150\ \mu\text{s}$ 。

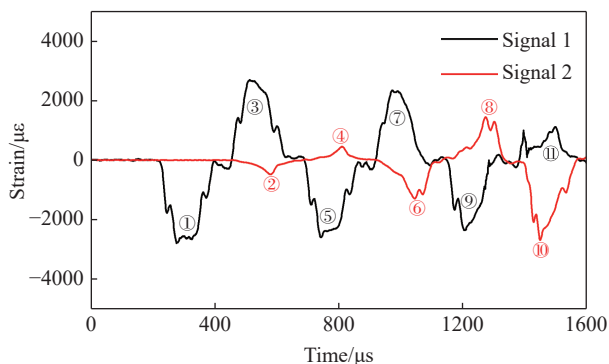


图 2 分离式霍普金森压杆中应力波传播曲线

Fig. 2 The propagation of stress waves in the SHPB

2 结果与分析

实验过程中通过高速摄影装置记录活性材料的冲击反应图像, 其中高速摄影装置的拍摄帧率为 20 000 幅/秒。如图 3 所示, 试件 (铝粉粒径 $10\ \mu\text{m}$ 、成型压强 $100\ \text{MPa}$ 、撞击速度 $27.69\ \text{m/s}$) 在受到冲击压缩后横截面积骤增, 并在第一个压缩波抵达试件端面后约 $150\ \mu\text{s}$ 发生破碎和飞散; 试件在受到冲击后 $1000\ \mu\text{s}$ 左右发生剧烈反应, 发出明亮的火光并伴随响亮的爆鸣声, 如图 3(d) 所示。不同铝粉粒径的 Al/PTFE 活性材料的反应特性试验结果统计如图 4 所示, 激光测速仪记录撞击速度, 点火延迟时间定义为从试件受到冲击时刻至记录火光发生时刻的时间长度。

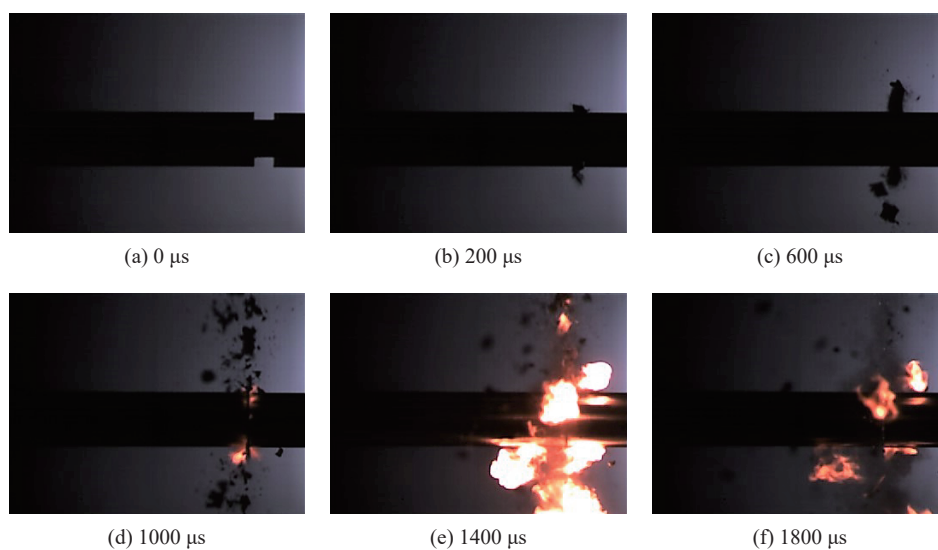


图 3 试件冲击引发反应过程

Fig. 3 Impact-ignition of the reactive material

2.1 成型压强对冲击反应速度阈值的影响

图 5 为不同铝粉粒径的 Al/PTFE 活性材料的冲击反应速度阈值随成型压强的变化规律, 其中活性材料的冲击反应速度阈值定义为材料可以发生冲击引发反应的临界速度。

从图 5 中可以看出, 不同铝粉粒径活性材料的冲击反应速度阈值均随成型压强的增加呈先上升后下降的趋势。当成型压强小于 $50\ \text{MPa}$ 时, 冲击反应速度阈值随成型压强的增加而增大; 当成型压强达到 $80\ \text{MPa}$ 时, 铝粉粒径 $30\ \mu\text{m}$ 活性材料的冲击反应速度阈值率先发生大幅下降, 约为 9%; 当成型压强达 $100\ \text{MPa}$ 时, 铝粉粒径 $10\ \mu\text{m}$ 活性材料的冲击反应速度阈值率先大幅下降约 9%, 铝粉粒径 $30\ \mu\text{m}$ 和 $200\ \mu\text{m}$

活性材料的冲击反应速度阈值也呈下降趋势,但下降幅度较小;成型压强为 100 MPa 以上时,活性材料的冲击反应速度阈值随成型压强的增加而减小。

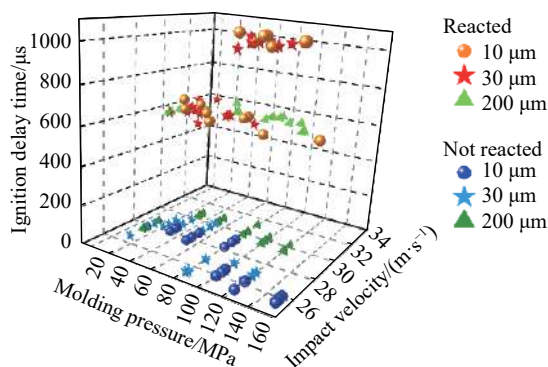


图4 不同成型压强试件反应阈值及点火延迟时间

Fig. 4 Thresholds and delay time of impact-ignition of Al/PTFE with different molding pressures

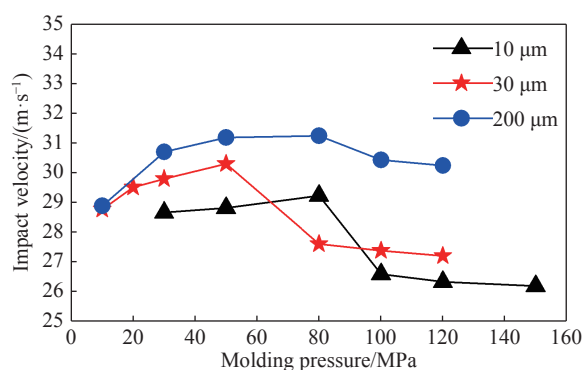


图5 不同成型压强的 Al/PTFE 试件冲击反应速度阈值

Fig. 5 Thresholds of impact-ignition of Al/PTFE with different molding pressure

通常认为,非均质含能材料点火是多种“热点”机理共同作用的结果,其中起主导作用的热点机理取决于含能材料自身物化性质、材料微观结构(颗粒尺寸和粒径分布、孔隙或缺陷等)、加载条件以及热力学过程等因素^[17-18]。为了探究 Al/PTFE 活性材料的点火特性随成型压强变化的原因,通过扫描电子显微镜(SEM)观察得到不同成型压强下 Al/PTFE 试件(铝粉粒径 10 μm)的微观结构,如图 6 所示。

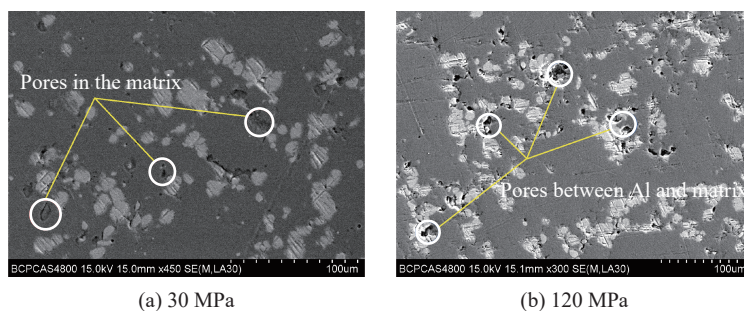


图6 不同成型压强的 Al/PTFE 试件的 SEM 图像

Fig. 6 SEM images of Al/PTFE reactive materials prepared under different molding pressures

从图 6(a)中可以看出,当成型压强较低(30 MPa)时,试件基体中存在大量的大体积空隙;随着成型压强升高,试件中的空隙数量减少,体积变小,与表 1 中试件孔隙率随成型压强变化规律对应;成型压强较高(120 MPa)的试件中存在大量介于 Al 颗粒和 PTFE 基体之间的空隙,如图 6(b)所示。结合试件制作过程中的实际情况发现:该现象是由于高成型压强下所制试件内部的残余应力在烧结过程中释放,试件发生回弹变形所致,与烧结前后试件尺寸变化相对应。

结合扫描电镜结果与“热点”理论分析,试件受到冲击作用时,内部空隙迅速发生变形,材料内部摩擦产生大量的热,变形能和摩擦产生的热量在局部堆积,使局部温度迅速升高;另一方面,基体中各过程产生的热量向四周扩散,为局部高温“热点”的形成提供能量。上述过程最终导致 Al 颗粒和 PTFE 基体界面形成“热点”从而引发整个试件。随着试件成型压强升高,试件中的空隙数量减少,特别是介于 Al 颗粒和 PTFE 基体之间空隙明显减少,“热点”形成机会减小,试件的冲击反应速度阈值增大;成型压强高的试件由于烧结过程中的残余应力释放等因素,内部产生大量介于 Al 颗粒和 PTFE 基体之间的空隙,“热点”形成机会增大,试件冲击反应速度阈值减小。

2.2 试件点火延迟时间

由图 4 可以看出,活性材料在 SHPB 装置加载下的点火延迟时间受撞击速度和材料的成型压强影

响显著。当铝粉粒径分别为 $10\ \mu\text{m}$ 和 $30\ \mu\text{m}$ 时, 材料的点火延迟时间主要集中在 $600\sim 650\ \mu\text{s}$ 和 $1000\sim 1100\ \mu\text{s}$ 之间, 且只有较高成型压强的试件在较低撞击速度下才能够于 $1000\sim 1100\ \mu\text{s}$ 发生反应; 而铝粉粒径为 $200\ \mu\text{m}$ 的活性材料试件点火延迟时间均在 $600\ \mu\text{s}$ 附近。为了进一步探究活性材料在冲击载荷下的反应机理, 将试验中所采集到 SHPB 杆上的应变-时间信息进行数据处理, 得到了活性材料在多次脉冲载荷下的应力-时间曲线, 如图 7 所示。

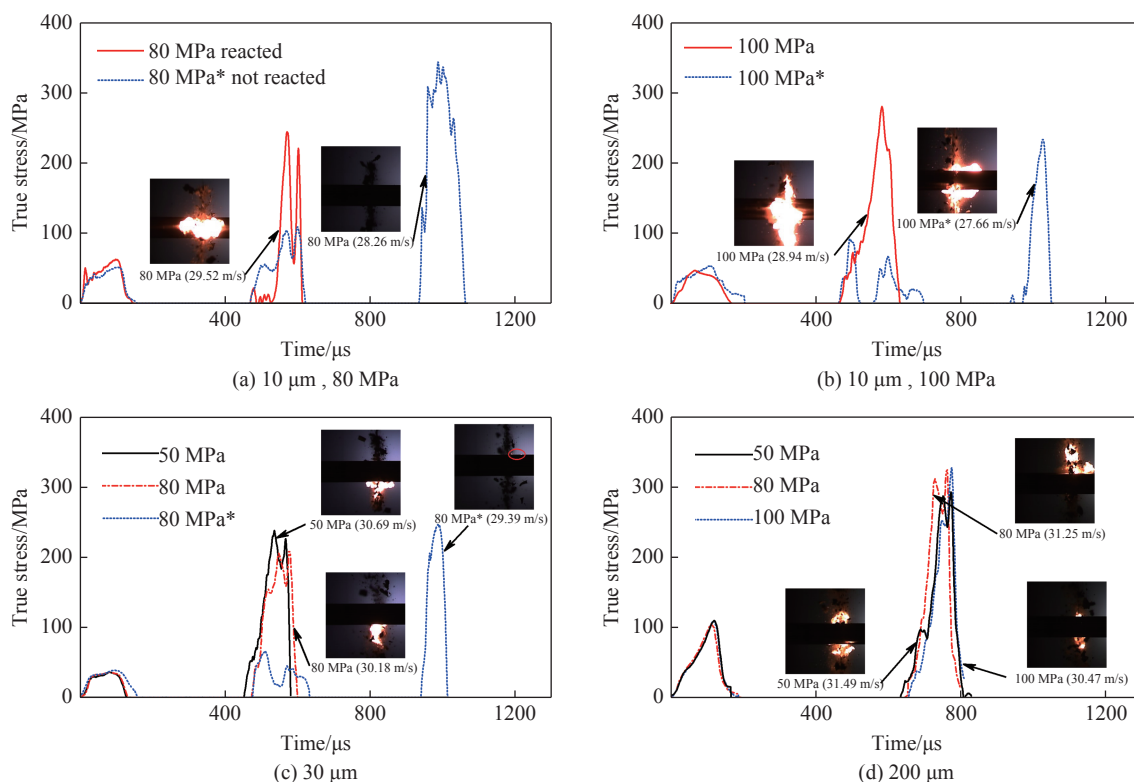


图 7 不同颗粒尺寸条件下 Al/PTFE 试件的真正应力-时间曲线

Fig. 7 True stress-time curves of Al/PTFE with different particle sizes

由图 7 可知, 活性材料的点火延迟时间与第 2、3 次应力脉冲时间存在对应关系。随着应力波在杆中的往复弹射, 多次脉冲载荷在试件中的应力幅值依次增大。对于铝粉粒径为 $10\ \mu\text{m}$ 的试件, 如图 7(a)、图 7(b) 所示, 当成型压强低于 $100\ \text{MPa}$ 时, 若撞击速度达到材料的冲击反应速度阈值, 试件仅在第 2 次应力脉冲为 $600\sim 650\ \mu\text{s}$ 、应力幅值为 $200\ \text{MPa}$ 左右时发生反应, 尽管第 3 次应力脉冲 ($1000\sim 1100\ \mu\text{s}$) 应力幅值高于 $300\ \text{MPa}$; 当成型压强高于 $100\ \text{MPa}$ 时, 材料率先在第 3 次脉冲应力幅值 $200\ \text{MPa}$ 左右发生化学反应, 且随着撞击速度提高, 试件上加载的应力脉冲幅值也随之提高, 当第 2 次应力脉冲幅值达到 $200\ \text{MPa}$ 左右时, 试件在第 2 次脉冲处可以发生反应, 这也是试件的冲击反应速度阈值在成型压强 $100\ \text{MPa}$ 时发生骤降的原因。对于铝粉粒径为 $30\ \mu\text{m}$ 的试件, 如图 7(c) 所示, 成型压强对材料冲击点火特性的影响规律与铝粉粒径为 $10\ \mu\text{m}$ 的试件类似, 只是致使活性材料点火特性发生转变的成型压强由 $100\ \text{MPa}$ 降至 $80\ \text{MPa}$ 。然而, 铝粉粒径为 $200\ \mu\text{m}$ 的试件呈现的点火延迟时间与前两组有所不同, 材料的点火反应只发生在第 2 次应力脉冲处, 且引发材料反应的最低应力幅值均高于前者, 约为 $300\ \text{MPa}$, 如图 7(d) 所示。

2.3 铝粉粒径对冲击反应速度阈值的影响

从前文中可以看出, Al/PTFE 活性材料点火特性受铝粉颗粒粒径的影响。不同铝粉粒径活性材料的冲击反应速度阈值均随成型压强的增加呈先上升后下降趋势。图 8 为不同成型压强下各铝粉粒径试件的冲击反应速度阈值。由图 8 可知, 当成型压强小于 $50\ \text{MPa}$ 时, 活性材料的冲击反应速度阈值随

铝粉粒径的增加而增加,该现象与吴家祥等^[19]在 Al/PTFE 活性材料撞击试验中观察到的现象相似。

铝粉粒径为 200 μm 的 Al/PTFE 试件在成型压强相同条件下的冲击反应速度阈值比铝粉粒径为 10 μm 的 Al/PTFE 试件高(约 7%),其中成型压强为 100 MPa 及以上 Al/PTFE 试件的冲击反应速度阈值的相对偏差约为 15%;铝粉粒径为 10 和 30 μm 的 Al/PTFE 试件具有相似的点火特性变化趋势,成型压强高的试件因可以在较低的撞击速度下于第 3 次应力脉冲处发生反应,其冲击反应速度阈值骤降(约 9%);铝粉粒径为 200 μm 的 Al/PTFE 试件未发现在第 3 次应力脉冲反应,因此其冲击反应速度阈值降低约 3%,明显小于铝粉粒径为 10 和 30 μm 的 Al/PTFE 试件的骤减幅度。对此现象进行分析,原因如下。

(1) 金属颗粒增强复合材料在受压时,金属颗粒之间相互挤压,产生力链^[20](Force Chain),力链中金属颗粒受压变形可承载应力;力链经历生成、破坏和再生 3 个过程,材料中力链承载能力与力链数目、力链强弱和力链再生能力等有关。10 μm 粒径的铝颗粒力链再生能力强,可以承载更高的应力,但在高应变率冲击下 200 μm 粒径铝颗粒产生的单条力链承载能力远高于粒径小的铝颗粒力链。

(2) 金属颗粒表面可吸附多条聚合物大分子链,材料受到冲击时,应力通过金属颗粒和聚合物基体之间的分子链分散,致使材料的韧性增大;粒径大的铝颗粒的比表面积小,其所能吸附的分子链数目小,进而导致材料的韧性降低。铝粉粒径为 200 μm 的 Al/PTFE 试件韧性低,在冲击过程中易发生碎裂,无法在第 3 次应力脉冲处发生反应。

(3) 大粒径铝颗粒的比表面积小,因此反应物 Al 与氧化剂 PTFE 的接触面积小;烧结过程中,基体在高温条件下发生流动、变形,填充大颗粒与基体之间的部分空隙。Al 与氧化剂 PTFE 的接触面积降低使得材料在冲击过程中局部“热点”产生的难度更高。

3 结 论

采用分离式霍普金森压杆(SHPB)装置撞击 Al/PTFE 试件,并通过高速摄影记录冲击过程,用撞击杆撞击速度表示试件反应阈值。通过分析试验曲线及高速摄影观察结果,总结不同成型压强下 Al/PTFE 的反应难易程度以及不同铝粉粒径对其反应阈值的影响,得到的结论如下:

(1) 不同铝粉粒径的 Al/PTFE 活性材料的冲击反应速度阈值随成型压强的增加呈先上升后下降趋势,结合扫描电镜图像和试件压制过程分析,该现象与高成型压强制得的试件在烧结过程中残余应力释放有关;

(2) 试件的点火延迟时间与第 2 次应力脉冲(600~700 μs)或第 3 次应力脉冲(1000~1100 μs)时间对应;

(3) 随着铝粉粒径的增大,在成型压强相同的条件下,试件的冲击反应速度阈值升高;铝粉粒径为 200 μm 的 Al/PTFE 试件未在第 3 次应力脉冲发生反应,因此其冲击反应速度阈值未发生骤降。

参考文献:

- [1] MICHAEL T R, DANIEL W D, JAMES R H, et al. Reactive material enhanced projectiles and related methods: 20060011086 [P]. 2006.
- [2] MOCK W, HOLT W H. Impact initiation of rods of pressed polytetrafluoroethylene (PTFE) and aluminum powders [C]//

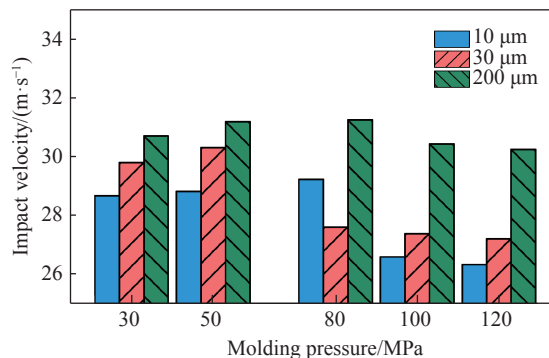


图8 不同铝粉粒径的 Al/PTFE 试件的冲击反应速度阈值

Fig. 8 Thresholds of impact-ignition of Al/PTFE with different particle sizes of Al

- American Institute of Physics, 2006: 1097–1100.
- [3] WANG H F, ZHENG Y F, YU Q B, et al. Impact-induced initiation and energy release behavior of reactive materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110(7): 239–H03.
- [4] 黄亨建, 黄辉, 阳世清, 等. 毁伤增强型破片探索研究 [J]. *含能材料*, 2007, 15(6): 566–569.
HUANG H J, HUANG H, YANG S Q, et al. Preliminary research on damage enhanced fragment [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2007, 15(6): 566–569.
- [5] JOSHI V S. Process for making polytetrafluoroethylene-aluminum composite and product made: 654799381 [P]. 2003.
- [6] 阳世清, 徐松林, 张彤. Al/PTFE 反应材料制备工艺及性能 [J]. *国防科技大学学报*, 2008, 30(6): 40–42.
YANG S Q, XU S L, ZHANG T. Preparation and performance of Al/PTFE reactive materials [J]. *Journal of National University of Defense Technology*, 2008, 30(6): 40–42.
- [7] 赵鹏铎, 卢芳云, 徐松林, 等. 活性材料 PTFE/Al 动态压缩性能 [J]. *含能材料*, 2009(4): 459–462.
ZHAO P D, LU F Y, XU S L, et al. The dynamic compressive properties of PTFE/Al reactive materials [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2009(4): 459–462.
- [8] 徐松林, 阳世清, 赵鹏铎, 等. PTFE/Al 含能复合材料的压缩力学行为研究 [J]. *力学学报*, 2009, 41(5): 708–712.
XU S L, YANG S Q, ZHAO P D, et al. The study on the compressive behavior of PTFE/Al energetic composite [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2009, 41(5): 708–712.
- [9] HERBOLD E B, CAI J, BENSON D J, et al. Simulation of particle size effect on dynamic properties and fracture of PTFE-W-Al composites [C]// American Institute of Physics, 2007: 785–788.
- [10] GE C, DONG Y, MAIMAITITUERSUN W. Microscale simulation on mechanical properties of Al/PTFE composite based on real microstructures [J]. *Materials*, 2016, 9(7): 590.
- [11] 乌布力艾散·麦提图尔荪, 葛超, 董永香, 等. 基于 Al/PTFE 真实细观特性统计模型的宏观力学性能模拟 [J]. *复合材料学报*, 2016(11): 2528–2536.
MAIMAITITUERSUN W, GE C, DONG Y X, et al. Simulation on mechanical properties of Al/PTFE based on mesoscopic statistical model [J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2016(11): 2528–2536.
- [12] OSBORNE D T, PANTOYA M L. Effect of Al particle size on the thermal degradation of Al/Teflon mixtures [J]. *Combustion Science & Technology*, 2007, 179(8): 1467–1480.
- [13] 吴家祥, 李裕春, 方向, 等. Al 粒径对 Al-PTFE 准静压反应和落锤撞击感度的影响 [J]. *含能材料*, 2018(6): 524–529.
WU J X, LI Y C, FANG X, et al. Effect of Al particle size on the quasi-static compression reaction and drop hammer impact sensitivity of Al-PTFE [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2018(6): 524–529.
- [14] 王海福, 刘宗伟, 俞为民, 等. 活性破片能量输出特性试验研究 [J]. *北京理工大学学报*, 2009, 29(8): 663–666.
WANG H F, LIU Z W, YU W M, et al. Experimental investigation of energy release characteristics of reactive fragments [J]. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2009, 29(8): 663–666.
- [15] MOCK W, DROTAR J T. Effect of Aluminum particle size on the impact initiation of pressed PTFE/AL composite rods [C]// Shock Compression of Condensed Matter: Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter. American Institute of Physics, 2007: 971–974.
- [16] GE C, MAIMAITITUERSUN W, REN Y M, et al. Impact initiation threshold study of PTFE/Al composite [J]. *China Sciencepaper*, 2016.
- [17] 钟凯, 刘建, 王林元, 等. 含能材料中“热点”的理论模拟研究进展 [J]. *含能材料*, 2018, 26(1): 11–20.
ZHONG K, LIU J, WANG L Y, et al. Issue of “hot-spot” in energetic materials: recent progresses of modeling and calculations [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2018, 26(1): 11–20.
- [18] 彭亚晶, 叶玉清. 含能材料起爆过程“热点”理论研究进展 [J]. *化学通报*, 2015, 78(8): 693–701.
PENG Y J, YE Y Q. Research progress of “Hot spot” theory in energetic materials initiation [J]. *Chemistry*, 2015, 78(8): 693–701.
- [19] WU J X, FANG X, GAO Z R, et al. Investigation on mechanical properties and reaction characteristics of Al-PTFE composites with different Al particle size [J]. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2018, 2018: 1–10.
- [20] HERBOLD E B, NESTERENKO V F, BENSON D J, et al. Particle size effect on strength, failure, and shock behavior in polytetrafluoroethylene-Al-W granular composite materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(10): 103903.

Influence of Particle Size of Aluminum Powder and Molding Pressure on Impact-Initiation of Al/PTFE

LIU Yuanbin, REN Huilan, LI Wei, NING Jianguo

(*State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

Abstract: Aluminum-polytetrafluoroethylene (Al/PTFE) specimens with different aluminum particle sizes of 10, 30 and 200 μm and different molding pressures were prepared by compression molding and sintering. The impact-initiation test was carried out with split Hopkinson pressure bar (SHPB), and the reaction of the reactive materials was recorded by a high-speed photography device. It shows that with the increase of molding pressure, the speed threshold of impact-initiation of the specimen increases and then decreases. When the particle sizes of aluminum powder is around 10 μm or 30 μm , specimens with higher molding pressure can react with ignition delay time of 1000–1100 μs , causing a sudden drawdown of the speed threshold of impact-initiation; for the specimens with 200 μm aluminum powder, the ignition delay time stays around 600 μs . The speed threshold of impact-initiation raises as the particle size of aluminum increases, under the same molding pressure. The impact ignition of the reactive material is related to the microscopic defects, the propagation of the stress wave in the SHPB device, the amplitude of the stress pulse and the destruction process of the material.

Keywords: aluminum-polytetrafluoroethylene (Al/PTFE); reactive material; split Hopkinson pressure bar (SHPB); reaction threshold

组合装药的撞击安全性与内爆威力试验研究

张广华, 屈可朋, 沈 飞, 王 辉

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 为了验证某组合装药的撞击安全性与内爆威力, 开展了组合装药的大型落锤试验及爆炸罐内爆威力试验研究。结果表明: 单一温压炸药在 400 kg 落锤作用下的临界落高为 2.2 m, 组合装药分别在 2.2、2.3、2.5 和 2.7 m 落高时均未发生爆炸反应, 证明组合装药具有更好的撞击安全性; 组合装药的初始冲击波超压峰值是单一温压炸药的 61.9%, 比冲量是单一温压炸药的 99.4%, 准静态压力峰值是单一温压炸药的 94.5%。考虑到炸药在有限空间内爆炸的能量释放特性, 将准静态压力峰值作为威力评价标准更为合适。试验结果证明组合装药的内爆威力与单一温压炸药相当。

关键词: 组合装药; 撞击安全性; 内爆威力; 比冲量; 准静态压力

中图分类号: TJ55; O389

文献标识码: A

随着弹药技术的不断发展, 弹药在储存、使用等过程中的安全性要求日益提高, 不敏感弹药设计受到越来越多的关注。组合装药技术是降低弹药敏感性的的重要手段之一, 与研制新型不敏感炸药相比, 通过对现有炸药进行合理的组合设计以提高装药的安全性具有更灵活、更实用的特点, 同时还能在提升装药安全性的前提下保证装药较高的威力。

国内外先后针对组合装药技术开展了许多研究工作^[1-6], 例如: 美国开展了由 B2249/WFQ 组成的复合装药结构的相关研究, 证明了该复合装药不仅具有较低的敏感性, 同时爆炸威力也得到了显著的提升; 向梅等^[7-8]研究了由钝感炸药和高能炸药组成的复合装药在冲击波和枪击作用下的响应特性, 证明该复合装药结构可以提升整体装药的安全性; 尹俊婷等^[9]研究了 3 种金属加速/高爆热复合装药的能量输出特性, 通过试验验证了其破片驱动能力及冲击波超压特性; 牛余雷等^[10]选择 GH-1 和 GUHL-1 两种炸药, 采用内外层和上下叠加两种典型的组合装药结构, 测量了组合装药水下冲击波的超压时程曲线, 得到了组合装药的水下爆炸能量输出特性; 屈可朋等^[11]和肖玮等^[12]通过大型落锤试验获取了 RDX 基炸药在不同应力率加载下的力学响应特性及反应情况, 探讨了应力率对炸药撞击安全性机理的影响。

综上所述, 国内外关于组合装药开展了较多相关研究, 但多数只关注装药安全性或爆炸威力等某一方面, 很少有文献对同一组合装药的安全性及爆炸威力进行同步分析。本研究以某温压战斗部用组合装药为研究对象, 开展大型落锤试验及爆炸罐内爆试验, 并将试验结果与单一温压炸药的安全性及威力性能数据进行比较, 对比分析该组合装药的安全性及内爆威力。

1 装药安全性

1.1 试验装置

采用西安近代化学研究所的大型落锤试验系统作为加载源, 模拟装药发生意外跌落、发射、穿甲时的受力环境, 进行装药的撞击安全性研究。试验装置主要包括: 落锤、轨道、爆炸室、试验样品、压

* 收稿日期: 2019-03-05; 修回日期: 2019-03-18

基金项目: 国防基础科研专项(05020501)

作者简介: 张广华(1987—), 男, 博士, 助理研究员, 主要从事毁伤理论与技术研究. E-mail: guanghua0611@sina.com

通信作者: 王 辉(1977—), 男, 硕士, 高级工程师, 主要从事炸药爆轰性能研究. E-mail: land_wind@163.com

力传感器、防护掩体等。其中,落锤质量为400 kg,通过调节落高使其在一定高度自由下落对试验药柱进行冲击加载,如图1所示。试验过程中,落锤通过活塞对样品进行冲击加载,利用压力传感器和记录仪记录炸药的受力过程。

1.2 试验样品和试验方法

试验样品分为2种,均由西安近代化学研究所提供。试样1为普通HMX基温压炸药(HA-1),主要由HMX、铝粉和黏结剂组成,质量分数分别为65%、30%和5%,通过压装工艺成型,尺寸为 $\phi 40\text{ mm} \times 40\text{ mm}$,密度为 1.85 g/cm^3 ;试样2为组合装药,包括高能炸药和不敏感炸药两部分,高能炸药选用HA-1,不敏感炸药的选择应在满足不敏感要求的前提下具有较高能量,因此选用某RDX基不敏感炸药(RAP-1),主要由RDX、铝粉、高氯酸铵(AP)、黏结剂及增塑剂组成,质量分数分别为30%、31%、28%、5%、6%,浇注成型,密度为 1.82 g/cm^3 。落锤试验中组合装药的排布如图2所示:上部为RAP-1,下部为HA-1,药柱尺寸均为 $\phi 40\text{ mm} \times 20\text{ mm}$ 。

试验时,首先对试样1进行加载,通过调整落锤高度,获取试样1发生爆炸时的临界落高 h_1 ,然后以 h_1 作为试样2的落锤落高对其进行加载,观察试样2的反应情况。

1.3 试验结果及分析

通过对试样1进行落锤加载试验,得到其发生爆炸时的临界落高为2.2 m,相同工况下,B炸药的临界落高为1.75 m^[12]。试样1的典型加载曲线如图3所示,其中图3(a)为未发生爆炸反应的加载曲线,图3(b)为发生爆炸反应的加载曲线。

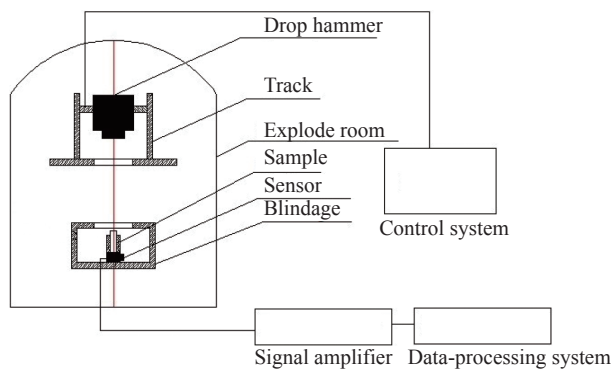


图1 落锤试验装置示意图

Fig. 1 Schematic of drop hammer system

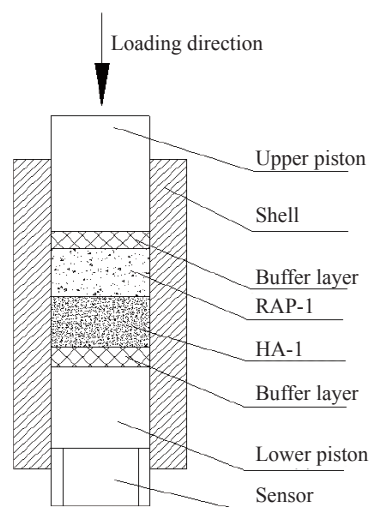


图2 组合装药排布

Fig. 2 Assembly of composed charge

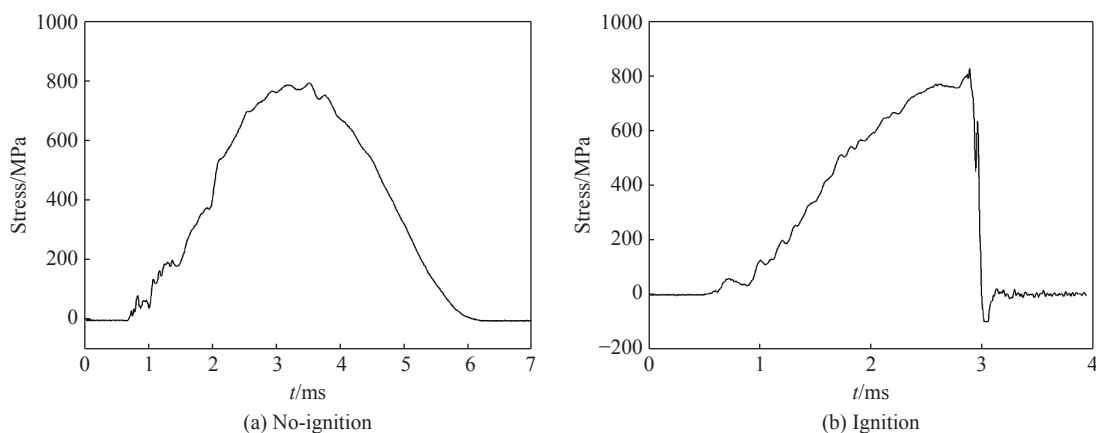


图3 典型落锤加载曲线

Fig. 3 Typical loading curve of drop hammer

将落锤高度 h 分别设定为 2.2、2.3、2.5 和 2.7 m, 加载组合装药试样 2。为避免试验结果的随机性, 每种高度各进行 2 次试验, 加载结果如表 1 所示, 其中 σ 为加载应力, 炸药均未发生爆炸。

分析落锤试验结果可知: 采用组合装药可以提升装药的撞击安全性, 这是由于组合装药由撞击感度相对较高的 HA-1 和撞击感度相对较低的 RAP-1 组成, 与单一温压炸药相比, 当落锤以相同落高作用于组合装药时, 加载应力首先作用于具有较低撞击感度的 RAP-1, 而 RAP-1 在落锤加载作用下不会发生反应; 加载应力经 RAP-1 衰减后作用于 HA-1, 使得作用于 HA-1 的加载应力低于其临界反应阈值, 因此 HA-1 也未发生反应; 另外, 由于 RAP-1 中含有约 6% 的增塑剂, 一定程度上增强了 RAP-1 的塑性, 与单一温压炸药相比, 组合装药中的 RAP-1 炸药在落锤加载时会发生较大变形^[13], 耗散掉部分能量, 进一步降低了组合装药的撞击感度, 从而提升其装药安全性。

2 内爆威力试验

2.1 试验装置

考虑温压炸药的作战环境一般在密闭或半密闭舱体内, 因此选择在爆炸罐内开展炸药威力研究。如图 4 所示, 爆炸罐外观为胶囊形, 直径 2.6 m, 圆柱部长 3.2 m, 主体由抗爆承压层、隔音层和内衬装甲层组成, 罐体中心壁面均匀分布 4 个法兰盘, 用于安装传感器等测量装置。

2.2 试验样品

内爆威力试验样品如图 5 所示。其中扩爆药柱为 $\phi 25\text{ mm} \times 25\text{ mm}$ 的 JH-14C 药柱, 质量 20 g, 中心带有雷管孔, 通过军用 8# 电雷管起爆主装药。主装药由两部分组成, 其中装药 1 和装药 2 各 1 kg, 直径为 97 mm, 长度根据装药的密度而定。试验共设置 3 种主装药成分: 第 1 种为 2 节 HA-1 药柱; 第 2 种为 2 节 RAP-1 药柱; 第 3 种为组合装药, 装药 1 为 RAP-1, 装药 2 为 HA-1。

图 6 为真空爆炸罐示意图, 在法兰盘 1 和法兰盘 4 上各安装 2 个壁面压力传感器和 2 个准静态压力传感器, 分别用于测量正反射冲击波超压及准静态压力。为减小爆轰不均匀性带来的测量误差, 两个法兰盘上安装的传感器参数相同, 处理数据时对 2 个测点的测试结果进行均值处理, 所有传感器的输出信号均经过信号适调器进行放大。冲击波压力传感器采用美国 PCB 公司生产的 113B22 型通用高频压力传感器, 谐振频率大于 500 kHz, 上升时间小于 $1\text{ }\mu\text{s}$, 量程为 $0 \sim 34.5\text{ MPa}$; 准静态压力传感器采用昆山双桥公司生产的 CYG508 型压阻式高频压力传感器, 测量精度 0.5 级, 测试组件

表 1 组合装药落锤试验结果

Table 1 Drop hammer experimental results of composed charge

No.	h/m	σ/MPa	t/ms	Response characteristics
1	2.2	829	5.54	No-ignition
2	2.2	827	6.01	No-ignition
3	2.3	839	5.55	No-ignition
4	2.3	837	5.54	No-ignition
5	2.5	881	5.63	No-ignition
6	2.5	875	5.82	No-ignition
7	2.7	902	5.77	No-ignition
8	2.7	895	5.57	No-ignition



图 4 真空爆炸罐外观

Fig. 4 Picture of the vacuum explosion tank

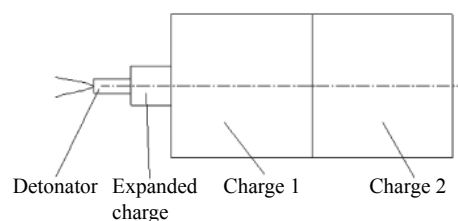


图 5 威力试验样品示意图

Fig. 5 Schematic of the experimental samples used for explosion test

上升时间为 0.24 ms, 量程为 0~5 MPa; 采用美国 PCB 公司的信号试调器, 型号 482C05, 频率带宽可达 1 MHz。为防止高温对测量结果产生影响, 压力传感器的感应面涂抹炮油。

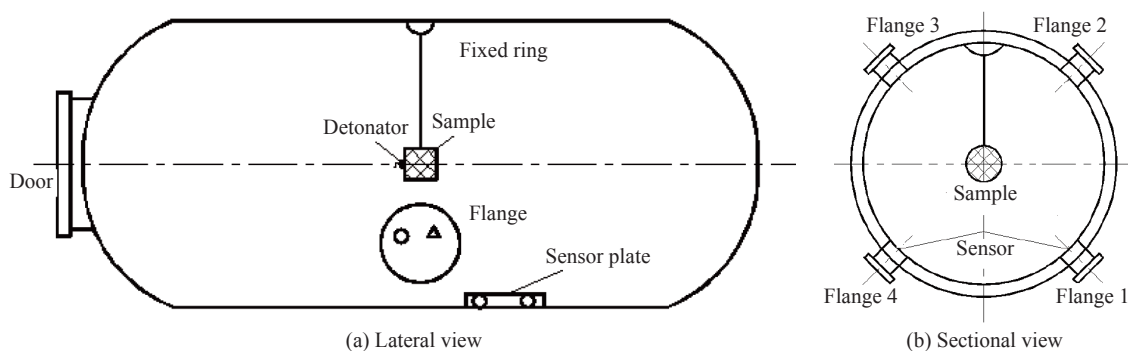


图6 真空爆炸罐示意图

Fig. 6 Schematic of the vacuum explosion tank

2.3 试验结果及分析

2.3.1 冲击波超压

为分析不同试验装药的内爆威力, 引入 2 kg TNT 炸药的测试结果以便对比分析, 实测不同装药的冲击波超压曲线如图 7 所示。由于冲击波在罐体内的反射效应较为明显, 其超压峰值有时波动较大, 常以尖脉冲方式出现, 为了便于对比, 图 7 中将各种炸药的冲击波超压曲线沿时间坐标进行了适当平移。

通过图 7 所示的冲击波超压实测曲线可知, 冲击波超压峰值高, 反射次数多, 作用时间为 10 μ s 量级, 通过对图 7 所示冲击波超压进行相应处理, 得到不同装药的冲击波超压峰值 ΔP 和比冲量, 如表 2 所示。

通过表 2 可以看出: HA-1 炸药的冲击波超压峰值最高, 这是由于冲击波峰值超压的大小主要与无氧反应阶段的释能有关, HA-1 中含有 65% 的 HMX, 爆炸瞬间会释放较多的冲击波能; RAP-1 炸药的冲击波超压峰值最低, 这是由于 RAP-1 中仅含有约 30% 的 RDX, 爆炸瞬间仅有这部分炸药发生无氧爆轰转化成冲击波能, 铝粉和 AP 之间的氧化还原反应主要是在 RDX 发生无氧爆轰后进行的, 其能量释放以后燃烧为主^[14], 因此对冲击波的贡献不大; 将 HA-1 与 RAP-1 进行质量比为 1:1 的混合后(即组合装药), 其超压峰值介于二者之间, 但是与 HA-1 相比还有一定的差距。

通过表 2 数据还可以看出, HA-1 炸药的比冲量最高, 组合装药与 HA-1 的比冲量较为接近, 达到了 HA-1 比冲量的 99.4%, 这是由于组合装药中的 RAP-1 中含有 28% 的 AP 作为氧化剂, 可以为炸药体系提供更多的氧, 使得 HA-1 及 RAP-1 中铝粉的能量能够进行更有效的释放, 且组合装药中的 HA-1 炸药在爆轰过程中能为铝粉反应提供 stronger 的压力及更高的温度环境, 进一步提升了能量释放率及利用率, 因此, 组合装药拥有比 HA-1 更强的后燃效应。Ahmed 等^[15]通过数值计算及试验发现, 温压炸药的后

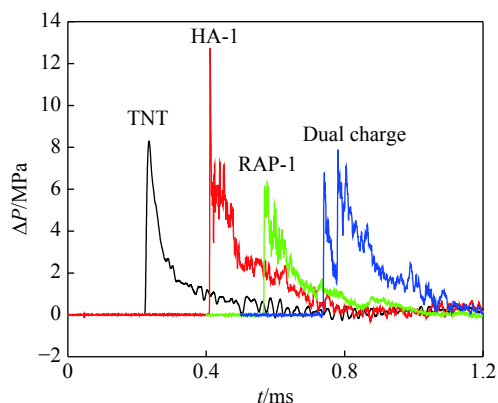


图7 冲击波超压实测曲线

Fig. 7 Measured blast wave overpressure curves

表2 冲击波超压峰值及比冲量

Table 2 Blast wave overpressure and specific impulse

Explosive	$\Delta P/\text{MPa}$	Specific impulse/(Pa·s)
TNT	8.29	893
HA-1	12.75	1170
RAP-1	6.37	658
Dual charge	7.89	1110

燃反应会导致压力的衰减较传统炸药缓慢,冲量显著增加,他们认为铝粉的燃烧虽然减缓了初期爆炸的能量释放率,但并没有降低整体爆炸能量。

2.3.2 准静态压力

由于准静态压力的实测曲线中有一些高频干扰信号,因此首先对试验结果进行了滤波处理,最终获得结果如图8所示。

通过图8可知,组合装药的准静态压力峰值高于TNT和RAP-1,与单一温压炸药相差不大。经过分析,这与准静态压力的形成过程及炸药的成分配比有关,准静态压力的大小与炸药无氧阶段及有氧后燃烧阶段的能量释放均有关,即准静态压力既与炸药爆轰产生的大量气体有关,也与有氧后燃烧阶段爆炸释能引起密闭空间内温度升高进而导致压力上升有关。组合装药中既含有具有较高初始冲击波能的HA-1,能够为组合装药贡献较高的冲击波超压,同时还含有铝粉及AP,AP在炸药爆炸过程中会释放大量的氧与铝粉进行反应,使得铝粉能量进行更有效的释放,产生更多的热量,进而提升组合装药的准静态压力。综上所述,与RAP-1相比,由于组合装药中含有具有较高初始冲击波超压的HA-1炸药,且二者均具有较高的后燃烧释能,因此在初始冲击波超压及后燃烧释能的共同作用下组合装药的准静态压力高于RAP-1;与HA-1相比,虽然组合装药的初始冲击波超压相对较小,但其具有更高的后燃烧释能,二者共同作用下使得组合装药的准静态压力值与HA-1相当。

通过图8还可以看出,无论哪种炸药,准静态压力峰值均为冲击波超压峰值的1/20左右甚至更小,与文献[16]所述一致,但准静态压力作用时间较长,为百毫秒量级,而冲击波超压的作用时间尺度仅为10 μs量级。

2.3.3 组合装药内爆威力分析

通过对试验结果进行分析可知,组合装药的冲击波超压峰值与单一温压炸药相比相差较大,为单一温压炸药的61.9%,但由于组合装药具有更强的后燃烧效应,压力衰减相对较慢,所以其比冲量与单一温压炸药相当,为单一温压炸药的99.4%。

考虑到炸药在有限空间内爆炸时的做功环境及释能方式,进行密闭空间内炸药威力对比时通常采用准静态压力作为评价标准,而非冲击波超压,原因如下^[17]。(1)炸药爆炸后,罐体内气体压力经历了“不平衡”到“平衡”的过程。文献[18]将准静态压力定义为“装药在有限容积的密闭结构内爆炸,由于受约束爆轰气体不能无限膨胀,气体趋于稳定时的压力”,亦即准静态压力为气体“平衡”后的压力,显然“平衡”后的准静态压力与罐体相对位置无关,而冲击波超压与其在罐体内的分布和位置有关。(2)冲击波超压脉宽小、频率高且衰减迅速,加之炸药形状、传感器安装方式、爆炸罐内部结构、传感器与舱体发生共振^[19]等因素都会影响冲击波超压的测量精度,导致较难准确测量超压值;而对于准静态压力,同一发试验中,不同准静态压力传感器所获数据的吻合性较好,且受其他因素的干扰也较小。(3)密闭空间内的部分燃料在未燃烧前被抛掷到舱体壁面,与壁面发生碰撞反射后会有部分动能转化为热能进行二次燃烧,撞击过程中会发生额外的压力响应。(4)冲击波超压主要表征炸药在无氧爆轰阶段的能量释放,准静态压力与无氧爆轰及有氧后燃烧阶段的释能均有关。

综上所述,准静态压力能够更全面、真实地表征炸药在内爆环境下的释能特性,美国海军水面武器中心在比较密闭空间内的炸药威力时,便仅采用准静态压力作为评价标准^[20-21]。本研究中,组合装药的准静态压力是单一温压炸药的94.5%,证明采用组合装药的方式能够保证其内爆威力与单一温压炸药相差不大。

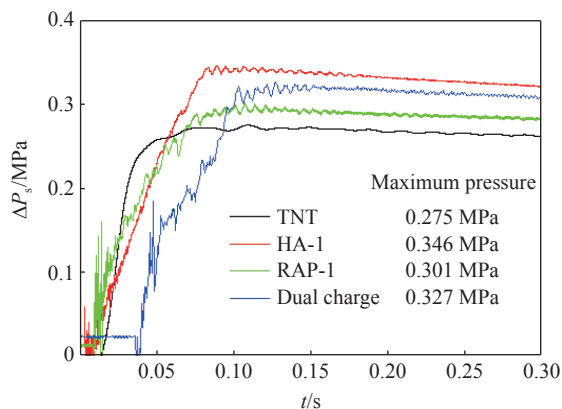


图8 不同装药的准静态压力变化曲线

Fig. 8 Quasi-static pressure curves of different charges

3 结 论

(1)单一温压炸药的临界落高为2.2 m,组合装药在临界落高为2.7 m时仍未发生爆炸反应,证明采用组合装药结构可以有效提升装药的撞击安全性。

(2)组合装药的冲击波超压峰值为单一温压炸药的61.9%,而比冲量达到单一温压炸药的99.4%,准静态压力峰值达到单一温压炸药的94.5%。考虑到组合装药的具体作战环境及释能特性,用准静态压力峰值评价其内爆威力更为合适,试验结果证明该组合装药的内爆威力与单一温压炸药相当。

参考文献:

- [1] KERNEN P. Way and methods to insensitive munitions: IM recipes version [C]//Processing of Insensitive Munitions Technology Symposium. Williamsburg: NSWC, 1994.
- [2] 韩勇, 鲁斌, 蒋志海, 等. JO-9159/ECX 复合装药的冲击波感度研究 [J]. *含能材料*, 2008, 16(2): 164–166.
HAN Y, LU B, JIANG Z H, et al. Shock sensitivity of JO-9159/ECX composite charge [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2008, 16(2): 164–166.
- [3] NOUGUEZ B. Dual formulation warheads: a mature technology [C]//Processing of Insensitive Munitions Technology Symposium. Williamsburg: NSWC, 1996.
- [4] 沈飞, 王辉, 罗一鸣. DNTF 基同轴二元装药的爆轰波形及驱动特性 [J]. *含能材料*, 2018, 26(7): 614–619.
SHEN F, WANG H, LUO Y M. Detonation wave-shape and driving performance of coaxial binary charge of DNTF-based Aluminized explosives [J]. *Energetic Materials*, 2018, 26(7): 614–619.
- [5] VITTORIA M, BURGESS W. Sympathetic detonation testing of a dual explosive warhead concept for large diameter warheads [C]//Processing of Insensitive Munitions Technology Symposium. Williamsburg: NSWC, 1994.
- [6] 沈飞, 王辉, 罗一鸣. 一种同轴二元组合装药的爆轰波形及驱动特性 [J]. *火炸药学报*, 2018, 41(6): 588–593.
SHEN F, WANG H, LUO Y M. Detonation waveform and driving performance of a kind of coaxial binary composite charge [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2018, 41(6): 588–593.
- [7] 向梅, 黄毅民, 饶国宁, 等. 复合装药结构隔板实验与数值模拟 [J]. *兵工学报*, 2013, 34(2): 246–250.
XIANG M, HUANG Y M, RAO G N, et al. Experimental and numerical simulation study of the shockwave sensitivity of composite charge explosive [J]. *Acta Armamentarii*, 2013, 34(2): 246–250.
- [8] 向梅, 饶国宁, 彭金华. 钝感复合装药结构枪击试验尺寸效应的数值模拟 [J]. *火炸药学报*, 2010, 33(6): 30–33.
XIANG M, RAO G N, PENG J H. Numerical simulation on bullet impact test dimensional effect for the composite structure of insensitive ammunition [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2010, 33(6): 30–33.
- [9] 尹俊婷, 蔚红建, 栗宝华, 等. 金属加速炸药/高爆热炸药复合装药爆炸特性研究 [J]. *火工品*, 2015(3): 33–37.
YIN J T, WEI H J, LI B H, et al. Explosion characteristics of metal accelerating explosive/ high detonation heat explosive composite charge [J]. *Initiators & Pyrotechnics*, 2015(3): 33–37.
- [10] 牛余雷, 王晓峰, 余然. 二元复合炸药装药水下爆炸能量输出特性 [J]. *含能材料*, 2009, 17(4): 415–419.
NIU Y L, WANG X F, YU R. Characteristics of energy output of underwater explosion for dual explosive charge [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2009, 17(4): 415–419.
- [11] 屈可朋, 沈飞, 王世英, 等. RDX 基 PBX 炸药在不同应力率下的撞击安全性 [J]. *火炸药学报*, 2014, 37(6): 40–43.
QU K P, SHEN F, WANG S Y, et al. Research on impact safety of a RDX-based PBX explosive at different stress rate [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2014, 37(6): 40–43.
- [12] 肖玮, 李亮亮, 屈可朋, 等. 某 RDX 基含 Al 炸药发射安全性 [J]. *含能材料*, 2015, 23(1): 62–66.
XIAO W, LI L L, QU K P, et al. Launch safety of RDX-based aluminized explosive [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2015, 23(1): 62–66.
- [13] 陈鹏万, 丁雁生. 高聚物粘结炸药的力学行为及变形破坏机理 [J]. *含能材料*, 2000, 8(4): 161–164.
CHEN P W, DING Y S. Mechanical behaviour and deformation and failure mechanisms of polymer bonded explosives [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2000, 8(4): 161–164.
- [14] 黄亚峰, 田轩, 冯博, 等. 温压炸药爆炸性能实验研究 [J]. *爆炸与冲击*, 2016, 36(4): 573–576.

- HUANG Y F, TIAN X, FENG B, et al. Experimental study on explosion performance of thermobaric explosive [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2016, 36(4): 573–576.
- [15] AHMED K M, HOSAM E K, ELBASUNEY S. Nanoscopic fuel-rich thermobaric formulations: chemical composition optimization and sustained secondary combustion shock wave modulation [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2016, 301: 492–503.
- [16] 张玉磊, 苏健军, 李芝绒, 等. TNT 内爆炸准静态压力特性 [J]. *爆炸与冲击*, 2018, 38(6): 1429–1434.
- ZHANG Y L, SU J J, LI Z R, et al. Quasi-static pressure characteristic of TNT's internal explosion [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2018, 38(6): 1429–1434.
- [17] 金朋刚, 郭伟, 王建灵, 等. 密闭条件下 TNT 的爆炸压力特性 [J]. *火炸药学报*, 2013, 36(3): 39–41.
- JIN P G, GUO W, WANG J L, et al. Explosion pressure characteristics of TNT under closed condition [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2013, 36(3): 39–41.
- [18] 蒋浩征, 俞明义. 导弹技术词典 [M]. 北京: 宇航出版社, 1986: 144–145.
- [19] AMES R G, DROTAR J T, SILBER J, et al. Quantitative distinction between detonation and after burn energy deposition using pressure-time histories in enclosed explosions [C]//13th International Detonation Symposium. Norfolk Virginia: Office of Naval Research, 2006.
- [20] DAVID P E. Internal blast test to support the Tomahawk and APET programs “munitions survivability in unified operations” [C]//Insensitive Munitions Technology Symposium. Las Vegas, NV, 1996.
- [21] 杨雄, 王晓峰, 黄亚峰, 等. 真空环境下铝含量对 HMX 基炸药爆炸场压力和温度的影响 [J]. *火炸药学报*, 2017, 40(6): 73–77.
- YANG X, WANG X F, HUANG Y F, et al. Effect of Al content on the explosion field pressure and temperature of HMX-based explosive in vacuum environment [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2017, 40(6): 73–77.

Experimental Study on Impact Safety and Implosion Energy Release Characteristics of Composed Charge

ZHANG Guanghua, QU Kepeng, SHEN Fei, WANG Hui

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: To verify impact safety and implosion power of a composed charge, the drop hammer tests and implosion power experiments were conducted. The results show that critical height of the single thermo-baric explosive is 2.2 m under loading of 400 kg hammer, while the composed charge did not ignite under height from 2.2 m to 2.7 m, which means that the composed charge holds a better impact safety property. Peak overpressure of the composed charge was 61.9% of the single thermo-baric explosive, the impulse of the composed charge was 99.4% of the single thermo-baric explosive, and the peak quasi-static pressure of the composed charge was 94.5% of the single thermo-baric explosive. Considering energy release characteristics within a limited space, it is more suitable to use peak quasi-static pressure as an evaluation standard. The test results show that implosion energy release characteristics of the composed charge is almost the same as the single thermo-baric explosive.

Keywords: composed charge; impact safety; implosion power; specific impulse; quasi-static pressure

近场爆炸冲击波对屏蔽压装 TNT 的 冲击引爆试验和仿真

陈兴旺¹, 王金相¹, 唐奎¹, 陈日明², 周莲², 郝春杰³

(1. 南京理工大学瞬态物理国家重点实验室, 江苏 南京 210094;

2. 中国北方车辆研究所, 北京 100072;

3. 晋西工业集团, 山西 太原 030027)

摘要: 为研究近场强冲击波对屏蔽装药的冲击引爆效应, 通过试验和 LS-DYNA3D 非线性有限元计算程序对屏蔽压装 TNT 的冲击引爆进行研究, 得到了接触爆炸时压装 TNT 被引爆的临界屏蔽板厚度和非接触爆炸时屏蔽压装 TNT 的殉爆距离, 分析了非接触爆炸时屏蔽板厚度对殉爆距离的影响, 并通过非线性最小二乘法拟合得到屏蔽板厚度与殉爆距离的函数关系。结果表明: 数值计算结果与试验结果基本一致; 接触爆炸时临界起爆的屏蔽板厚度在 20~23 mm 之间; 屏蔽板采用 3 mm 厚的 45 钢时, 非接触爆炸作用下压装 TNT 的殉爆距离在 12~15 mm 之间; 非接触爆炸时殉爆距离随着屏蔽板厚度的增加而减小, 当无屏蔽板时, 压装 TNT 的殉爆距离为 79 mm, 当屏蔽板厚度从 1 mm 加大到 9 mm 时, 殉爆距离从 51 mm 减为 1.5 mm, 被发装药的屏蔽板对冲击波有显著的防护作用。

关键词: 屏蔽装药; 冲击引爆; 近场冲击波; 殉爆距离

中图分类号: O383.1

文献标识码: A

屏蔽装药结构在外界强载荷作用下的安全性对于武器弹药研制具有重要意义。冲击波和高速破片是战场环境中两种最常见的威胁, 研究含装药结构在上述外界能量作用下的冲击引爆机理和毁伤效应可为含装药弹药的安全性设计提供依据^[1-2]。目前很多学者对破片或破片群对屏蔽装药结构的冲击引爆开展了研究^[3-6]。对于炸药的冲击引爆, Walker 等^[7]以热起爆理论为基础, 推导出著名的非均相炸药的起爆判据 $p^2t=C$ (其中 p 为炸药界面的冲击压力, t 为压力持续作用时间, C 是与炸药有关的参数), 此判据为不敏感弹药的冲击引爆研究提供了理论基础。Lu 等^[8]对裸装 PBXN-109 炸药殉爆试验进行了数值仿真, 研究了爆炸冲击波对裸露炸药的冲击引爆作用。王晨等^[9]对壳装固黑铝炸药殉爆试验进行了数值仿真, 分析了主发装药壳体厚度对殉爆距离的影响。然而, 作为弹药不敏感研究的重要方面, 屏蔽装药结构在超近场强冲击波作用下的响应研究却鲜见报道, 因此有必要开展爆炸冲击波对屏蔽装药的冲击引爆研究, 从而为弹药安全性设计提供指导。

本研究以压装 TNT 为例, 屏蔽板采用 45 钢, 通过试验和数值模拟方法开展接触和非接触爆炸两种情况下压装 TNT 在近场爆炸冲击波作用下的冲击引爆效应研究, 重点分析屏蔽板厚度和起爆距离对冲击引爆的影响, 以期确定临界起爆条件。

* 收稿日期: 2018-07-23; 修回日期: 2018-08-23

基金项目: 国家自然科学基金(11672138)

作者简介: 陈兴旺(1994—), 男, 博士研究生, 主要从事屏蔽装药结构安全性研究。

E-mail: m18851199809@163.com

通信作者: 王金相(1978—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事爆炸与冲击动力学研究。

E-mail: wjx@njut.edu.cn

1 近场爆炸冲击波对屏蔽装药冲击引爆的数值模拟

1.1 计算模拟

采用非线性有限元计算程序 LS-DYNA 对屏蔽装药的冲击引爆进行数值模拟。如图 1 所示,有限元计算模型包括:主发装药、屏蔽板、被发装药、见证板和空气域,具体模型尺寸与试验对应。为简化计算模型,不考虑雷管、PPR 套筒和传爆药。由于试验装置为轴对称结构,为减少计算量,采用 1/4 模型进行计算。数值计算采用 ALE(Arbitrary Lagrange-Euler)算法,主发装药和空气域采用 Euler 网格,屏蔽板和被发装药采用 Lagrange 网格,屏蔽板与被发装药以及被发装药与见证板之间的接触均采用滑移接触,以便观察被发装药的起爆过程和见证板的变形。起爆点设置在主发装药表面中心点处。

1.2 材料模型

空气域采用无偏应力动力模型(Null)和 Linear Polynomial 状态方程^[10]。主发装药采用 HIGH_EXPLOSIVE_BURN 本构模型和 JWL 状态方程,JKWL 状态方程如下

$$p = A \left(1 - \frac{\omega}{R_1 V} \right) e^{-R_1 V} + B \left(1 - \frac{\omega}{R_2 V} \right) e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V} \quad (1)$$

式中: p 为反应物的压力, V 为反应物的比容, E 为单位体积炸药内能, ω 、 A 、 B 、 R_1 、 R_2 为表征炸药特性的常数。屏蔽板和见证板材料模型均采用 Johnson-Cook 模型和 Grüneisen 状态方程,屏蔽板和主发装药的具体材料参数如表 1 所示,其中: ρ_0 为密度; D 为爆速; p_{CJ} 为 CJ 压力; G 为剪切模量; A_1 、 B_1 、 C_1 、 m 、 n 为材料常数,分别为材料的初始屈服应力、应变强化系数、应变速率强化系数、温度软化系数、应变强化指数; T_r 为常温, T_m 为材料的熔化温度。

表 1 主发炸药和屏蔽板的材料模型参数^[11-13]
Table 1 Parameters for donor charge and shell model^[11-13]

Material	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	$D/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	p_{CJ}/GPa	A/GPa	B/GPa	R_1	R_2	ω	$E/(10^9 \text{ J}\cdot\text{m}^{-3})$
TNT	1.60	6 812	18.56	370	3.23	4.15	0.95	0.3	7
Material	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	G/GPa	A_1/GPa	B_1/GPa	C_1	n	m	T_m/K	T_r/K
45 steel	7.85	82.3	0.507	0.320	0.280	0.064	1.06	1 765	298
Q235 steel	7.83	80.0	0.235	0.250	0.022	1.000	0.36	1 793	294

被发装药采用点火增长反应模型,该模型可以反映受冲击炸药内部的爆轰发展过程,具体形式为

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^x + G_1(1-\lambda)^c \lambda^d p^y + G_2(1-\lambda)^e \lambda^g p^z \quad (2)$$

式中: λ 为反应度,即已反应炸药量与炸药总量的比值,它在模拟爆轰过程中控制着炸药化学能的释放; I 、 G_1 、 G_2 、 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 g 、 x 、 y 和 z 为材料参数,具体取值如表 2 所示。(2)式等号右侧第 1 项代表部

表 2 TNT 点火增长反应模型参数^[13]

Table 2 Ignition and growth reactive flow model parameters for TNT^[13]

$I/\mu\text{s}^{-1}$	$G_1/(\text{Pa}^{-3}\cdot\text{s}^{-1})$	$G_2/(\text{Pa}^{-3}\cdot\text{s}^{-1})$	a	b	c	d	e	g	x	y	z
8×10^8	4.20×10^{-25}	2.60×10^{-25}	0.111	0.667	0.667	0.667	0.333	1	6	3	3

分炸药在冲击压缩下被点火, 第 2 项代表热点的增长, 第 3 项代表主要反应后相对缓慢的扩散控制反应。

2 屏蔽装药冲击引爆试验

本工作主要研究近场强冲击波对屏蔽装药的冲击引爆效应, 并获得接触爆炸时压装 TNT 的临界屏蔽板厚度和非接触爆炸时屏蔽压装 TNT 的殉爆距离。为避免大量试验, 依据仿真结果和初步理论计算^[14] 设计了 3 发接触爆炸试验和 4 发非接触爆炸试验。

2.1 试验方案

图 2 为接触爆炸屏蔽装药冲击引爆实物照片。共进行 7 发屏蔽装药冲击引爆试验。其中, 接触爆炸试验 3 发: 试验装置由雷管、传爆药、主发装药、45 钢屏蔽板、被发装药和见证板组成; 主发装药和被发装药均为柱形压装 TNT, 且尺寸相同, 直径为 35 mm, 高度为 30 mm; 传爆药为柱形聚黑-14, 其密度为 1.136 g/cm^3 , 直径为 20 mm, 厚度为 5 mm, 放置在主发装药的正上方; 主发装药与 45 钢屏蔽板直接接触, 屏蔽板厚度分别为 20、23、26 mm; 见证板为 Q235 钢, 厚度为 20 mm。非接触爆炸试验 4 发: 试验装置比接触爆炸试验装置多一个 PPR 套筒, 用来隔离主发装药与 45 钢屏蔽板; PPR 套筒内径 33.7 mm, 外径 40.0 mm, 高度分别为 10、12、15、19 mm; 屏蔽板厚度均为 3 mm。

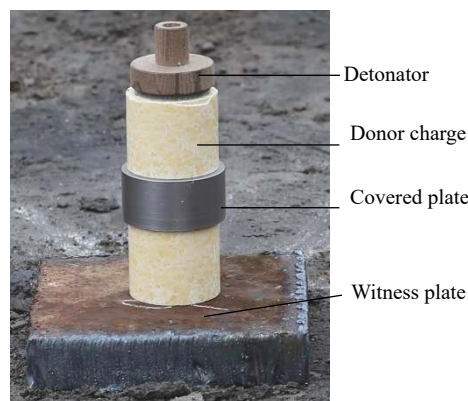


图 2 屏蔽装药冲击引爆实物照片

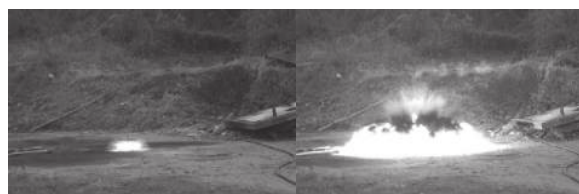
Fig. 2 Photo of shock initiation of covered charge

接触爆炸试验中, 首先由雷管起爆传爆药, 进而起爆主发装药, 主发装药爆炸产生的冲击波直接经 45 钢屏蔽板衰减后作用于被发装药; 在非接触屏蔽装药冲击引爆试验中, 主发装药爆炸产生的冲击波分别经过空气和 45 钢屏蔽板衰减后作用于压装 TNT。

通过改变屏蔽板厚度 d 和 PPR 套筒高度 h , 使冲击波以不同幅值冲击引爆被发装药; 根据见证板的变形情况和高速摄像的记录过程, 判断被发装药的引爆情况。

2.2 试验结果

以非接触爆炸为例, 通过高速摄影记录被发装药的起爆和熄爆过程。图 3 和图 4 分别是套筒高度 h 为 10 和 15 mm 时不同时刻起爆装置的高速摄影照片。对比图 3 和图 4 发现, 主发装药 TNT 爆炸后, 图 3(a) 和图 4(a) 中装置上端均产生亮光。图 3 中, 被发装药爆炸后, 屏蔽板下面的被发装药有新的亮光产生, 且爆炸后产生的冲击波和爆轰产物将地面黑色尘土颗粒掀起。图 4 中, 被发装药未爆炸, 屏蔽板下面的被发炸药没有产生新的亮光, 爆轰剧烈程度相对较小。



(a) $t=312.5 \mu\text{s}$ (b) $t=1\ 250 \mu\text{s}$

图 3 套筒高度为 10 mm 时不同时刻起爆装置的高速摄影照片

Fig. 3 High speed camera photos of experimental setup with 10 mm PPR sleeve at different time



(a) $t=312.5 \mu\text{s}$ (b) $t=1\ 250 \mu\text{s}$

图 4 套筒高度为 15 mm 时不同时刻起爆装置的高速摄影照片

Fig. 4 High speed camera photos of experimental setup with 15 mm PPR sleeve at different time

图 5 和图 6 分别显示了接触和非接触爆炸后被发装药的见证板变形情况。对比图 5 和图 6 发现: 当被发装药爆炸后, 试验后无剩余的 TNT 炸药粉末, 见证板被炸出凹坑, 坑深为 4.2 mm, 凹坑直径为 40 mm, 与炸药直径基本相同; 当被发装药未起爆, 试验后见证板上遗留大量的白色粉末, 没有发生任何变形。



图 5 接触爆炸试验后被发装药的见证板变形
Fig. 5 Deformation of the witness plates under the acceptor with contact explosion



图 6 非接触爆炸试验后被发装药的见证板变形
Fig. 6 Deformation of the witness plates under the acceptor with non-contact explosion

表 3 列出了屏蔽装药冲击引爆试验结果。接触爆炸试验中: 当屏蔽板厚度 $d=20$ mm 时, 被发炸药完全爆轰; 当屏蔽板厚度 d 为 23 和 26 mm 时, 炸药未爆炸。因此, 压装 TNT 的临界屏蔽板厚度在 20~23 mm 之间。非接触爆炸试验中, PPR 套筒高度为主发装药和 45 钢屏蔽板之间的垂直距离。当套筒高度 $h=10$ mm 时, 被发炸药完全爆炸; $h=12$ mm 时, 见证板的坑深较浅, 且残留炸药粉末, 被发炸药仅部分爆炸; $h=15$ mm 和 $h=19$ mm 时, 炸药未爆炸。由此得到, 屏蔽板厚度 $d=3$ mm 的压装 TNT 装药的临界起爆距离在 12~15 mm 之间。

表 3 屏蔽装药冲击引爆试验结果

Table 3 Results of shock initiation of covered charge

Explosion type	Test No.	d /mm	h /mm	Explosion situation of acceptor charge	Pit depth/mm
Contact explosion	1	20		Exploded	4.22
	2	26		Unexploded	0
	3	23		Unexploded	0
Non-contact explosion	4	3	10	Exploded	4.20
	5	3	19	Unexploded	0
	6	3	15	Unexploded	0
	7	3	12	Part of the explosion	2.20

3 分析与讨论

3.1 仿真结果的有效性

为了验证数值模拟的有效性, 对临界屏蔽板厚度、临界起爆距离、见证板变形情况的试验结果和数值模拟结果进行对比, 如表 4 所示。可见, 在接触爆炸试验中, 压装 TNT 临界起爆的屏蔽板厚度在 20~23 mm 之间, 仿真计算结果为 24.0 mm, 数值模拟结果与试验结果的相对误差不超过 16.7%。当屏蔽板采用 3 mm 厚的 45 钢时, 在非接触爆炸作用下压装 TNT 殉爆距离的试验结果在 12~15 mm 之间, 数值计算结果为 13.0 mm, 相对误差不超过 15.4%。数值计算结果与试验结果基本一致。

表 4 屏蔽装药冲击引爆试验和仿真计算结果
Table 4 Test and simulation results of shock initiation of covered charge

Explosion type	Test results		Simulation results	
	<i>d</i> /mm	Explosion situation	<i>d</i> /mm	Explosion situation
Contact explosion	20	Exploded	24.0	Exploded
	23	Unexploded	24.5	Unexploded
Explosion type	Test results		Simulation results	
	<i>h</i> /mm	Explosion situation	<i>h</i> /mm	Explosion situation
Non-contact explosion	12	Partial explosion	13.0	Exploded
	15	Unexploded	13.5	Unexploded

图 7 显示了 $h=10$ mm 时被发装药爆炸后数值模拟的见证板变形情况。被发装药爆炸后, 数值计算得到的 Q235 钢见证板的坑深为 3.80 mm, 凹坑直径为 42.0 mm, 而试验所得坑深为 4.20 mm, 直径为 40.0 mm。数值模拟结果与试验结果的相对误差不超过 9.52%, 二者基本一致。

3.2 屏蔽装药冲击起爆过程分析

为研究被发装药的冲击起爆过程, 以非接触爆炸为例分析被发装药的爆轰成长过程和熄爆过程。图 8 为数值计算得到的 $h=13.0$ mm 时炸药不同时刻的变形图。由图 8 可见: $t=8$ μ s 时, 主发炸药爆炸产生的冲击波刚好传到被发炸药上表面; $t=11$ μ s 时, 被发装药爆炸, 爆轰波由上向下传播; 16 μ s 以后, 炸药完全起爆, 见证板有明显的凹坑。图 9 显示了 $h=13.5$ mm 时炸药不同时刻的变形情况。由图 9 可见: $t=12$ μ s 时, 冲击波已传入被发装药一段时间, 但是由于冲击波压力较小, 并未引爆被发装药, 冲击波继续由上向下传播; 当 $t=16$ μ s 以后, 冲击波从非反射界面流出, 被发装药仍未爆炸, 只是由于爆轰产物膨胀和屏蔽板压缩发生了一定的变形, 且见证板也未出现任何变化。

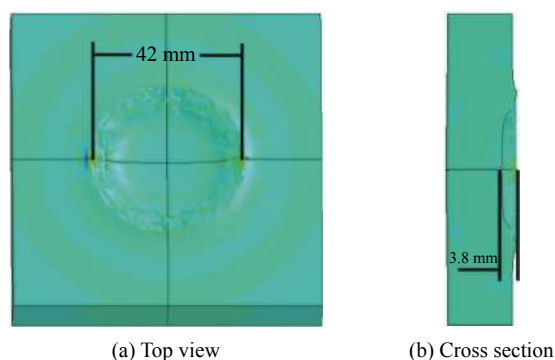


图 7 被发装药爆炸后见证板变形的数值模拟结果
Fig. 7 Numerical simulation results of witness plate deformation

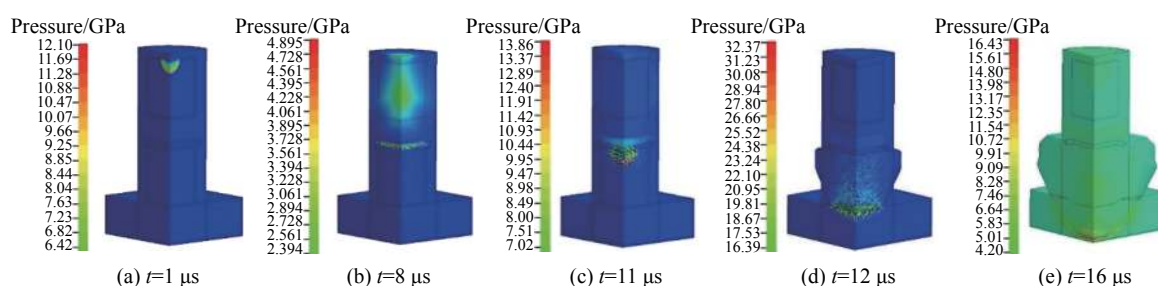


图 8 13.0 mm 距离下炸药不同时刻的变形

Fig. 8 Calculated pressure contours at various time for the configuration with 13 mm separation

图 10 和图 11 显示 h 分别为 13.0 和 13.5 mm 时被发装药的爆轰成长过程和熄爆过程, 图中 A~K 为被发装药的不同位置。对比图 10 和图 11 发现: $h=13.0$ mm 时, 被发装药表面所受冲击波压力达到 2.1 GPa 后, 炸药开始反应, 压力瞬间升高, 最高压力达到 9.8 GPa 左右; 随着爆轰的成长, 在距离炸药表面 22 mm 处, 最大压力达到 18 GPa, 并在以后的距离下基本保持稳定, 达到稳定爆轰状态。当 $h=13.5$ mm 时, 被发装药在受到峰值压力为 1.8 GPa 的冲击波作用时, 未发生任何反应, 在侧向和轴向稀疏波的共同作用下, 随着传播深度的增加, 压力逐渐衰减, 被发装药未爆炸。

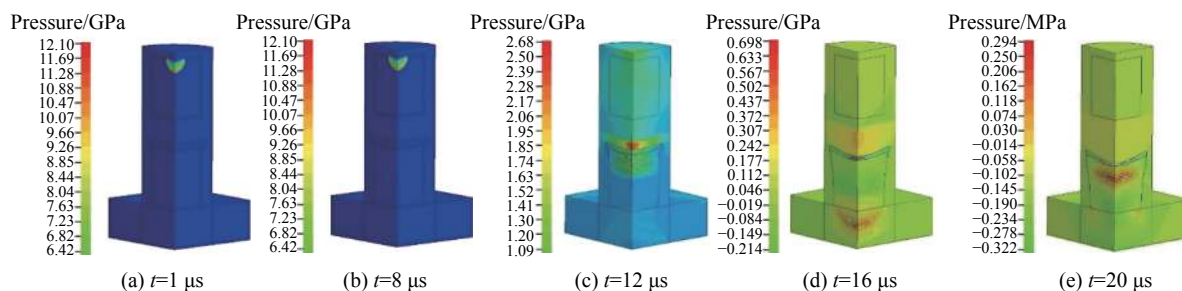


图 9 13.5 mm 距离下炸药不同时刻的变形

Fig. 9 Calculated pressure contours at various times for the configuration with 13.5 mm separation

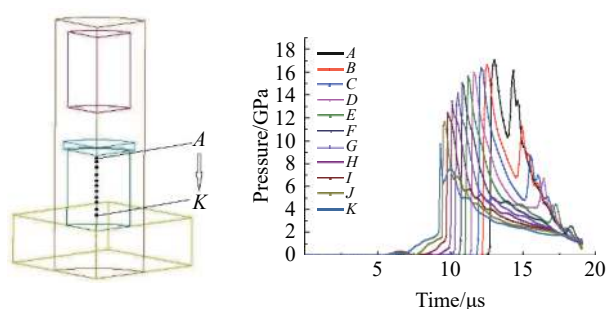


图 10 13.0 mm 间隔高度下被发装药的爆轰成长过程

Fig. 10 Detonation development process with spacing distance of 13.0 mm

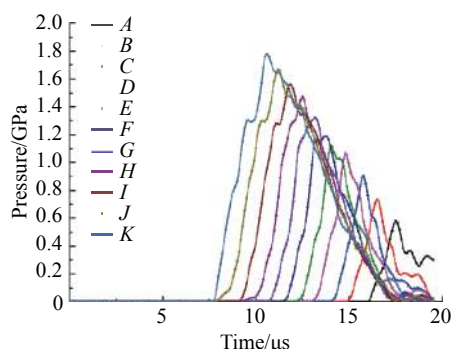


图 11 13.5 mm 间隔高度下被发装药的熄爆过程

Fig. 11 Extinguished process with spacing distance of 13.5 mm

对于不敏感炸药 TNT, 主要是由于爆轰产物的冲击使被发装药产生热点, 从而导致爆炸或爆轰。因此, 采用炸药临界起爆压力判据, 得到压装 TNT 炸药的临界起爆压力约为 2.1 GPa, 爆轰成长距离约为 22 mm。

3.3 不同屏蔽板厚度对屏蔽装药冲击引爆的影响

屏蔽板厚度对被发装药的冲击起爆起着关键作用。图 12 为屏蔽装药冲击引爆示意图。主发炸药爆炸后在空气中产生冲击波, 冲击波经过一段距离的传播到达屏蔽板, 在空气与屏蔽板的接触面上发生反射和透射, 由于空气的波阻抗小于屏蔽板的波阻抗, 因此在空气中反射冲击波, 并在屏蔽板内透射冲击波。当屏蔽板中的冲击波传播到屏蔽板与被发炸药界面处时, 由于被发炸药的波阻抗远小于屏蔽板的波阻抗, 在屏蔽板与被发炸药界面处冲击波产生卸载反射, 向屏蔽板反射稀疏波, 而向被发炸药透射冲击波。对于远场爆炸, 通过空气冲击波峰值超压的经验公式, 求得冲击波到达屏蔽板界面的冲击波参数; 再利用冲击波前后质量守恒、动量守恒和连续条件, 可求得进入被发装药的冲击波压力和质点速度; 最后, 根据炸药临界起爆压力判据, 判断被发装药是否起爆^[14]。对于近场爆炸, 由于主发装药与屏蔽板的距离太小, 爆轰产物的影响不可忽略, 目前尚无成熟理论和经验公式对冲击波衰减

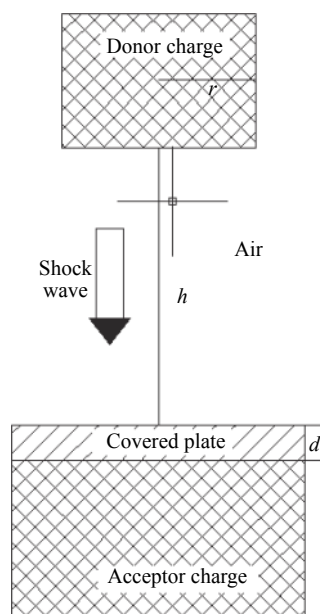


图 12 屏蔽装药冲击起爆示意

Fig. 12 Shock initiation of covered charge

后到达屏蔽板界面的冲击波参数进行求解, 因此无法通过理论计算得到进入炸药的冲击波压力以及屏蔽板厚度与殉爆距离之间的关系。为了分析近场非接触爆炸时屏蔽板厚度对殉爆距离的影响, 本研究结合试验数据, 通过非线性最小二乘法拟合得到二者的关系, 具体形式如下

$$(d+a)^m(h+b)^n=C \quad (3)$$

式中: d 为屏蔽板厚度 (mm), h 为殉爆距离 (mm), a 、 b 、 m 、 n 、 C 为表征冲击引爆的特性参数, 通过拟合图 12 中的数据得到各参数值: $a=4.45$, $b=1.83$, $m=3$, $n=1$, $C=8\ 033$ 。由 (3) 式可知, 随着屏蔽板厚度的增大, 殉爆距离呈幂指数衰减, 拟合得到的屏蔽板厚度与殉爆距离的函数关系可以很好地描述屏蔽板的防护特性以及殉爆距离对被发装药冲击引爆的影响。如图 13 所示, 当无屏蔽板时, 压装 TNT 的殉爆距离为 79 mm; 当屏蔽板厚度从 1 mm 逐渐加大到 9 mm 时, 屏蔽压装 TNT 的殉爆距离从 51 mm 降为 1.5 m, 屏蔽板对冲击波有显著的防护作用; 屏蔽板厚度在 3 mm 以内时, 厚度加大对冲击引爆效应的影响较大, 大于 3 mm 时, 进一步增大屏蔽板厚度对提高炸药抗冲击引爆能力的影响显著变小。

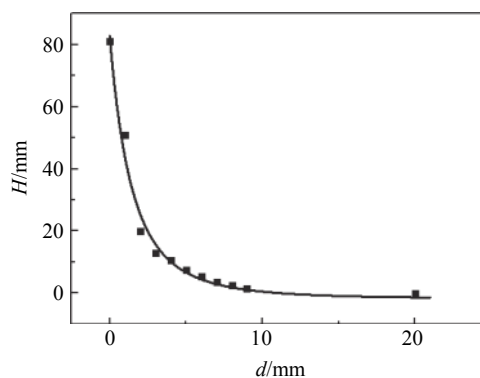


图 13 殉爆距离随屏蔽板厚度变化曲线

Fig. 13 Variation of sympathetic detonation distance with shield thickness

4 结 论

(1) 对于装药尺寸为 $\phi 35\text{ mm} \times 30\text{ mm}$ 的压装 TNT, 当屏蔽板为 45 钢时: 在接触爆炸作用下, 试验和数值模拟得到的临界起爆的屏蔽板厚度为 20~23 mm 和 24 mm, 相对误差小于 16.67%; 在非接触爆炸作用下, 实验得到的殉爆距离在 12~15 mm 之间, 数值模拟得到的临界殉爆距离为 13 mm, 与试验结果的相对误差小于 15.4%。数值计算结果与试验结果基本一致, 表明采用 ALE 算法的计算模型能够有效描述屏蔽装药冲击引爆试验。

(2) 本试验中, 压装 TNT 炸药的临界起爆压力约为 2.1 GPa, 爆轰成长距离约为 22 mm。

(3) 非接触爆炸条件下: 殉爆距离随着屏蔽板厚度的增加而减小; 当无屏蔽板时, 压装 TNT 的殉爆距离为 79 mm; 当屏蔽板厚度从 1 mm 逐渐加大到 9 mm 时, 屏蔽压装 TNT 的殉爆距离从 51 mm 降为 1.5 mm, 屏蔽板对冲击波有显著的防护作用。

(4) 通过非线性最小二乘法拟合得到屏蔽板厚度与殉爆距离的函数关系, 公式可以在一定范围内很好地描述屏蔽板的防护特性以及殉爆距离对被发装药冲击引爆的影响, 为屏蔽装药的冲击引爆试验研究和后续的可靠性研究提供一定的理论参考。

参考文献:

- [1] 徐松林, 阳世清, 李玉龙. 弹药与爆炸品的安全标准体系 [J]. *安全与环境工程*, 2012, 19(5): 85-89.
XU S L, YANG S Q, LI Y L. Safety standard system of ammunitions and explosives [J]. *Safety and Environmental Engineering*, 2012, 19(5): 85-89.
- [2] ROSENBERG Z, DEKEL E. Terminal ballistics [M]. Berlin: Springer, 2012.
- [3] 陈卫东, 张忠, 刘家良. 破片对屏蔽炸药冲击起爆的数值模拟和分析 [J]. *兵工学报*, 2009, 30(9): 1187-1191.
CHEN W D, ZHANG Z, LIU J L. Numerical simulation and analysis of shock initiation of shielded explosive impacted by fragments [J]. *Acta Armamentarii*, 2009, 30(9): 1187-1191.
- [4] 童宗保, 王金相, 彭楚才, 等. 预制破片对屏蔽炸药冲击引爆研究 [J]. *科学技术与工程*, 2014, 14(7): 173-177.

- TONG Z B, WANG J X, PENG C C, et al. Study on the initiation of shielded explosive impacted by prefabricated fragment [J]. *Science Technology and Engineering*, 2014, 14(7): 173–177.
- [5] 杨正才, 廖昕, 李晓刚, 等. 某隔板起爆器冲击起爆过程的数值模拟与实验研究 [J]. *含能材料*, 2011, 19(2): 221–225.
- YANG Z C, LIAO X, LI X G, et al. Numerical simulation and experimental investigation for shock initiation of bulkhead initiator [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2011, 19(2): 221–225.
- [6] 周杰, 何勇, 何源, 等. 含能毁伤元冲击引爆模拟战斗部试验研究 [J]. *含能材料*, 2016, 24(11): 1048–1056.
- ZHOU J, HE Y, HE Y, et al. Experimental study on shock initiation of simulative warhead by energetic kill element [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2016, 24(11): 1048–1056.
- [7] WALKER F E, WASLEY R J. Critical energy shock initiation of heteroporous explosive [C]//*Explosive Pyrotechnics*, 1968.
- [8] LU J P, LI J, KENNEDY D L. Simulation of sympathetic reaction rests for PBXN-109 [C]//*Proceedings of 13th Symposium (International) on Detonation*. New York, USA, 2006: 1338–1349.
- [9] 王晨, 伍俊英, 陈朗, 等. 壳装炸药殉爆实验和数值模拟 [J]. *爆炸与冲击*, 2010, 30(2): 152–158.
- WANG C, WU J Y, CHEN L, et al. Experiments and numerical simulations of sympathetic detonation of explosives in shell [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2010, 30(2): 152–158.
- [10] 时党勇, 李裕春, 张胜民. 基于 ANSYS/LS-DYNA8.1 进行显示动力分析 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2005.
- [11] 陈刚, 陈忠富, 陶俊林, 等. 45 钢的 Johnson-Cook 失效模型 [C]//*中国力学学会学术大会*, 2005.
- [12] 张磊. Q235 钢拉伸性能的有限元仿真与试验 [D]. 长春: 吉林大学, 2012.
- [13] 蒋国平. 非均质凝聚炸药二维冲击起爆实验与 Lagrange 分析研究 [D]. 长沙: 湖南大学, 2005.
- [14] 北京工业学院八系. 爆炸及其作用 (上) [M]. 北京: 国防工业出版社, 1982.

Experimental and Numerical Study of Shock Initiation of Covered TNT by Near-Field Shock Wave

CHEN Xingwang¹, WANG Jinxiang¹, TANG Kui¹, CHEN Riming², ZHOU Lian², HAO Chunjie³

(1. *National Key Laboratory of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China;*

2. China North Vehicle Research Institute, Beijing 100072, China;

3. Jinxi Industries Group Co. Ltd., Taiyuan 030027, China)

Abstract: In this study we analyzed the shock initiation process of covered TNT using experiments and LS-DYNA3D to study the damage effect of the near-field strong shock wave on the covered charge. We obtained the critical thickness of the covered plate for detonating TNT during contact explosion and the sympathetic detonation distance of the covered TNT during non-contact explosion and the relation between the covered plate thickness and the distance of the explosion using the non-linear least square method. The results show that the numerical simulation results accord well with the experimental results. The sympathetic detonation distance of the covered-pressed TNT in non-contact explosion ranges from 12–15 mm when the thickness of the 45 steel covered plate is 3 mm. The critical thickness of the covered plate is between 20 and 23 mm for the pressed TNT ignited by contact explosion. The sympathetic detonation distance of the non-contact explosion decreases as the covered plate thickness increases. Without a covered plate, the sympathetic detonation distance is 79 mm. When the thickness of the covered plate increases from 1 mm to 5 mm, the sympathetic detonation distance reduces from 51 mm to 1.5 mm. The thickness of the covered plate is of great importance for the protection against shock waves.

Keywords: covered charge; shock initiation; near-field shock wave; sympathetic detonation distance

金属隔层对同轴双元装药爆轰波形及驱动性能的影响

沈飞, 王辉, 罗一鸣

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 根据同轴双元组合装药的实际应用工况, 制备了两种组分及尺寸均相同的装药试样, 其中一种试样的内、外层装药间设有薄壁铝隔层。采用脉冲X射线摄影法观测了铝隔层在装药爆轰过程中的膨胀轨迹, 并通过高速扫描法及圆筒试验分别对比了两种装药爆轰波形及驱动性能的差异。结果表明: 由于铝的冲击阻抗与炸药爆轰阻抗较为接近, 因此冲击波穿越铝隔层时未产生较强的反射效应, 从而未明显改变组合装药的爆轰波形; 而在爆轰产物的膨胀过程中, 当其相对比容小于3.0时, 铝隔层可将内、外层装药的爆轰产物有效隔离, 但并未降低整体装药的驱动性能, 两种试样的圆筒比动能之比逐步趋近于有效装药的质量比。

关键词: 组合装药; 金属隔层; 爆轰波形; 圆筒试验; 驱动性能; 闪光X射线摄影

中图分类号: O389; TJ55

文献标识码: A

同轴内外层双元组合装药是一种工程中常见的装药方式, 早期主要采用不敏感炸药包覆高能炸药的方式提高整体装药对各类危险刺激的不敏感性^[1]。近年来, 国内外一些研究人员尝试采用高爆速炸药包覆高爆热炸药的方式调节整体装药的能量释放特性^[2], 即利用内、外层装药的爆速差形成聚心爆轰波形, 使内层装药产生超压爆轰^[3-4], 进而可能提升反应速率^[4-6]。虽然这方面的机理研究目前仍较少, 但工程上已进行了较多的应用, 且爆炸作用效果在一些方面具有优势。如 Arthur^[7]、尹俊婷^[8]等将该类组合装药应用于杀爆战斗部中, 以兼顾破片速度和冲击波超压两方面的性能优势; 牛余雷等^[9]对该类组合装药进行水下爆炸实验, 发现冲击波传播过程的能量损失比单一装药明显减小。

这类组合装药常采用不同成型工艺或配方体系的炸药进行组合, 为了确保制备过程的安全及便利, 在内、外层装药之间增设较薄的金属隔层, 如薄壁铝筒隔层等。由于金属隔层的冲击阻抗与炸药差异较大, 可能会影响组合装药的爆轰波形, 且一些金属的延展性较好, 在爆轰过程中若不能马上破裂, 则可能阻碍内、外层装药爆轰产物的快速混合, 使铝粉在高温高压条件下不能获得更多的氧元素, 从而不利于无氧燃烧阶段的充分释能。而对于这些问题, 目前并未见到相关研究报道。因此, 本研究制备了两种组分和尺寸均相同的同轴双元组合装药试样, 其中一种试样含有薄壁铝隔层, 通过爆轰波形扫描试验及圆筒试验分别对比两种试样的爆轰波形及圆筒比动能, 并采用脉冲X射线观测爆轰过程中薄铝隔层的膨胀轨迹, 从而系统分析铝隔层对组合装药爆轰性能的影响规律, 以期为该装药的工艺设计及优化提供依据。

* 收稿日期: 2018-04-22; 修回日期: 2018-06-05

基金项目: 国防技术基础研究计划(JSJL2016208A011)

作者简介: 沈飞(1983—), 男, 硕士, 副研究员, 主要从事炸药爆轰性能实验及理论研究。

E-mail: shenf02@163.com

通信作者: 王辉(1977—), 男, 硕士, 副研究员, 主要从事炸药爆轰性能实验及理论研究。

E-mail: land_wind@163.com

1 实验样品

实验样品为同轴内外层组合圆柱体(如图 1 所示),每节药柱的尺寸均为 $\phi 50\text{ mm} \times 100\text{ mm}$,内、外层装药均采用熔铸成型工艺制备。外层装药采用高爆速炸药 DOL 制备,内层装药采用高爆热炸药 DRLU 制备(配方及参数见表 1),内、外层装药的质量比约为 1。实验样品包含 A 和 B 两种,样品 A 中不含有铝隔层,内层装药的直径为 35 mm;样品 B 中含有铝隔层,内层装药的直径为 34 mm,铝隔层的壁厚为 0.5 mm;当两种样品的长度相同时,样品 B 中的有效装药量相当于样品 A 的 97.2%。



图 1 组合装药结构

Fig. 1 Structure of composite charge

表 1 炸药配方及参数

Table 1 Formulation and parameters of explosives

Explosive	Mass fraction	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$D_{\text{CJ}}/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$Q/(\text{kJ} \cdot \text{g}^{-1})$
DOL	30 : 60 : 5 : 5 (DNTF : HMX : Al : binder)	1.84	8.65	6.56
DRLU	15 : 35 : 20 : 30 (DNAN : RDX : AP : Al)	1.88	6.84	8.19

2 金属隔层对组合装药爆轰波形的影响

组合装药爆轰波形演变至稳定状态需要较长的距离,这不仅与内、外层装药的爆速差有关,还受结构尺寸等因素的影响。本研究中仅需对比两种试样爆轰波形演变过程中的差异,其所获波形并不一定为稳态波形,因此只要求样品 A 和样品 B 的尺寸相同。采用一节 $\phi 50\text{ mm} \times 100\text{ mm}$ 的药柱为实验主装药,药柱的起爆端粘接 $\phi 50\text{ mm}$ 的平面透镜,使内、外层装药的起始波形相同,并通过 SJZ-15 型转镜式高速扫描相机获取药柱尾部端面的爆轰波形,实验布局如图 2 所示。扫描爆轰波形时,相机的光学狭缝通过高清晰反射镜对准主装药端面的直径,相机扫描速度设定为 6 km/s。

图 3 为样品 B 的爆轰波形,其中虚线标识为铝隔层所对应的位置,不含有铝隔层的样品 A 的爆轰波形与样品 B 极为相似。结合图像放大比及相机的扫描速度可获得图 3 中波形的具体曲线数据。由于波形关于装药轴线对称,为了便于表示,图 4 中仅列出了轴心至装药半径 R 处的波形曲线(判读时,相邻数据点纵坐标的差值恒定)。图 4 中 $t = 0$ 时刻为爆轰波最早到达药柱端面的时刻,该位置处于外层装药 $R \approx 21.4\text{ mm}$ 处。从图 4 可以看出:样品 A 和样品 B 的爆轰波形曲线整体偏差较小,主要差异仅局限于内层装药 $R < 7.5\text{ mm}$ 区域;而铝隔层附近($R \approx 17.5\text{ mm}$)两条曲线吻合较好,说明冲击波穿越铝隔层时未产生较强的反射效应,可能是铝的冲击阻抗(即铝的密度与声速的乘积,约为 $1.44 \times 10^6\text{ g}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})^{[10]}$)与炸药爆轰

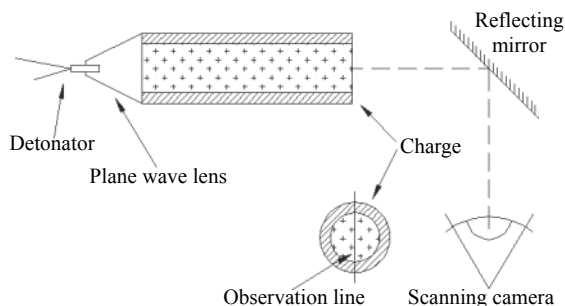


图 2 爆轰波形扫描实验装置示意图

Fig. 2 Schematic of scanning test of detonation wave shape

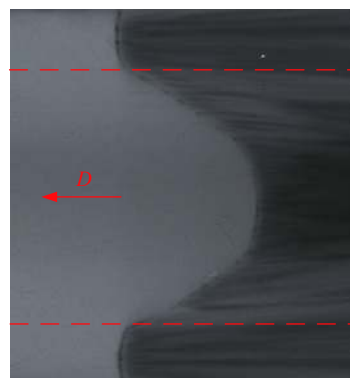


图 3 样品 B 的爆轰波形扫描底片

Fig. 3 Photographs of detonation wave shape of sample B

阻抗(即炸药密度与爆速的乘积, DOL 炸药的爆轰阻抗约为 $1.55 \times 10^6 \text{ g}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$)较为接近所致。此外,从图 4 中还可看出,爆轰波到达装药中心处($R=0$)的时刻较外层装药滞后约 $1 \mu\text{s}$,结合试样长度及 DOL 炸药的爆速可估算出,装药中心附近爆轰波的传播速度约为 7.9 km/s ,而在 $7.5 \text{ mm} < R < 17.5 \text{ mm}$ 区域爆轰波的传播速度更高。这表明内层装药的爆速较 DRLU 炸药的 CJ 爆速具有较大幅度的提升,呈现出明显的超压爆轰特征,从而显著提升爆轰反应区内的能量释放速率^[6]。

3 金属隔层动态膨胀及破裂特性

图 3 所示的聚心爆轰波不仅能为内层装药中的铝粉提供更高压力和温度的无氧燃烧环境,还能促使外层装药的爆轰产物向内聚集,为铝粉提供更多的氧元素,使其释放出更多的能量^[11],从而提升整体装药的驱动能力。因此,铝隔层是否会对内、外层装药爆轰产物造成隔离便显得尤为关键。本研究将通过脉冲 X 射线摄影技术对组合装药爆轰过程中铝隔层的运动状态进行观测。图 5 为该实验的布局示意。

图 6 为脉冲 X 射线观测样品 B 爆轰过程时所获底片,从中可以看出,此时该装药的爆轰波还未传播完毕,且铝隔层的轮廓较为光滑,未见明显碎渣(底片左侧边缘的竖向条纹为洗相过程中意外刮擦所致,且离铝隔层较远,故认为这不是铝隔层的碎片),因此可认为铝隔层此时破裂的可能性较小。为便于定量描述铝隔层的运动轨迹,设定装药轴向为 x 轴,原点为装药的起爆端,半径方向为 y 轴,则可获得铝隔层的膨胀轨迹,如图 7 所示。从图 7 中可以看出: $18 \text{ mm} < x < 50 \text{ mm}$ 区域近似为直线段,可计算出其斜率的绝对值 $k = -dy/dx \approx 0.257$; $x > 62 \text{ mm}$ 时,铝隔层仍位于初始位置 $y_0 = 17.5 \text{ mm}$,表明爆轰波未到达该区域;设爆轰波到达的位置为 x_0 ,则不同位置处铝隔层已膨胀的时间 $t = (x_0 - x)/D$,因此,可计算出铝隔层的径向膨胀速度 v

$$v = \frac{dy}{dt} = \frac{dy}{d\left(\frac{x_0 - x}{D}\right)} = -\frac{dy}{dx} \cdot D = D \cdot k \quad (1)$$

式中: D 可近似取 DOL 炸药的爆速,即 $D \approx 8.65 \text{ km/s}$,则 $v \approx 2.2 \text{ km/s}$ 。此外,图 7 中 $x < 18 \text{ mm}$ 区域的斜率明显偏低,则该区域铝隔层的径向膨胀速度 v 也偏低,可能是装药端部的稀疏波所致。

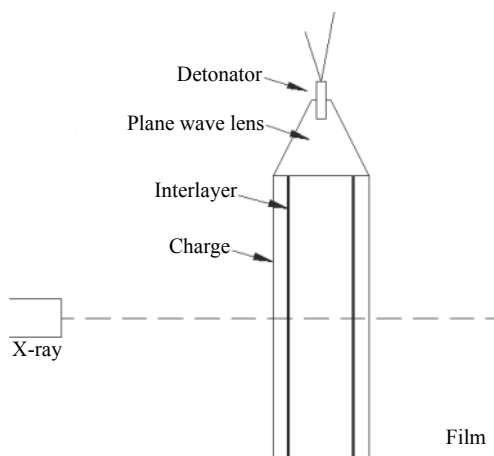


图 5 脉冲 X 射线摄影实验布局

Fig. 5 Experiment layout of pulsed X-ray photography

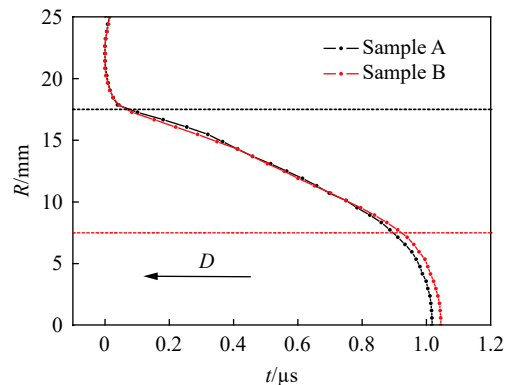


图 4 爆轰波形曲线

Fig. 4 Detonation wave shape

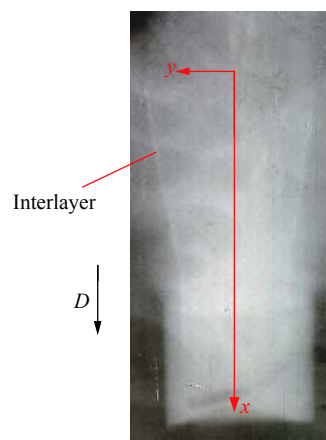


图 6 脉冲 X 射线摄影所获底片

Fig. 6 Experimental film obtained by pulsed X-ray photography

综合该实验的分析可以看出,铝隔层的径向膨胀速度为 2.2 km/s 时,其半径 y 由 17.5 mm 膨胀至 30.0 mm 时,未发现明显破裂。若根据爆轰产物相对比容 $v = (y/y_0)^2$ 进行估算,则可认为在内层装药爆轰产物的相对比容 $v > 3.0$ 之前,铝隔层能有效隔离内、外层装药的爆轰产物。

4 金属隔层对组合装药驱动性能的影响

本研究采用圆筒试验表征装药的驱动性能,其装置如图 8 所示。圆筒壁的材料为 TU1 无氧铜,密度为 8.93 g/cm³,内、外直径分别为 50.0 和 60.2 mm;狭缝扫描位置距圆筒尾端约 200 mm,相机扫描速度设定为 1.5 km/s;电探针粘贴在装药截面的边缘处,可获得该组合装药的外层装药在圆筒内的平均爆速 D^* 。根据 GJB 8381—2015^[12] 中的实验数据处理方法,可获得圆筒壁质量中心面的半径 r_m 随时间 t 的变化曲线,并按照(2)式对该曲线进行拟合

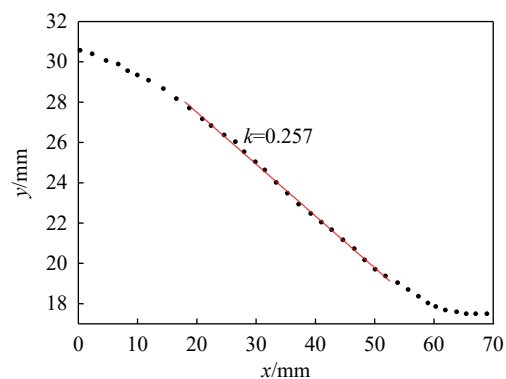


图 7 铝隔层的膨胀轨迹

Fig. 7 Expansion track of aluminum interlay

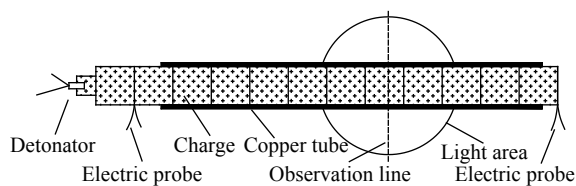


图 8 圆筒试验装置示意

Fig. 8 Schematic diagram of the cylinder test

$$r_m - r_{m0} = \sum_{j=1}^2 a_j \left\{ (t + t_0) - \frac{1}{b_j} [1 - e^{-b_j(t+t_0)}] \right\} \quad (2)$$

式中: $r_{m0} = \sqrt{(r_{e0}^2 + r_{i0}^2)/2}$ 为 r_m 的初始值, r_{i0} 和 r_{e0} 分别圆筒壁的初始内、外半径; a_j 、 b_j 、 t_0 均为拟合参数。曲线拟合参数的具体值及 D^* 的测量值均列于表 2 中。

表 2 圆筒壁膨胀位移曲线拟合参数

Table 2 Curve-fitting parameters of the expansion displacement of cylinder wall

Sample	$D^*/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$a_1/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$b_1/\mu\text{s}^{-1}$	$a_2/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$b_2/\mu\text{s}^{-1}$	$t_0/\mu\text{s}$
A	8.610	1.211 04	0.110 96	0.506 19	0.382 02	1.628 99
B	8.624	1.119 78	0.111 27	0.570 49	0.421 29	1.441 05

根据表 2 中的数据可计算出圆筒质量中心面的质点速度 u_s

$$u_s = 2D^* \cdot \sin \left[\frac{\arctan(u_m/D)}{2} \right] \quad (3)$$

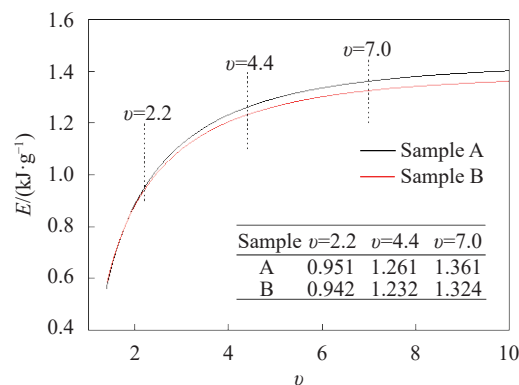
式中: $u_m = \sum_{j=1}^2 a_j [1 - e^{-b_j(t+t_0)}]$ 。从而可获得圆筒的比动能 $E = u_s^2/2$ 。爆轰产物的相对比容 v 的计算公式为^[13]

$$v = \left(\frac{r_i}{r_{i0}} \right)^2 = \frac{r_m^2 - (r_{e0}^2 - r_{i0}^2)/2}{r_{i0}^2} \quad (4)$$

则可获得 $E-v$ 曲线,如图 9 所示。

从图 9 中可以看出,随着爆轰产物相对比容 v 的增大,两种试样的圆筒比动能差距逐渐增大,然后趋于稳定。为了进行更详细的对比分析,可由 $v=2.2, 4.4, 7.0$ 三个位置描述爆轰产物在高压、中压、低压作用阶段的特征^[14]。当 $v < 2.2$, 即爆轰产物处于高压阶段时,两种试样的圆筒比动能曲线几乎重合,表明在该阶段铝隔层对装药的驱动性能几乎没有影响,这可能是由于此时圆筒壁的加速主要依靠冲击波的驱动力^[14](取决于外层装药的性能)。随着 v 的增大,爆轰产物进入中压驱动阶段,虽然样品 B 中的铝隔层可在 $v < 3.0$ 时有效隔离内、外层装药的爆轰产物,但其圆筒比动能相对于样品 A 并没有呈现出

明显的差异;当 $v=4.4$ 时,其圆筒比动能约为样品A的97.7%,仍略大于两种试样有效装药量的比值。这表明在该阶段,内、外层装药爆轰产物的快速混合并不能显著提升能量的释放速率。当 $v=7.0$ 时,样品B的圆筒比动能约为样品A的97.3%,与两种试样有效装药量的比值基本一致,由于此时一般认为爆轰产物的驱动能量已达到最大值^[15],因此,可认为本研究中的铝隔层对同轴双元组合装药的驱动性能没有产生明显影响,但是否与装药的尺寸以及两种炸药的选择有关,还需要后续进一步深入研究。

图9 $E-v$ 曲线Fig. 9 $E-v$ curves

5 结 论

(1)在该同轴双元组合装药中,内、外层装药间增设薄壁铝隔层后,装药的爆轰波形未发生明显改变,这可能是由于铝的冲击阻抗与炸药爆轰阻抗较为接近,使冲击波穿越铝隔层时未发生较强的反射效应所致。

(2)根据脉冲X射线摄影实验结果,该组合装药在爆轰过程中,铝隔层的径向膨胀速度为2.2 km/s时,其半径由17.5 mm膨胀至30.0 mm,未发现明显破裂,故可认为内层装药爆轰产物的相对比容小于3.0时,铝隔层能有效隔离内、外层装药的爆轰产物。

(3)当 $v < 2.2$,即爆轰产物处于高压阶段时,两种试样的圆筒比动能曲线几乎重合;当 $v=4.4$ 和 $v=7.0$ 时,增设铝隔层的组合装药的圆筒比动能分别约为无铝隔层时的97.7%和97.3%,接近两种试样有效装药量的比值。因此,增设薄壁铝隔层以提升组合装药制备工艺的效率及安全性时,不会对装药的驱动性能产生明显影响。

参考文献:

- [1] NOUGUEZ B. Dual formulation warheads: a mature technology [C]//Processing of Insensitive Munitions Technology Seminar. Williamsburg, 1996.
- [2] 彭翠枝, 范夕萍, 任晓雪, 等. 国外火炸药技术发展动向分析 [J]. 火炸药学报, 2013, 36(3): 1-5.
PENG C Z, FAN X P, REN X X, et al. Analysis on recent trends of foreign propellants and explosives technology development [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2013, 36(3): 1-5.
- [3] HELD M. Detonation behaviour of adjacent high explosive charges with different detonation velocities [C]//13th Symposium (International) on Detonation, 2006.
- [4] 沈飞, 王辉, 罗一鸣. DNTF基同轴双元装药的爆轰波形及驱动性能 [J]. 含能材料, 2018, 26(7): 614-619.
SHEN F, WANG H, LUO Y M. Detonation wave-shape and driving performance of coaxial binary charge of DNTF-based aluminized explosives [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2018, 26(7): 614-619.
- [5] 周涛, 程淑杰, 王辉, 等. DNTF基含铝炸药复合装药的驱动特性 [J]. 火炸药学报, 2015, 38(5): 46-50.
ZHOU T, CHENG S J, WANG H, et al. Research on driving characteristic for compound charge of DNTF-based aluminized explosive [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2015, 38(5): 46-50.
- [6] ARTHUR S, JOHN C. Blast and fragmentation enhancing explosive: US 5996501 [P]. 1999-12-07.
- [7] ASLAM T D, BDZIL J B, STEWART D S. Level set methods applied to modeling detonation shock dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1996, 126(2): 390-409.
- [8] 尹俊婷, 蔚红建, 栗宝华, 等. 金属加速炸药/高爆热炸药复合装药爆炸特性研究 [J]. 火工品, 2015(3): 33-37.
YIN J T, YU H J, LI B H, et al. Explosion characteristic of metal accelerating explosive/high detonation heat explosive composite charge [J]. Initiators & Pyrotechnics, 2015(3): 33-37.

- [9] 牛余雷, 王晓峰, 余然. 二元复合炸药装药水下爆炸能量输出特性 [J]. *含能材料*, 2009, 17(4): 415–419.
NIU Y L, WANG X F, YU R. Characteristic of energy output of underwater explosion for dual explosive charge [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2009, 17(4): 415–419.
- [10] 周涛, 沈飞, 王辉. 预制破片与轻质壳体阻抗匹配对破片初速及完整性的影响 [J]. *高压物理学报*, 2018, 32(4): 045104.
ZHOU T, SHEN F, WANG H. Influence of impedance matching between prefabricated fragments and light shell on initial velocity and completeness of fragments [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2018, 32(4): 045104.
- [11] CHAN S K. Reaction delay of aluminum in condensed explosives [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2014, 39(6): 897–903.
- [12] 炸药圆筒试验光学扫描和激光干涉联合测试方法: GJB 8381-2015 [S]// 中华人民共和国国家军用标准, 2015.
- [13] LINDSAY C M, BUTLER G C, RUMCHIK C G, et al. Increasing the utility of the copper cylinder expansion test [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2010, 35(5): 433–439.
- [14] 沈飞, 王辉, 袁建飞, 等. 铝含量对 RDX 基含铝炸药驱动能力的影响 [J]. *火炸药学报*, 2013, 36(3): 50–53.
SHEN F, WANG H, YUAN J F, et al. Influence of Al content on the driving ability of RDX-based aluminized explosives [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2013, 36(3): 50–53.
- [15] MARK S, SCOTT I J. Dynamics of high sound-speed metal confiners driven by non-ideal high-explosive detonation [J]. *Combustion and Flames*, 2015, 162: 1857–1867.

Influence of Metal Interlayer on Detonation Wave-Shape and Driving Characteristics of Designated Inner/Outer Composite Charge

SHEN Fei, WANG Hui, LUO Yiming

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: Two charge samples of same composite and shape, but one with and the other without an aluminum interlayer, were prepared following the designated inner/outer composite charge. The expansion process of the aluminum interlayer was determined by X-ray technology, and the difference in the driving capability between the two charges were compared using the high speed scanning and the cylinder test. The results show that the detonation wave does not change obviously due to the similar impedance. The detonation products of the inner and outer charges can be divided by the interlayer when the relative specific volume is below 3.0. However, the driving ability is not affected and the ratio of the specific kinetic energy of the two charges is gradually close to the ratio of the two effective charging masses.

Keywords: composite charge; metal interlayer; detonation wave-shape; cylinder test; driving capability; X-ray photography