

我国高压物理领域

唯一专业期刊

高压物理学报

CHINESE JOURNAL OF HIGH
PRESSURE PHYSICS

炸药起爆及安全性

2018

中国物理学会 主办
高压物理专业委员会

高压物理学报

GAOYA WULI XUEBAO

1987 年 9 月创刊

2018 年主题专刊

· 炸药起爆及安全性 ·

目 次

TATB 在高温下分解的动力学模拟	余 一, 张 蕾, 姜胜利, 陈 军
桌面式激光驱动冲击波技术及其在含能材料分子反应机制研究中的应用	宋云飞, 郑朝阳, 吴红琳, 郑贤旭, 吴 强, 于国洋, 杨延强
HNS-IV 炸药的短脉冲冲击起爆判据	郭俊峰, 曾庆轩, 李明愉, 喻青霞
JB-9014 钝感炸药冲击 Hugoniot 关系测量	刘俊明, 张 旭, 裴红波, 舒俊翔, 覃 双, 钟 斌, 张 蓉
RDX 基含铝炸药三波点高度的数值模拟	段晓瑜, 郭学永, 聂建新, 王秋实, 焦清介
铝粉粒径对温压炸药爆炸性能及热安定性的影响	王明烨, 韩志伟, 李 席, 王伯良
弹黏塑性热点模型的冲击起爆临界条件	覃锦程, 裴红波, 李星翰, 张 旭, 赵 锋
带舱大型战斗部跌落响应数值分析	李广嘉, 周 涛, 曹玉武, 栗保华
一种隔热弹衣对弹体装药反应的影响	王洪波, 牛公杰, 钱立新, 魏雪婷, 卢永刚, 路中华, 张中礼, 张 鹤
《高压物理学报》2018 年主题专刊名录	《高压物理学报》编辑部
2018 年“炸药起爆及安全性”主题专刊论文引用信息	封 三



官方网站: www.gywlxb.cn

官方邮箱: gaoya@caep.cn

联系电话: 0816-2490042

TATB 在高温下分解的动力学模拟^{*}

余 一¹, 张 蕾^{1,2}, 姜胜利¹, 陈 军^{1,2}

(1. 中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088;

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: TATB 作为一种知名的钝感炸药, 其敏感度和反应特性一直是含能材料研究领域的热点问题。采用从头算分子动力学方法, 系统模拟了 TATB 在不同温度、压力以及含有黏结剂情况下的分解反应过程, 并逐个分析这些因素对反应机理和反应速率的影响。结果显示: 不同温度下反应机理基本保持不变, 但反应速率受温度的影响较大; 压力对反应前、后期有不同的影响; 对于含有氟聚物黏结剂的体系, 氟聚物会参与 TATB 的分解, 并改变最终产物的组分。

关键词: TATB; 热分解; 从头算分子动力学; 黏结剂

中图分类号: O643.13; O521.2

文献标识码: A

自 13 世纪黑火药应用到军事领域以来, 制造更低敏感度及更高做功能力的炸药一直是高能材料研究领域最大和最重要的挑战之一。1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯(TATB, 晶体及分子结构见图 1)是目前唯一被美国能源部批准可单独应用于核武器的单质炸药, 对撞击和摩擦极其钝感。鉴于其极低的敏感度以及相对优秀的爆炸性能, 国内外相继开展并积累了大量针对 TATB 敏感度和反应特性的研究工作, 其中既有电子结构^[1-4]、力学性能^[5-9]等静力学性质的相关研究, 也有热分解/冲击分解机理^[10-11]、爆轰行为^[12]等动力学性质研究以及以 TATB 为基的复合炸药性质研究^[9]。在这些研究中, 对工程预测 TATB 爆轰性能^[13]十分重要的反应动力学性质研究仍处于初级阶段。

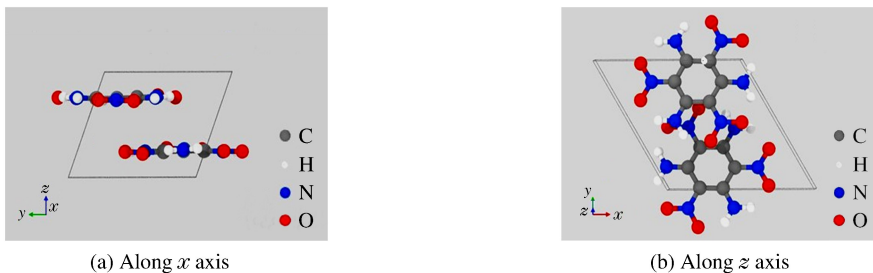


图 1 TATB 晶体结构

Fig. 1 Crystal structure of TATB

现有的 TATB 反应动力学研究主要包括热刺激或高速冲击下的初始分解机理研究^[10,14-16]、反应中碳团簇的形成及演化机理研究^[11,17-18]。在初始热分解机理问题上, 通过热分解实验得到的初期反应过程与通过模拟计算反应能垒所预测的结果基本一致。然而在分解反应后期或爆轰条件下, 反应路径数

* 收稿日期: 2017-07-21; 修回日期: 2017-08-28

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFB0700801)

作者简介: 余 一(1986—), 男, 博士, 助理研究员, 主要从事含能材料反应动力学数值模拟研究。

E-mail: yu_yi@iapcm.ac.cn

通信作者: 陈 军(1969—), 男, 博士, 研究员, 主要从事爆轰物理及高能炸药反应机理数值模拟研究。

E-mail: jun_chen@iapcm.ac.cn

目和反应速率明显增加,无论实验还是理论计算都很难有效地检测其每一步的反应机理及演化过程,因此到目前为止仍没有一个明确的认识。为了更深入地了解 TATB 在爆轰条件下的反应过程,本研究从外部反应条件入手,采用计算模拟方式研究 TATB 在高温下的固相分解,综合分析温度、压力以及黏结剂等因素对反应机理和反应速率的影响。

1 计算方法及模型

为保证计算精度,所有动力学模拟均采用从头算分子动力学方法,计算程序为北京应用物理与计算数学研究所含能材料团队自主研发的第一性原理软件包 HASEM^[19]。该计算程序采用原子轨道组合(LCAO),利用密度泛函理论方法计算能量。在 0 K 下经优化得到 TATB 晶格参数,如表 1 所示,其中 a 、 b 、 c 分别为晶胞 3 个轴的长度, α 、 β 、 γ 为晶轴之间的夹角。除了 c 有 5% 的相对误差之外,其他晶格参数与实验值的相对误差均在 1% 以内。

表 1 TATB 晶格参数

Table 1 Lattice parameters of TATB

Method	a/nm	b/nm	c/nm	$\alpha/(^{\circ})$	$\beta/(^{\circ})$	$\gamma/(^{\circ})$
HASEM	0.909	0.901	0.648	107.79	91.80	119.88
Experiment ^[20]	0.901	0.903	0.681	108.59	91.82	119.97

整个模拟工作主要分为 3 部分:(1) 相同初始压力(0 GPa)、不同温度下的反应动力学过程模拟,模拟温度分别为 2500、3000、3500 和 4000 K;(2) 相同温度(2500 K)、不同密度(不同初始压力)下的反应过程模拟,通过改变晶体密度实现对不同压力下反应进程的模拟,所采用的体系密度为 $0.8d_0$ 、 $1.2d_0$ 和 $1.3d_0$ (d_0 为晶体在常压、0 K 下的密度);(3) 相同压力(0 GPa)、不同温度条件下带有黏结剂的反应过程模拟,模拟温度为 2500、3000 和 3500 K。在实际应用中,黏结剂是炸药的重要组成成分,本研究主要考虑以 TATB 为基、氟聚物为黏结剂的复合炸药体系。目前投入使用的 PBX-9502 聚合物炸药的组成成分为:TATB(质量分数为 95%)、F23xx 系列氟聚物黏结剂(质量分数为 5%)。据此构建了 TATB 质量分数为 86.7% 的 TATB-F2312 复合体系并进行模拟,如图 2 所示,其中氟聚物均匀分布于晶体 c 面,分布方式满足晶体的周期性边界条件,以使 F2312 分子相互连接。所有模拟均采用 NVT 正则系综(等温等体积),模拟晶胞大小为 $2 \times 2 \times 2$,共包含 16 个 TATB 分子。为了考察晶格尺寸效应对反应过程的影响,特别构建一个晶胞大小为 $2 \times 3 \times 4$ 的纯 TATB 模型(共 48 个 TATB 分子)进行验证计算,模拟时也采用 NVT(等温等体积)系综,模拟温度为 3500 K,初始压力为 0 GPa。

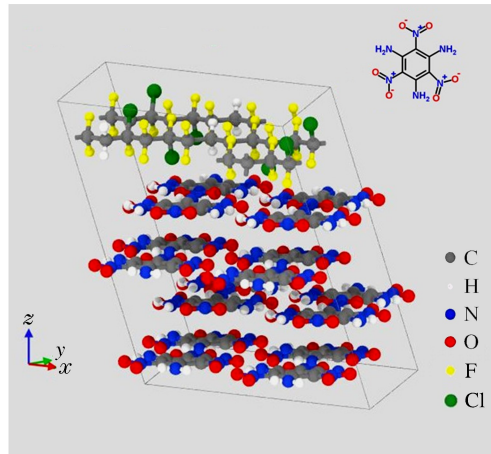


图 2 带有 F2312 黏结剂的 TATB 模型

Fig. 2 Model of TATB with F2312 molecule

2 计算结果与讨论

2.1 TATB 分解机理

Wu 等^[20]指出 TATB 分解过程的第一步是质子转移和 C—NO₂ 键断裂。本研究采用团簇分析方法,统计了几种主要中间产物及成键的数量随时间的变化,如图 3 所示。从最早生成的产物 NO₂、NO 和 H₂O 以及 N—H 键、N—O 键的变化可以确认,在 TATB 反应初期质子转移和 C—NO₂ 键断裂确实

是最先发生的。在后续的变化中可以看到,主要的气态产物为 N_2 、 CO_2 以及 H_2O ,其中 N_2 和 CO_2 的形成均伴随着 NO_2 和 H_2O 的消耗。下面就 H_2O 、 N_2 和 CO_2 这 3 种主要产物的生成机制进行详细的说明。

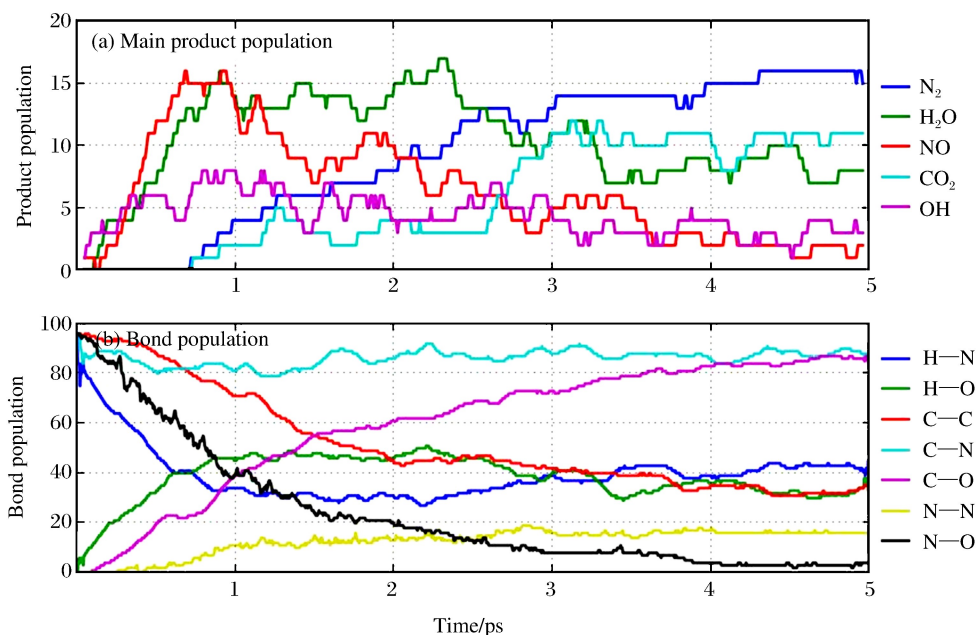


图 3 3500 K 下 TATB 分解的主要产物和原子间成键数演化曲线((a)主要产物数目;(b)原子间成键数)

Fig. 3 Main products and bond population curves of TATB decomposition at 3500 K

((a) Main product population;(b) bond population)

2.1.1 H_2O 的形成

H_2O 是 TATB 分解过程中最早生成的最终产物,其中的 H 来源于整个反应过程中最先发生的质子(H)转移。氨基($-\text{NH}_2$)中的 H 首先脱落,转移到邻近的亚硝基($-\text{NO}_2$)上与 O 结合,形成 OH^- 基团。H 转移可以细分为分子内转移和分子间转移,其中最先观察到分子内转移,其次为分子间转移。由于 TATB 特殊的层状堆积结构,分子间 H 转移还可以细分为层内分子间转移和层间分子间转移。虽然层间转移所需移动的距离更远,但在实际模拟中发现层间 H 转移与层内 H 转移的概率相差不大。这主要受氢键的影响: $-\text{NH}_2$ 与 $-\text{NO}_2$ 基团之间存在较强的相互作用,在热运动下层间分子会相对运动,加之 $\text{C}-\text{NO}_2$ 和 $\text{C}-\text{NH}_2$ 键的旋转,层间分子的相对距离明显缩短,为层间分子间的 H 转移创造了条件。H 转移会产生 OH^- ,而 $\text{OH}^- + \text{H}^+ \longrightarrow \text{H}_2\text{O}$ 很容易进行,因此 H_2O 自然成为所有产物中最先生成的物质。

2.1.2 N_2 的形成

与 H 转移过程同时发生的还有 $\text{C}-\text{NO}_2$ 键的均裂过程。静态计算^[21]表明,气体状态下 $\text{C}-\text{NO}_2$ 键的断裂能垒比 H 转移能垒低,但在晶体中两个过程的能垒趋于一致。该过程会在炸药内部产生 $-\text{NO}_2$ 自由基,并与 H 相互作用生成 NO^+ 和 OH^- ,其中 NO^+ 是形成 N_2 的关键要素。通过反向追踪 N_2 分子中两个 N 原子的运动轨迹,确定大部分 N_2 分子的生成依赖于 $-\text{C}-\text{NH} + \text{NO}^+ \longrightarrow -\text{C} + \text{N}_2 + \text{OH}^-$ 这一过程,其中由于 $\text{C}-\text{NH}$ 键的强度远大于 $\text{C}-\text{NO}$ 键,因此 $-\text{NH}$ 基团通常留在苯环上,而 NO^+ 则作为自由基在分子间运动。由于 $\text{N}\equiv\text{N}$ 键非常牢固, N_2 一旦生成便基本不再参与其他反应过程,是所有产物中最稳定的物质。

2.1.3 CO_2 的形成

CO_2 的形成机理比较复杂,不过由于所有的 C 都集中在 TATB 分子中心的苯环中,在形成 CO_2 之前苯环必然经历裂解过程,因此苯环裂解可以作为 CO_2 形成的主要参考标准。在模拟结果中观察到苯

环裂解存在多种方式,大多数情况下在某一位置断开,少数在苯环的对位同时断开,然后与体系中近邻的自由基反应。同时还注意到发生裂解的苯环所带的基团数量明显少于其他分子,且断键位置为自由基脱落位置的邻位。为了分析自由基脱落对苯环稳定性的影响,计算了脱落一个硝基的 TATB 分子苯环上碳键的 COHP(Crystal Orbital Hamilton Population)和原子电荷布局。COHP 可以呈现两原子间结合力的强弱,且 COHP 的绝对值越大,两原子间结合力越强。若将苯环上的 C 原子按顺时针分别标记为 C1、C2、C3、C4、C5 和 C6,其中 C1 所连接的 $-\text{NO}_2$ 基团脱落。结果显示:硝基脱落位置 C1 与邻位 C2、C6 所成键的 COHP 为 -6.1 eV ,邻位 C2 与间位 C3 之间的键以及 C6 与 C5 之间键的 COHP 约为 -4.0 eV ,而苯环上其他 C 原子间成键的 COHP 约为 -5.0 eV 。说明硝基脱落位的 C 与邻位 C 的成键增强,而邻位与间位的成键变弱,由此认为在自由基脱落之后,苯环的稳定性受到影响,更容易在其自由基脱落位置(C1)的邻位(C2 或 C6)与间位(C3 或 C5)处发生环裂。

2.1.4 C—N 团簇的形成

在反应前期, H_2O 的生成过程消耗了一部分 O 原子;而在反应后期,由于 TATB 为负氧平衡的分子,苯环裂解生成的短链基团中只有少部分 C 能与 O 结合生成 CO 或 CO_2 ,剩下的 C、N 倾向于保持杂链/杂环状态,这些杂链可能会纠缠在一起形成大型团簇。大型团簇相对来说比较稳定,但是由于温度较高,本研究也观察到这些团簇与 H_2O 以及 CO_2 的相互作用,使得 H_2O 和 CO_2 的数量在反应本应趋于平缓的情况下出现较大波动。

从能量变化角度来看,虽然体系中残留着大型 C-N-O 团簇,但体系的能量和物种仅有小波动,基本保持不变,可以认为此时体系已经处于化学平衡状态。考虑到采用 NVT 系综模拟时体积是原本形成固态晶体时的体积,反应后包含大量气态产物的体系将处于过压状态(约 15 GPa),最终产物在该体积及温度下无法以气态存在,由此认为:虽然模拟达到了平衡,但是实际上只反映了爆轰反应区前段的分解过程,在反应区后段压力逐渐降低,反应区物质密度有较大的变化,从而影响反应机理,而该过程应由压力主导,其相关机理不在本研究所讨论的范围之内。

2.2 外部环境对分解过程的影响

仅从能量角度上看,整个反应进程可以分为吸热(势能上升)和放热(势能下降)两个阶段,且吸热阶段时间小于放热阶段。通过对比势能和中间产物随时间的变化,可以确定在吸热阶段主要进行 TATB 初始分解的质子转移以及 C— NO_2 均裂过程。

2.2.1 温度的影响

通过考察不同温度下体系的势能曲线(见图4),可以估算各温度下 TATB 的反应速率。从图4中可以看出,温度越高,达到平衡所需的时间越短,意味着反应速度越高。设 τ 为放热阶段达到平衡所需时间,通过(1)式对势能曲线进行拟合,可以得到反应特征时间 τ 。

$$U(t) = U_0 + \Delta q \exp\left(-\frac{t - t_{\text{ind}}}{\tau}\right) \quad (1)$$

式中: U 为体系内能; t 为时间; U_0 为终产物内能; Δq 为反应放热; t_{ind} 为放热开始时间,即图3中能量开始释放的时间。假设反应速率 k 与反应特征时间 τ 成反比,即 $k \propto 1/\tau$,则得到不同温度下的反应速率 $k(T)$ 。利用阿伦尼乌斯公式

$$k(T) = A \exp(-E_a/k_B T) \quad (2)$$

对 $k(T)$ 进行拟合,得到表观反应激活能 E_a 和指前因子 A ((2)式中 T 为温度, k_B 为玻尔兹曼常数)。针对吸热阶段,如果将放热开始时间 t_{ind} 定义为吸热的特征时间,则同样也可以得到吸热阶段的表现反应

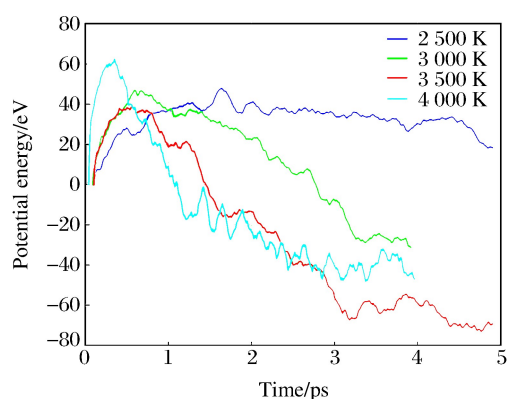


图4 不同温度下 TATB 体系势能的演化曲线
Fig. 4 Potential energy curves of TATB decomposition at different temperatures

激活能和指前因子,最终得到反应速率模型参数,如表 2 所示。

表 2 TATB 反应动力学参数
Table 2 Chemical kinetic parameters of TATB

Reaction step	$A/(\lg s^{-1})$	$E_a/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$\Delta q/(\text{J} \cdot \text{g}^{-1})$
1	31.8	127.30	925
2	30.0	209.76	-2797

需要注意的是,在用阿伦尼乌斯公式拟合计算反应速率时假定反应机理不随温度变化,否则激活能将不再是定值,而随温度的变化而改变。在实际模拟过程中,注意到随着温度的上升, N_2 的生成方式逐渐发生变化。在较低温度下, N_2 的生成主要依赖于 $-\text{NO}$ 基团与 $-\text{NH}$ 基团的作用。而在高温情况下,苯环裂解发生得很快,在没有基团脱落的情况下,苯环也会发生均裂。在这种情况下,体系内只有少量 $-\text{NO}$ 生成,大量的 C-N-O 杂链相互碰撞产生 N_2 、 CO_2 、 H_2O 等气体分子。由于 NO_2 在脱离苯环之前苯环就裂解了,所以部分 N 被束缚在杂链中无法有效地参与 N_2 的生成,最终导致高温下 N_2 的产率比低温下低。同时,分析显示,温度的变化对于体系中 C-N-O 团簇的大小和各元素配比几乎没有影响,说明后续 C-N-O 团簇的演化很可能受环境压力的控制。

2.2.2 压力的影响

模拟了 $0.8d_0$ 、 $0.9d_0$ 、 $1.2d_0$ 和 $1.3d_0$ 4 种密度的 TATB 晶体在 2500 K 下的反应过程。4 种密度所对应的初始压力分别为 0、0.16 和 25 GPa。模拟结果显示,密度越大,反应速率越高。从成断键变化曲线(见图 5)上看, $1.3d_0$ 体系中各种键的断裂速度均高于 $0.8d_0$ 体系。如果排除不同体系中各种键断裂前的平台阶段,注意到 H-N 键和 N-O 键的减少速率在不同压力下几乎相同,甚至在 $0.8d_0$ 体系下 H-N 键的减少速率更快些。而其他键,包括 C-O 键、 N-N 键这些与 N_2 和 CO_2 相联系的键的变化速率则在高压下更快。通过观察分子的运动轨迹发现:在低密度情况下,不同层间的 TATB 分子在反应初期出现相对滑移;而在高密度情况下,分子靠得较近,几乎没有滑移情况出现。

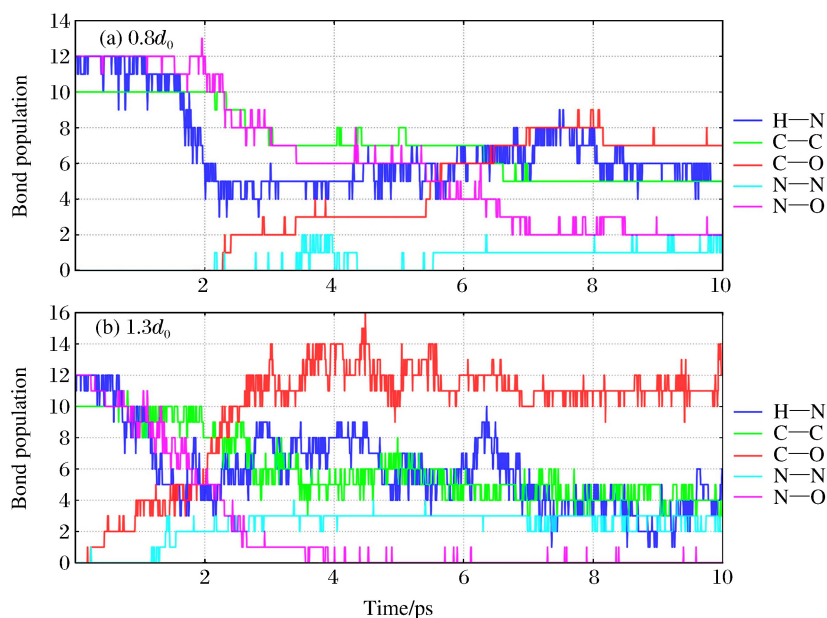


图 5 不同密度和压力下 TATB 分解产物随时间的变化曲线

Fig. 5 Products population curves of TATB at different densities and pressures

综上所述,可以认为:第 1 阶段中 NO_2 的分解依赖于压力,且压力越大,物质越紧密, NO_2 越难从基体上脱落;但是随后的放热过程依靠苯环的分解和邻近自由基的反应,材料内部剩下的都是较小的自由基,自由基靠得越近,反应概率越大。该现象与实验上密度越高则爆压和爆速越高的特性一致。

2.2.3 黏结剂的影响

图6显示了3000及3500 K下带有F2312氟聚物黏结剂及纯TATB体系的势能随时间的变化。为便于比较,将相同温度下不同体系的势能曲线在横轴末端对齐。从图6中可以明显地看出,带有黏结剂的TATB体系放能更多。然而经过换算得出,带有黏结剂的TATB体系的单位质量放能仅为纯TATB体系的83%,说明黏结剂虽然参与反应且释放能量,但是仍然无法与等密度TATB对体系能量的贡献相比,最终导致整个体系的能量水平降低。另一方面,单独观察3000或3500 K下体系的能量释放情况可知,含有黏结剂的TATB体系在吸热阶段的势能变化速率略高于纯TATB体系。在经历一段快速放热之后,含有黏结剂的TATB体系与纯TATB体系的势能曲线变化趋势几乎一致。

为了理解氟聚物黏结剂如何参与反应进程,研究了中间物质和断键情况。分析结果显示,黏结剂

的首步分解为F原子的转移,其次为碳链的扭转及断裂,而Cl原子几乎不参与反应。在TATB与黏结剂界面处,TATB首步分解过程中的H转移和C—NO₂断裂速度高于TATB内部分解速度。对于黏结剂而言,F原子的转移速度低于TATB中H原子的转移速度,同时TATB初始分解生成的游离H与F原子结合生成HF;该过程会消耗H,使体系中的O原子有更多机会参与CO₂的生成过程,而非与H结合生成OH⁻和H₂O,最终导致产物中CO₂的比例提升,而H₂O的比例下降。氟聚物的主体为长碳链,在反应中碳链互相缠绕形成较大的团簇,在形成团簇过程中部分游离的NO⁺和OH⁻被团簇捕获,体系中游离的NO⁺和OH⁻减少,限制了N₂和CO₂的生成速率。由此认为,正是该过程导致含有黏结剂体系的前期反应速率高于纯TATB体系而后期反应速率却降至与纯TATB体系一致。此外,还发现由TATB演化形成的C团簇具有较高比例的N、O原子,其中N原子数与C原子数的比值可达0.8,而由黏结剂形成的C团簇中N的比例则低很多,C原子与N原子的最终演化过程可能与纯TATB体系中C团簇的演化机理不同。

综合以上分析,证实了氟聚物黏结剂的引入会降低TATB热分解反应的单位质量放能,黏结剂与TATB反应生成HF,导致产物中H₂O的含量降低,CO₂的含量增加。氟聚物对反应速率的影响是多种因素综合作用的结果,无法得出明确结论。同时,由于现有系综无法对碳聚物的演化过程进行模拟,黏结剂分解生成C团簇的影响仍需要进一步的研究和确认。

3 结 论

采用从头算分子动力学方法,详细地研究了TATB在高温环境下的分解过程。通过追踪原子的移动以及产物随时间的变化,确认TATB在高温下分解的首步为质子转移以及C—NO₂键断裂,中间产物为H₂O和NO,最终产物有N₂、CO₂和H₂O。这些反应过程大部分依赖于不同基团之间的碰撞和扩散,因此温度越高,自由基的运动能力越强,反应速率越快。压力的影响比较复杂:在高密度情况下,一方面依赖于碰撞的反应几率增大,使反应速率增大,而另一方面由于高密度带来笼型效应,产生自由基的反应速率变低;总体上,压力越高,反应速率越高。黏结剂在较高温度下会参与反应,且对反应路径及最终产物的配比存在一定的影响。

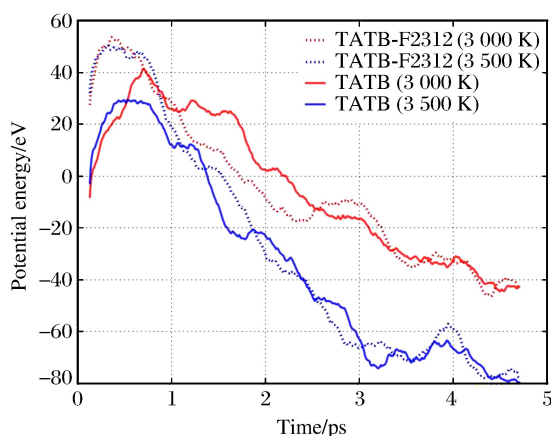


图6 不同温度下含有氟聚物黏结剂和纯TATB体系的势能演化曲线

Fig. 6 Potential energy curves of TATB with or without fluoropolymer binders at different temperatures

参考文献:

- [1] STEPHEN A D, SRINIVASAN P, KUMARADHAS P. Bond charge depletion, bond strength and the impact sensitivity of high energetic 1,3,5-triamino 2,4,6-trinitrobenzene (TATB) molecule: a theoretical charge density analysis [J]. Computational and Theoretical Chemistry, 2011, 967(2): 250-256.
- [2] GEE R H, ROSZAK S, BALASUBRAMANIAN K, 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.
- [3] KUNZ A B. *Ab initio* investigation of the structure and electronic properties of the energetic solids TATB and RDX [J]. Physical Review B, 1996, 53(15): 9733-9738.
- [4] ZHANG C Y, WANG X C, HUANG H. π -stacked interactions in explosive crystals: buffers against external mechanical stimuli [J]. Journal of the American Chemical Society, 2008, 130(26): 8359-8365.
- [5] FEDOROV I A, ZHURAVLEV Y N. Hydrostatic pressure effects on structural and electronic properties of TATB from first principles calculations [J]. Chemical Physics, 2014, 436: 1-7.
- [6] KUKLJA M M, RASHKEEV S N. Molecular mechanisms of shear strain sensitivity of the energetic crystals DADNE and TATB [J]. Journal of Energetic Materials, 2010, 28(Suppl 1): 66-77.
- [7] KUKLJA M M, RASHKEEV S N. Self-accelerated mechanochemistry in nitroarenes [J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2009, 1(1): 363-367.
- [8] LIU H, ZHAO J J, DU J G, et al. High-pressure behavior of TATB crystal by density functional theory [J]. Physics Letters A, 2007, 367(4): 383-388.
- [9] 肖继军, 谷成刚, 方国勇, 等. TATB 基 PBX 结合能和力学性能的理论研究 [J]. 化学学报, 2005, 63(6): 439-444.
- XIAO J J, GU C G, FANG G Y, et al. Theoretical study on binding energies and mechanical properties of TATB-based PBX [J]. Acta Chimica Sinica, 2005, 63(6): 439-444.
- [10] ÖSTMARK H. Shock induced sub-detonation chemical reactions in 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene [J]. AIP Conference Proceedings, 1996, 370(1): 871-874.
- [11] ZHANG L Z, ZYBIN S V, VAN DUIN A C T, 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.
- [12] BURTSEV V V, KOMRACHKOV V A, KOVTUN A D, et al. Investigation of shock detonation of TATB using proton radiography [J]. Combustion, Explosion, and Shock Waves, 2012, 48(3): 343-349.
- [13] 马欣, 陈朗, 鲁峰, 等. 烤燃条件下 HMX/TATB 基混合炸药多步热分解反应计算 [J]. 爆炸与冲击, 2014, 34(1): 67-74.
- MA X, CHEN L, LU F, et al. Calculation on multi-step thermal decomposition of HMX- and TATB- based composite explosive under cook-off conditions [J]. Explosion and Shock Waves, 2014, 34(1): 67-74.
- [14] ZHANG C Y, MA Y, JIANG D J. Charge transfer in TATB and HMX under extreme conditions [J]. Journal of Molecular Modeling, 2012, 18(11): 4831-4841.
- [15] 高大元, 徐容, 董海山, 等. TATB 及杂质的热分解动力学 [C]//中国工程物理研究院科技年报. 绵阳, 2002.
- [16] TSYSHEVSKY R V, SHARIA O, KUKLJA M M, et al. Molecular theory of detonation initiation: insight from first principles modeling of the decomposition mechanisms of organic nitro energetic materials [J]. Molecules, 2016, 21(2): 236.
- [17] MANAA M R, REED E J, FRIED L E. Atomistic simulations of chemical reactivity of TATB under thermal and shock conditions: LLNL-CONF-425162 [R]. Livermore, CA: Lawrence Livermore National Laboratory, 2010.
- [18] WEN Y S, ZHANG C Y, XUE X G, et al. Cluster evolution during the early stages of heating explosives and its relationship to sensitivity: a comparative study of TATB, β -HMX and PETN by molecular reactive force field simulations [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2015, 17(18): 12013-12022.
- [19] ZHANG L, JIANG S L, YU Y, et al. Phase transition in octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine (HMX) under static compression: an application of the first-principles method specialized for CHNO solid explosives [J].

- The Journal of Physical Chemistry B, 2016, 120(44): 11510-11522.
- [20] WU Q, CHEN H, XIONG G L, et al. Decomposition of a 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene crystal at decomposition temperature coupled with different pressures: an *ab initio* molecular dynamics study [J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119(29): 16500-16506.
- [21] WU C J, FRIED L E. Ring closure mediated by intramolecular hydrogen transfer in the decomposition of a push-pull nitroaromatic: TATB [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2000, 104(27): 6447-6452.

Decomposition of TATB at High Temperature Using *Ab Initio* Molecular Dynamics

YU Yi¹, ZHANG Lei^{1,2}, JIANG Shengli¹, CHEN Jun^{1,2}

(1. CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China;
2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: As a well-known insensitive explosive, TATB has been a hot issue in the field of energetic materials due to its sensitivity and reaction characteristics. In this work, using the *ab initio* molecular dynamics method, we simulate the decomposition process of TATB at different temperatures and under different pressures, and with or without a binder, and analyze the effect of these factors on TATB's decomposition mechanism and reaction rate. The results show that the reaction mechanism keeps unchanged at different temperatures, while the reaction rate is greatly influenced by temperature. Pressure has different influences at earlier and latter reaction stage. We found that, for a system containing fluoropolymer binders, the fluorine polymers participate in the TATB decomposition and change the components of the final products.

Keywords: TATB; thermal decomposition; *ab initio* molecular dynamics; binder

桌面式激光驱动冲击波技术及其在含能材料分子反应机制研究中的应用^{*}

宋云飞, 郑朝阳, 吴红琳, 郑贤旭, 吴强, 于国洋, 杨延强

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: 利用小型化桌面式脉冲激光驱动冲击波可实现材料的快速动态加载, 具有成本低、实验重复频率高、加载速率超高等特点。介绍了桌面式激光驱动冲击技术的研究工作, 以及该技术在含能材料冲击点火分子反应机制研究中的应用。目前已搭建的纳秒激光驱动冲击波实验系统可以实现上升时间仅为几纳秒、峰值压力不小于 2 GPa 的超快动态加载, 并发展了相应的冲击特性表征技术。利用该实验系统, 研究了典型含能材料 RDX 的冲击感度, 发现冲击高压导致的分子内电荷转移是影响材料感度的关键因素, 高压下 RDX 分子杂环上的电子向 NO₂ 转移并导致硝基的反应感度增加。该研究成果为认识 RDX 的冲击反应机制提供了一定的实验依据。通过现有的以及即将开展的工作, 希望能够建立一套完整的技术手段, 为从分子层次上研究含能材料的冲击反应机理提供实验支持。

关键词: 桌面式激光驱动冲击波技术; 含能材料; 冲击反应; RDX

中图分类号: O521.3; O521.2

文献标识码: A

压力作为改变物性的一个维度, 几乎所有材料在高压下都表现出比常压下更丰富的理化性质, 其中多数性质尚未被充分认识, 特别是在超高压以及多种极端条件相互耦合的情况下。因此, 高压科学在过去几十年中一直是凝聚态科学的前沿和热点。高压科学之所以能够成为一门相对独立的学科, 部分原因是由于高压的产生、探测以及材料在高压下的物性表征都需要专门的技术和精密的实验装置。对材料的高压加载通常可以分为静高压加载和动高压加载, 其中: 静高压加载用金刚石压砧(DAC)、大型六(八)面顶压机等, 探测材料在高压下的结构特征所用的最重要设施是同步辐射光源; 而动高压加载一般借助冲击波传播, 产生冲击波的手段包括高速碰撞、爆轰驱动、磁驱动、激光加载等^[1-3]。动态加载技术在含能材料反应机制研究中发挥着关键作用^[4-6], 这是由于炸药的引爆过程需要通过爆轰波的快速传播引发所有含能材料的反应。对于雷管、导弹战斗部等炸药产品, 尽管其装药方式各有不同, 但是其爆炸过程却有相通之处: 炸药被引信点火后在极短的时间内发生剧烈反应, 释放出的大量化学能转化为热能, 使反应区域瞬间达到高温高压状态; 反应区域生成的气体迅速膨胀, 压缩周围材料形成冲击波向周围传播, 而周围尚未发生反应的炸药在冲击波作用下, 温度和压力急剧上升并引发后续反应; 后续反应释放的能量叠加到冲击波的波前上, 维持冲击波以每秒几千米的速度无衰减地在炸药中传播, 并引发所有含能材料发生反应。在该反应模型中, 通常将快速传播的强冲击波及紧随其后的反应区加在一起统称为爆轰波。由此可见, 在炸药爆轰过程中, 冲击波是引起含能材料分子发生反应并实现反应自持的关

^{*} 收稿日期: 2017-06-26; 修回日期: 2017-07-11

基金项目: 国家自然科学基金(21673211, 11404307); 科学挑战计划(2016001)

作者简介: 宋云飞(1983—), 男, 博士, 副研究员, 主要从事超快激光光谱技术研究. E-mail: songyunfei@caep.cn

通信作者: 于国洋(1982—), 男, 博士, 副研究员, 主要从事含能材料在冲击加载下的分子响应特性研究.

E-mail: yuguoyang2010@126.com

杨延强(1967—), 男, 博士, 研究员, 主要从事含能材料分子反应动力学研究. E-mail: yqyang@caep.cn

键因素之一^[7-8]。

冲击引发含能材料反应这一现象人们早有认识,但是关于材料的反应机制,特别是分子层次的反应机制目前还没有公认的观点。冲击压缩作为一种宏观动态加载,其携带的机械能通过何种路径传递给分子并引起分子解离仍存在争议,从不同的基础出发往往得到完全不同的解释。例如:有些课题组从分子光化学反应角度考虑,认为含能材料的反应发生在分子的激发态,而动高压作用使分子能带间隙减小甚至闭合,从而使分子更容易被激发到激发态上进而发生解离^[9-10];若以含能材料的热解反应为出发点,则给出分子在基态发生解离的结论,冲击加载使材料产生大量的热声子,通过多声子上泵浦方式激发分子振动^[11-12],当分子某个化学键的振动足够强时即引起该键断裂。冲击引发含能材料分子反应是一个极端复杂且不可逆的过程,其中涉及力、热等多种条件的耦合,因此目前从分子水平上对含能材料冲击反应机制的认识十分有限。尽管如此,鉴于含能材料在国防安全领域中的重要意义,相关研究具有强烈的需求牵引,无论是新型材料研发,还是起爆过程的精确控制以及提高炸药安全性和可靠性方面,都越来越依赖于从分子及化学键层次上认识材料反应机理。

含能材料冲击反应机制的研究工作离不开动态加载技术。在各种动高压加载技术中,气炮等大型加载装置能够产生良好的平面冲击波形,从而在材料中施加理想的单轴压缩,在构建物态方程、探索冲击损伤特性等方面具有重要应用。利用强激光与材料的相互作用同样可以在材料中加载动高压,所实现的加载压力甚至达到太帕量级^[13-15],激光加载技术已成为全面核禁试后产生超高压最重要的手段之一。大型的激光系统,如美国的国家点火装置、中国的神光系列装置,在惯性约束聚变研究中发挥着关键作用。然而这些大型设备的体积庞大,建造及运行成本高昂。相比较而言,在含能材料冲击反应机制研究中并不需要特别高的冲击压力,而超快的压缩速率、灵敏的探测手段、高时间分辨率、冲击与探测设备之间良好的同步性都是必不可少的条件,因此小型化激光加载装置是非常合适的选择。

在过去的几年中,本课题组一直从事桌面式激光驱动冲击技术研究。该技术以小型桌面激光设备为基础,主要目的是希望借助该技术对含能材料在冲击作用下的微观点火机制进行研究。本文将介绍本课题组在激光驱动冲击波技术方面的一些研究成果,并以典型的含能材料——RDX 为例,说明激光驱动冲击技术在冲击响应机制研究中的应用。

1 桌面式激光驱动冲击波技术

1.1 激光冲击波的产生原理

利用激光实现对材料的动态加载是基于激光对材料的快速烧蚀^[16]。被烧蚀的材料通常选择金属,这是由于:金属具有良好的延展性,能够根据实验条件制备成箔片或薄膜等形状;此外,金属的烧蚀阈值较低,容易在激光作用下电离;更重要的是,金属对光具有很强的吸收作用,通常激光在金属中的穿透深度仅为纳米量级,从而有利于提高局域能量密度和压力加载速率。当脉冲激光作用在金属表面时,激光能量快速沉积,使材料表面温度升高。当激光的功率密度足够高(大于 10^8 W/cm^2)时,金属表面快速熔化、汽化进而发生电离,高密度等离子体快速膨胀并向外喷射,其反作用力直接作用于烧蚀后的材料表面,从而产生冲击波向材料内部传播。

如图1所示,目前利用激光驱动冲击波技术对材料施加动态高压加载主要采用两种方式:(1)直接烧蚀加载方式,即烧蚀金属层直接覆盖在被加载材料表面,激光完全烧蚀掉金属层,等离子体膨胀压力直接作用在被加载材料上,如图1(a)所示;(2)飞片加载方式,即采用较厚的金属箔片作为烧蚀材料,金属箔片与被加载材料间隔一定距离,两种材料中间保持真空,如图1(b)所示,激光烧蚀掉金属箔表

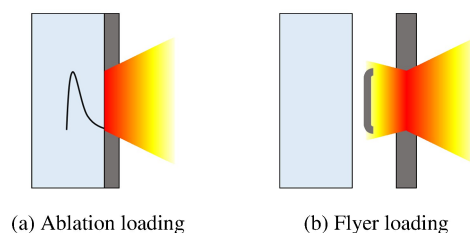


图1 激光加载动高压原理示意

Fig. 1 Principle of laser loading dynamic high pressure

层,膨胀等离子体的压力将金属箔片的剩余部分剪切下来,形成高速飞片,飞片经过一段距离的加速飞行后撞击被加载材料实现动态加载。直接烧蚀加载方式简单易行,但产生的冲击压力相对较低;飞片加载方式能够充分利用等离子体膨胀的动能驱动高速飞片,产生的冲击压力更高,但是即使在真空中飞行,飞片的平整度和飞行姿态也难以保证,所产生的动高压稳定性较差。在实验中选取何种方式加载需要根据实际需求确定。

1.2 实验装置及特点

图 2 为本课题组搭建的激光驱动冲击波实验装置示意图。在该装置中使用两台 Nd:YAG 纳秒激光器作为光源,其中一台(Quantel YG980)输出 1064 nm 的基频光,单脉冲的最大能量为 2 J,脉冲经能量衰减器后聚焦在样品表面的金属层上,峰值功率密度可达 10^{11} W/cm²,在实际应用中 0.1 J 的能量即可产生可探测的冲击波。目前,系统中采用自发拉曼光谱探测样品对冲击加载的响应,自发拉曼光谱能够直接反映分子结构的变化情况。在后续改进计划中,系统的探测端将逐渐整合非线性光学手段及干涉测速技术。另一台激光器(Powerlite 8010)输出 532 nm 的倍频光,用于激发样品的自发拉曼散射。两台激光器之间通过数字延迟发生器(DG535)控制相对延迟,延迟控制精度达到皮秒量级,理论上最大相对延迟时间可以任意长。该系统的时间分辨率主要取决于 532 nm 探测光的脉冲宽度,目前为 7 ns,能够满足探测冲击高压加载及卸载动力学过程的需要。图 2 还展示了冲击靶的结构,其中采用直接烧蚀加载方式。烧蚀金属层采用铝,烧蚀层的厚度由 1064 nm 激光的能量决定,通常在 1~20 μ m 之间,制备方法可以选用溅射成膜(薄膜)或金属箔附着(厚膜)。将含能材料样品固定在金属烧蚀层与玻璃盖片之间,所产生的拉曼散射信号由光纤收集,经光谱仪(Jobin Yvon iHR550)分光后利用 Andor DH740 型 ICCD(Intensified Charge-Coupled Device)进行探测,ICCD 通过数字延迟发生器触发,以保持与 532 nm 的探测脉冲同步。由于动高压加载通常使样品发生不可逆反应或损伤,因此样品由二维位移台控制移动,保证每一个激发脉冲都能够照射在全新的位置上。

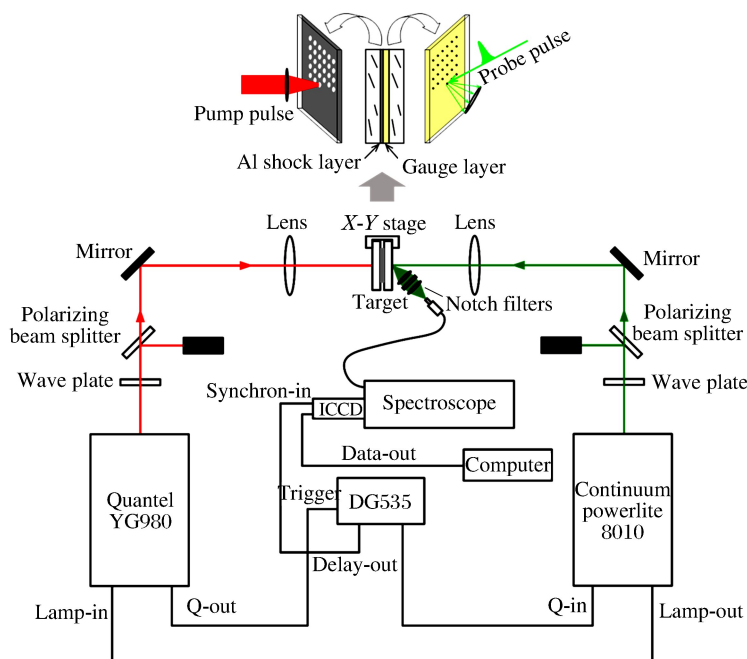


图 2 激光驱动冲击波实验装置

Fig. 2 Setup of laser driven shock wave technique

上述桌面式激光驱动冲击加载装置具有与大型高压加载装置完全不同的特点。(1) 装置设备简单,仅需要数平方米的桌面级空间即可满足设备的安放、搭建,运行成本低廉。(2) 加载重复频率高。

由于单发激光脉冲即可产生一次加载,因此加载实验的重复频率最高达到每秒数十次,样品的探测光谱可以通过多次累加提高信噪比。例如,对于本实验系统所采用的自发拉曼光谱探测,尽管原则上所有材料都存在拉曼效应,但是自发拉曼散射往往较弱,只有在多次累加平均的情况下才能有效分辨。(3)冲击波携带能量小,产生 10 GPa 的冲击压力仅需要几焦耳的激光脉冲,因此冲击波对样品的破坏程度较轻,可以对加载后的效果进行离线检测。(4)激光驱动冲击最重要的特点是压力加载速度快,利用超短脉冲激光可以实现几十皮秒的超快压力加载^[17],与凝聚相材料中因分子间相互作用而导致的各种动力学过程基本在同一时间尺度上。这一特点对于研究冲击作用下材料的分子动力学过程至关重要。综合以上激光驱动冲击技术特点,可以发现,尽管受到激光自身能量分布以及烧蚀过程复杂性的限制,导致在实际应用中很难控制冲击波形实现良好的平面加载,但是该技术非常适合从分子层次上研究材料在动高压作用下的演化动力学过程,如冲击相变、冲击反应及损伤生长机制等。

2 研究进展

2.1 激光驱动冲击波特性表征

与普通的弹性波相比,冲击波最显著的特征是具有陡峭的冲击前沿。在冲击前沿处,体系的状态参量发生快速变化,这正是“冲击”的物理内涵。动态加载过程的许多重要参量都体现在冲击前沿的特征上,如材料的应变率、峰值压力等,因此如何表征冲击波特征是一个关键问题,同时也是利用该技术开展研究工作的基本前提。如前所述,激光驱动冲击技术的一个重要特点是超快加载速率,在本实验装置中由于采用了纳秒脉冲产生冲击波,因此动高压加载的上升时间同样也为纳秒量级。为了能够用拉曼光谱表征冲击前沿特征,本课题组提出了一种通过拟合光谱线形获得冲击特征参量的实验方法^[18]。

在压力作用下材料的拉曼光谱发生移动(通常为蓝移),因此可以将拉曼谱线的移动量作为测量体系压力的标尺(在较低的压力范围内,二者之间存在正比关系)。在本实验装置中,产生冲击的激光光斑直径一般为毫米量级,而被加载样品的厚度通常为百微米量级,在此传播距离下,可以近似地认为冲击波以平面波形式传播,因此只考虑冲击波传播方向(x)上的压力变化。当冲击波在探测层中传播时,在 t 时刻,样品层中不同位置将受到不同强度的高压作用,因此测得的拉曼谱线中包含多种压力成分的贡献,谱线形状将发生明显变化。一般来说,冲击卸载过程比加载过程慢得多,因此假设冲击前沿在层中传播的短时间内不存在压力卸载的影响。假设拉曼光谱具有高斯线形,同时用“山坡函数”描述 t 时刻样品层中的压力分布

$$p(x, t) = A \left(1 - \frac{x - x_s}{w + |x - x_s|} \right) + B \quad (1)$$

式中: x_s 表示 t 时刻冲击前沿所在位置; w 是与冲击前沿上压力梯度有关的参数; A 为冲击波的半峰值压力; B 为冲击波未到达时的初始压力,在常压下可以认为 $B=0$ 。(1)式给出了被加载样品中任意位置 x 处的压力,该位置处样品材料发射的拉曼光谱会因压力 p 而发生一定的频移。设样品层的厚度为 L ,综合所有位置对拉曼光谱的贡献,可以得到总的拉曼光谱线形

$$S(\nu, t) = C \left\{ \int_0^{x_s} \exp \left\{ - \left[\frac{\nu - \nu_0 - \alpha p(x, t)}{\nu_{D_s}} \right]^2 \right\} dx + \int_{x_s}^L \exp \left\{ - \left[\frac{\nu - \nu_0 - \alpha p(x, t)}{\nu_{D_0}} \right]^2 \right\} dx \right\} + D \quad (2)$$

式中: ν_0 表示常压下拉曼谱线的峰位, α 为压力与谱线频移之间的比例系数, ν_{D_0} 和 ν_{D_s} 分别表示常压和高压下谱线的宽度, C 和 D 是与实验有关的常数。(2)式是一个带参数的表达式。利用该式对实验获得的拉曼光谱线形进行拟合即可确定其中的各个参数,进而获得样品层中的压力分布情况和波前特征。

利用上述方法,以多晶萘为样品,得到了激光冲击波在样品中传播时的特征参数^[19]。冲击靶采用图2所示的结构,其中样品层为多晶萘粉末和环氧胶的混合物,厚度为 120 μm 。1064 nm 激光的单脉冲能量为 600 mJ,焦斑直径约 2 mm;探测光能量为 10 mJ,焦斑直径为 200 μm 。重点考察萘位于 1404 cm^{-1} 处的拉曼模式(对应苯环的呼吸振动)。图3给出了该模式在激光加载条件下的时间分辨拉曼光谱,其中:图3(a)和图3(b)分别表示压力加载过程中各时刻的光谱线形及对应的压力分布,图3(c)

和图 3(d)则分别表示压力卸载情况。从图 3 中可以得到,整个动态过程持续约 250 ns,压力加载速率远远高于卸载过程。由压力分布的变化情况可以确定,冲击波的峰值压力约为 2 GPa,在样品中的传播速度约为 2.45 km/s,波前处的压力上升时间约为 3 ns,波前的空间宽度约为 7.35 μm 。可以看出,利用激光加载技术实现了在几纳秒内压力上升 2 GPa 的超快加载速率,同时该实例也说明通过光谱线形拟合方法可以有效得到激光加载过程中的多项关键指标。

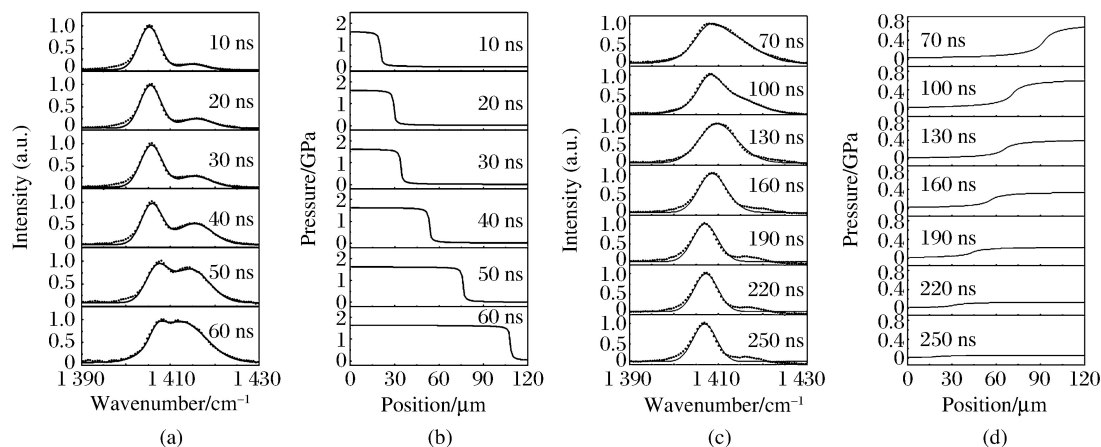


图 3 蒽-环氧胶混合样品在激光加载条件下的时间分辨拉曼光谱及对应的样品层压力分布

Fig. 3 Time-resolved Raman spectra of anthracene-adhesive sample under laser shock loading and the corresponding pressure distribution in the sample layer

需要说明的是,在冲击波作用下,样品中除了压力上升外,体系温度也随之升高,并因此对分子的拉曼频移产生影响。以上述蒽的苯环呼吸振动模式为例,当温度升高时,该模式仅发生了轻微的红移(与压力导致的蓝移相反),而谱线宽度却表现出明显的展宽。因此,在我们提出的分析方法中忽略了温度导致的微小红移的影响,而只考虑谱线展宽作用。在(2)式中, ν_{D_0} 和 ν_{D_s} 分别代表了冲击前、后的谱线宽度,通过拟合可知,冲击前谱线宽度约为 5.5 cm^{-1} ,而冲击后展宽为 8.5 cm^{-1} ,说明体系温度升高了约 100 K。

2.2 含能材料 RDX 的冲击感度研究

如前所述,在含能材料的爆轰过程中,冲击波是引起分子反应的一个关键因素。借助气炮等大型加载装置,目前已经能够比较精确地测量炸药体系在动态压缩条件下的多种力学性质,如 $p-v$ (压力-比容) 曲线等,然而对于含能材料分子在冲击作用下的化学特性变化,目前所掌握的信息仍十分有限。为此,本课题组利用激光驱动冲击技术,结合第一性原理计算,研究了含能材料 RDX 在动态加载下的分子响应,从分子内电荷转移角度分析动高压对分子反应活性的影响。RDX 是一种在武器战斗部中经常使用的高爆含能材料,尽管其分子结构并不复杂,但是当前对 RDX 的冲击解离机制仍然缺乏清晰的认识。该工作将有助于认清 RDX 的点火机理以及影响炸药安全性和可靠性的因素。

在本实验中仍采用图 2 所示的冲击靶结构,其中样品层为 RDX 粉末与酒精的悬浊液,酒精的作用是在晶体粉末之间传递压力。为了避免冲击引发 RDX 反应损坏样品,在实验中控制激发脉冲能量不超过 300 mJ。实验结果如图 4(a)所示,其中给出了 RDX 各个振动模式的峰位随延迟时间的变化情况。压力加载及卸载的整个动态过程持续约 200 ns;根据拉曼光谱的峰位移动,可以确定体系的峰值压力约为 1 GPa。从图 4(a)中可以看出,所有观测到的拉曼谱线在 200 ns 以后都恢复到原位置,光谱中并没有出现不可逆的变化或新谱线,说明 RDX 分子在该冲击压力下没有发生分解。图 4(b)中给出了通过第一性原理计算得到的 RDX 单晶拉曼模式随压力变化的情况。理论计算结果与实验结果基本符合,说明理论计算采用的方法以及优化后得到的晶体结构具有较高的可靠性。

根据理论计算结果,得到了 RDX 分子中各化学键的键长以及各个基团上的电荷分布随压力变化的情况,如图 5(a)和图 5(b)所示。从图 5(a)中可以看出,多数化学键的键长在压力作用下缩短,其中

N—N 键的键长对压力最敏感。唯一例外的情况是 N5—O4 键的键长随着压力的升高而变长,导致该键在高压作用下因稳定性越来越差而发生断裂。需要说明的是: α 相下 RDX 分子不是平面结构,3 个 NO_2 分布于 C-N 杂环的两侧,整个分子呈“椅式”结构,而变长的 N—O 键则位于单独处于一侧的 NO_2 上,即 N5 所对应的硝基。从分子内电荷分布上看,如图 5(b)所示的 C-N 杂环和 3 个硝基上的电荷分布随压力变化情况,由于理论计算的是正电荷密度,因此电荷密度增加意味着电子密度减小。当压力升高时,分子间距的缩短影响了分子体系的势能面结构,使 C-N 杂环上的电子密度逐渐降低,而 3 个 NO_2 上的电子密度均逐渐增大,说明高压作用使电子由杂环向硝基上转移。其中,电子密度增加最显著的正是与 N5 对应的硝基,与图 5(a)所示的键长变化结果相呼应。在高压下电子向 N5 硝基上转移,导致该硝基上的电负性增强,化学键内部的排斥力增大,导致该硝基中的 N—O 键伸长,降低了该键断裂所需跨越的势垒,即该化学键的活性变强。这与文献[20]中所报道的 RDX 在高压下变得更敏感的实验结果相符合。

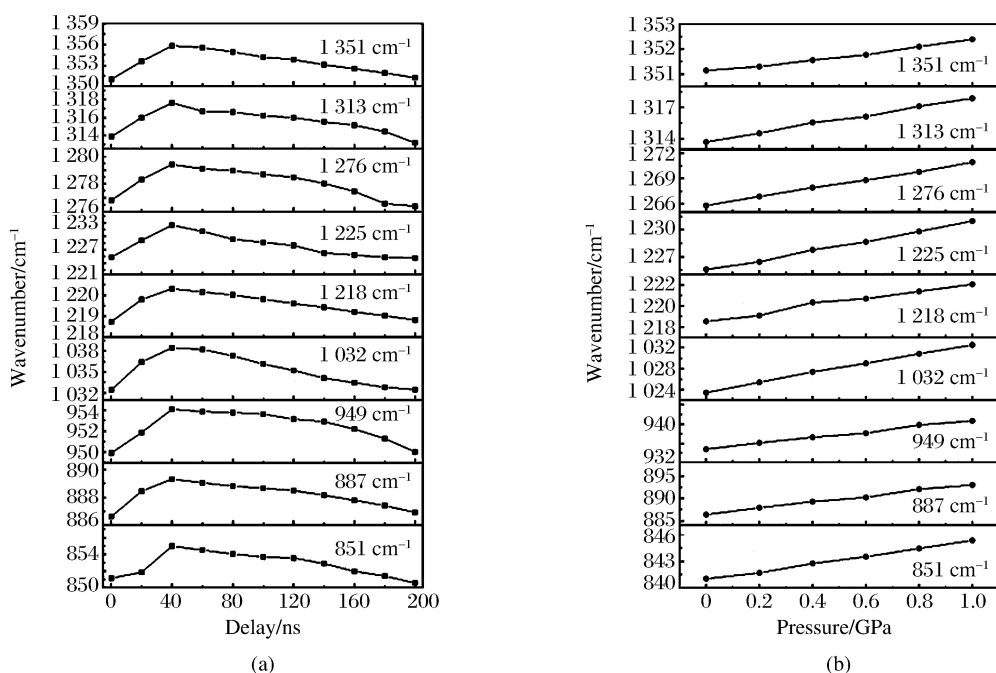


图 4 (a) 激光加载下 RDX 各拉曼模式的峰位移动趋势, (b) 第一性原理计算得到的 RDX 单晶在 0~1 GPa 的拉曼频移

Fig. 4 (a) Change of RDX Raman modes under laser shock loading; (b) Raman shift of RDX single crystal in the pressure range of 0-1 GPa obtained by first principle calculation

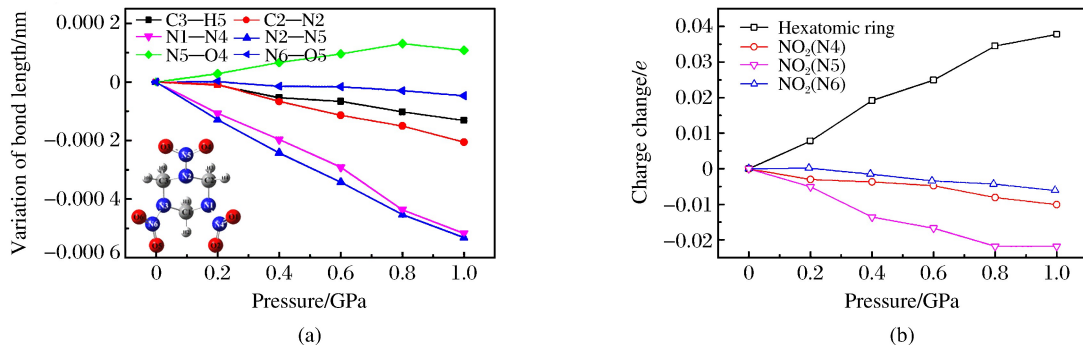


图 5 RDX 分子中各个化学键键长以及苯环和硝基上的电荷密度随压力增大的变化趋势

Fig. 5 Changes of bond length in the RDX molecules and charge density on phenyl and nitro group with the increase of pressure

根据以上分析可以得出:冲击压力作用导致 RDX 的感度增大,而引起冲击感度增大的微观机制则是压力诱导的分子内电子转移以及由此导致的 N—O 键伸长。当然,含能材料的冲击点火是一个非常复杂的过程,是压力、温度等多种因素相互耦合的结果,本实验给出的结论说明压力导致的感度增加是其中一种重要的因素。

3 总结与展望

在过去几年工作中,本课题组搭建了以纳秒脉冲激光为激发源的激光驱动冲击波实验系统。该系统为小型桌面式系统,利用激光对金属的烧蚀产生冲击波,通过特定的样品结构设计,可在被冲击材料中实现每纳秒数吉帕的超快动高压加载。激光冲击技术的特点决定了其在含能材料冲击点火反应机制研究中具有重要的应用价值。含能材料分子会在冲击波作用下发生解离,而解离的具体机制是武器应用研究中亟待解决的关键问题。本课题组以典型的高爆含能材料 RDX 为样品,通过激光驱动冲击波加载动高压并结合第一性原理计算,研究了 RDX 分子的冲击感度。结果表明,RDX 分子结构在动态压缩作用下发生改变,而分子结构变化导致电子从 C-N 杂环向 NO_2 转移,引起 N—O 键伸长。因此,冲击波的作用增加了 N—O 键的反应感度,使其更容易在其他外界条件的影响下发生断裂。这一研究成果从分子层次上解释了压力对 RDX 冲击感度的影响机制,加深了对含能材料冲击点火机理的认识。

未来计划从两方面深入挖掘激光驱动冲击技术的潜力。(1)在现有系统的基础上引入飞秒脉冲激光作为激发光源。在现有系统中,冲击波的产生和探测都采用纳秒脉冲,系统的时间分辨率为纳秒量级,虽然足以监测冲击加载和卸载的完整过程,但是对于更快的振子-声子耦合等微观过程,纳秒量级的分辨率远远不够,采用飞秒脉冲激光可以解决这一问题。例如,美国的 Tas 等^[17]报道利用皮秒脉冲激光可以产生上升时间为 25 ps 的冲击前沿,这和分子与热库之间达到热平衡的时间尺度^[21]相仿。此外,采用飞秒脉冲激发冲击波还具有另一个优势,即可以同时引入非线性光谱探测技术。当前的系统中采用自发拉曼光谱作为探测手段,众所周知,自发拉曼效应的量子效率很低,采用飞秒脉冲激发冲击波时必须大幅降低样品层厚度,从而严重影响自发拉曼散射的发光强度。利用飞秒脉冲作为探测光时,借助飞秒脉冲更高的光场强度,可以激发样品的非线性效应;而利用非线性光谱技术(如相干反斯托克斯拉曼光谱等)探测样品对冲击加载的响应时,不仅可以获得更高的光谱信噪比,而且能够获取分子化学键变化的动力学信息。(2)采用飞片加载方式加载动高压。当前的实验中用来产生冲击波的方式是直接烧蚀金属铝,然而相比较而言,在相同的激发脉冲能量下,飞片撞击可产生更高的峰值压力。但是,激光驱动飞片加载技术的难点在于如何保证飞片的平整度以及如何实验过程中实时监测飞片的飞行姿态。在后续工作中,将通过对高斯激光脉冲进行整形处理,同时引入闪光摄影技术逐步解决以上问题。

综上所述,本文中所介绍的桌面式激光驱动冲击波技术具有与大型加载技术完全不同的独特优势,适用于从分子层次上解析含能材料的冲击响应特性,在冲击化学领域具有巨大的潜在应用空间。本课题组在该技术研究上已有初步成果,未来将在现有工作的基础上逐步改进并扩充激光驱动冲击波技术能力,使其具备更高的时间分辨能力和探测灵敏度。作为大型加载手段的重要补充,小型化激光加载技术将有助于深入研究含能材料点火过程的分子反应机制。

参考文献:

- [1] 陈源福,刘福生,张宁超,等.瞬态激光拉曼光谱测量系统及其在苯冲击压缩实验中的应用[J].高压物理学报,2013,27(4):505-510.
CHEN F Y, LIU F S, ZHANG N C, et al. Measurement system of transient raman spectroscopy and its application to benzene under shock compression [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2013, 27(4): 505-510.
- [2] 文尚刚,孙承伟,赵锋,等.多级爆轰驱动——研究超高速碰撞的一种新的加载技术[J].高压物理学报,2000,

- 14(1):22-27.
- WEN S G, SUN C W, ZHAO F, et al. Multi-stage detonation system — a new loading technology for studying hypervelocity impact [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(1): 22-27.
- [3] 孙承伟, 赵剑衡, 王桂吉, 等. 磁驱动准等熵平面压缩和超高速飞片发射实验技术原理、装置及应用 [J]. 力学进展, 2012, 42(2): 206-219.
- SUN C W, ZHAO J H, WANG G J, et al. Progress in magnetic loading techniques for isentropic compression experiments and ultra-high velocity flyer launching [J]. Advances in Mechanics, 2012, 42(2): 206-219.
- [4] WINEY J M, GUPTA Y M. Shock-induced chemical changes in neat nitromethane: use of time-resolved Raman spectroscopy [J]. The Journal of Physical Chemistry B, 1997, 101(50): 10733-10743.
- [5] PATTERSON J E, DREGER Z A, GUPTA Y M. Shock wave-induced phase transition in RDX single crystals [J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2007, 111(37): 10897-10904.
- [6] YANG Y Q, WANG S F, SUN Z Y, et al. Propagation of shock-induced chemistry in nanoenergetic materials: the first micrometer [J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(7): 3667-3676.
- [7] TOKMAKOFF A, FAYER M D, DLOTT D D. Chemical reaction initiation and hot-spot formation in shocked energetic molecular materials [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1993, 97(9): 1901-1913.
- [8] SAKATA J, WIGHT C A. Shock-initiated chemistry of energetic materials [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1995, 99(17): 6584-6588.
- [9] KUKLJA M M. On the initiation of chemical reactions by electronic excitations in molecular solids [J]. Applied Physics A: Materials Science & Processing, 2003, 76(3): 359-366.
- [10] BHATTACHARYA A, BERNSTEIN E R. Nonadiabatic decomposition of gas-phase RDX through conical intersections: an ONIOM-CASSCF study [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2011, 115(17): 4135-4147.
- [11] CHEN S, TOLBERT W A, DLOTT D D. Direct measurement of ultrafast multiphonon up-pumping in high explosives [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1994, 98(32): 7759-7766.
- [12] HONG X H, CHEN S, DLOTT D D. Ultrafast mode-specific intermolecular vibrational energy transfer to liquid nitromethane [J]. The Journal of Physical Chemistry, 1995, 99(22): 9102-9109.
- [13] KOENIG M, FARAL B, BOUDENNE J M, et al. Relative consistency of equations of state by laser driven shock waves [J]. Physical Review Letters, 1995, 74(12): 2260-2263.
- [14] TAKAMATSU K, OZAKI N, TANAKA K A, et al. Equation-of-state measurements of polyimide at pressures up to 5.8 TPa using low-density foam with laser-driven shock waves [J]. Physical Review E, 2003, 67(5): 056406.
- [15] COTTET F, HALLOUIN M, ROMAIN J P, et al. Enhancement of a laser-driven shock wave up to 10 TPa by the impedance-match technique [J]. Applied Physics Letters, 1985, 47(7): 678-680.
- [16] DEVAUX D, FABBRO R, TOLLIER L, et al. Generation of shock waves by laser-induced plasma in confined geometry [J]. Journal of Applied Physics, 1993, 74(4): 2268-2273.
- [17] TAS G, FRANKEN J, HAMBIR S A, et al. Ultrafast Raman spectroscopy of shock fronts in molecular solids [J]. Physical Review Letters, 1997, 78(24): 4585-4588.
- [18] SONG Y F, ZHENG X X, YU G Y, et al. The characteristics of laser-driven shock wave investigated by time-resolved Raman spectroscopy [J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2011, 42(3): 345-348.
- [19] YU G Y, ZHENG X X, SONG Y F, et al. Observation of laser-driven shock propagation by nanosecond time-resolved Raman spectroscopy [J]. Journal of Applied Physics, 2015, 117(3): 033102.
- [20] DANG N C, DREGER Z A, GUPTA Y M, et al. Time-resolved spectroscopic measurements of shock-wave induced decomposition in cyclotrimethylene trinitramine (RDX) crystals: anisotropic response [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2010, 114(43): 11560-11566.
- [21] DEAK J C, IWAKI L K, DLOTT D D. Vibrational energy redistribution in polyatomic liquids: ultrafast IR-Raman spectroscopy of nitromethane [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 1999, 103(8): 971-979.

A Desktop Laser Driven Shock Wave Technique and Its Applications to Molecular Reaction Mechanism of Energetic Materials

SONG Yunfei, ZHENG Zhaoyang, WU Honglin, ZHENG Xianxu,
WU Qiang, YU Guoyang, YANG Yanqiang

*(National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics,
Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China)*

Abstract: The miniature desktop pulse laser equipment can be used to drive shock wave and load dynamic high pressure (DHP) in materials, a technique marked by its low cost, high experimental repetition frequency and ultra high loading rate. The present paper presents the work we have done so far on the desktop laser driven shock wave technique and its corresponding application in exploring the molecular reaction mechanism of energetic materials under shock. We have built an experimental system using nanosecond laser pulses and developed a method to characterize the features of shock wave. The laser driven shock wave obtained in our experiment has a rise-time of only a few nanoseconds and a peak pressure of no less than 2 GPa. This experimental system has been used to study the shock sensitivity of the typical energetic materials RDX. It was found that the intramolecular charge transfer induced by DHP is a key factor influencing the sensitivity. Under high pressure, the electrons on the C-N heterocycle will transfer to the nitro group, leading to the increase of the sensitivity of NO_2 . This result can provide experimental reference for understanding the shock ignition mechanism of RDX. Through the present and the future subsequent work, we expect to develop a comprehensive experimental technique that can support the investigation about the shock ignition mechanism of energetic materials on the molecular level.

Keywords: desktop laser driven shock wave technique; energetic materials; shock reaction; RDX

HNS-IV 炸药的短脉冲冲击起爆判据*

郭俊峰^{1,2}, 曾庆轩^{1,2}, 李明愉¹, 喻青霞¹

(1. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

2. 陕西应用物理化学研究所应用物理化学国家级重点实验室, 陕西 西安 710061)

摘要: 飞片冲击起爆 HNS-IV 炸药是直列式传爆序列的重要研究方向。考虑到能量加载方式(一般为电爆炸驱动、微装药驱动和激光驱动)和飞片材料对冲击起爆的影响, 根据文献测量的飞片阈值速度拟合得到了 HNS-IV 炸药 $p^n\tau$ 和 James 判据的系数。同时, 利用 ANSYS/LS-DYNA 程序模拟了铜叠氮化物爆炸驱动飞片冲击起爆 HNS-IV 炸药的过程, 并根据数值模拟结果修正了 HNS-IV 炸药 $p^n\tau$ 和 James 判据的系数。结果表明, HNS-IV 炸药的 $p^n\tau$ (其中 p 为压力, τ 为脉冲作用时间)判据应该调整为 $p^{2.08}\tau > 1.54 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$), James 判据应调整为 $0.215/\Sigma + 0.108/E < 1$ (Σ 为比动能, E 为能通量)。调整后的起爆判据与数值模拟结果相一致, 并具有更高的实用性。

关键词: 冲击起爆; HNS-IV; 起爆判据; 数值模拟

中图分类号: O383; TQ563

文献标识码: A

为满足现代武器系统的微小型化、智能化、高安全性和可靠性的需求, 基于飞片冲击起爆理论的起爆装置已成为当前研究的热点。这种起爆装置避免了换能元与炸药的直接接触, 提高了武器系统的安全性, 与传统的错位式装药结构相比, 缩小了起爆装置的体积。现阶段驱动飞片的能量加载方式有很多种, 主要有电爆炸驱动、微装药爆炸驱动和激光驱动。由于飞片所受驱动形式的不同, 飞片的形状也会不一致, 这样就导致了飞片冲击起爆过程中脉冲作用时间的变化。James^[1-2]总结了不同形状抛射体的脉冲作用时间的计算方法, 并据此得到多种常见炸药的冲击起爆判据。Haskins 等^[3]考虑了冲击起爆过程中稀疏波对冲击波的影响, 提出了脉冲作用时间的修正式。Bowden 等^[4]利用该修正式研究铝飞片的冲击起爆判据, 发现计算结果与实验结果具有很好的一致性。

HNS-IV 具有良好的安全性、热安定性以及短脉冲冲击起爆性能, 因而常作为传爆药应用于直列式传爆序列中。其常见的冲击起爆判据主要有两种, 即 $p^n\tau$ 判据和 James 判据。1981 年, Schwarz^[5]确定了 HNS-SF($\rho = 1.6 \text{ g/cm}^3$)的冲击起爆判据 $p^{2.06}\tau > K$ ($0.01 \mu\text{s} < \tau < 0.1 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 9.8 \text{ GPa}$)。在 Schwarz 工作的基础上, Bowden 等^[6]拓宽了 HNS-IV 炸药冲击起爆判据的使用范围, 即 $p^{2.52}\tau > K$ ($0.7 \text{ ns} < \tau < 0.1 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 29.0 \text{ GPa}$)。Bowden 等^[4,6]先后两次修正了 James 判据的系数, 即 $\Sigma_c/\Sigma + E_c/E = 1$ ($\Sigma_c = 0.3263$, $E_c = 0.0420$; $\Sigma_c = 0.2042$, $E_c = 0.0879$)。虽然有关 HNS-IV 冲击起爆判据的研究很多, 但大多局限于单一能量加载方式, 未考虑飞片材料和形状对冲击起爆判据的影响。

本工作利用文献测量的飞片阈值速度, 考虑能量加载方式和飞片材料对冲击起爆的影响, 拟合得到 HNS-IV 炸药 $p^n\tau$ 和 James 判据的系数, 然后利用 ANSYS/LS-DYNA 程序模拟铜叠氮化物爆炸驱动飞片起爆 HNS-IV 炸药的过程, 根据以前冲击起爆国内生产的 HNS-IV 炸药的实验数据确定接触和参数,

* 收稿日期: 2017-05-18; 修回日期: 2017-05-31

基金项目: 国防科技重点实验室基金(9140C370503150C37174); 教育部博士点基金(20131101110009)

作者简介: 郭俊峰(1989—), 男, 博士研究生, 主要从事爆炸力学研究. E-mail: guojunfeng037@163.com

通信作者: 曾庆轩(1964—), 男, 博士, 教授, 主要从事爆炸力学研究. E-mail: zengqingxuan@bit.edu.cn

李明愉(1969—), 女, 博士, 副教授, 主要从事爆炸力学研究. E-mail: mingyuli@163.com

最后根据数值模拟结果重新修正两种冲击起爆判据的参数,以期为国内生产的 HNS-IV 炸药提供一种适用面广、可靠的冲击起爆判据。

1 HNS-IV 冲击起爆判据

1.1 冲击起爆 $p^n\tau$ 判据

1968 年, Walker 和 Wasley^[7] 首先提出非均质炸药的冲击波起爆的 $p^2\tau$ 判据, 即

$$p^2\tau = \text{const} \quad (1)$$

式中: p 为冲击波入射压力, 可以根据飞片的厚度和速度计算获得^[8]; τ 为脉冲作用时间, 与飞片的材料和形状有关^[1-4]。但是大量的研究表明, $p^2\tau$ 判据存在很大的局限性。因此, 高能炸药的冲击起爆判据通常修正为^[9]

$$p^n\tau = K \quad (2)$$

式中: K 和 n 是常数。只有当 $p^n\tau > K$ 时, 炸药才会起爆。

对于金属电爆炸驱动飞片起爆 HNS-IV 炸药, 研究表明飞片的平整性较好, 基本可以认为冲击起爆瞬间飞片的形状是平板^[10], 脉冲作用时间 τ 可以表示为^[2]

$$\tau = 2d_f/D_f \quad (3)$$

式中: d_f 为飞片的厚度, D_f 为冲击波在飞片内的传播速度。对于小直径金属平板飞片, 需要考虑侧向稀疏波对冲击波的影响, 可以将(3)式修正为^[3]

$$\tau = \left(2 + \frac{c_e}{S_e u_p}\right) \frac{2d_f}{\omega_f} \quad (4)$$

式中: ω_f 为飞片内冲击波速度, c_e 为炸药内初始声速, u_p 为飞片质点速度, S_e 为炸药 Hugoniot 线的斜率。激光驱动飞片的情况与电爆炸驱动飞片的情况相似, 可以根据飞片的材料类型采用(3)式和(4)式计算脉冲作用时间。

飞片质点速度的表达式为^[8]

$$u_p = \frac{\sqrt{B^2 - 4AC^*} - B}{2A} \quad (5)$$

式中: $A = S_e \rho_e - S_f \rho_f$, $B = \rho_e c_e + 2S_f \rho_f v_f + \rho_f c_f$, $C^* = -\rho_f c_f v_f - S_f \rho_f v_f^2$; c_f 为飞片内初始声速, S_f 为飞片 Hugoniot 线的斜率; ρ_e 和 ρ_f 分别为炸药和飞片的密度。表 1 是几种常见材料的 Hugoniot 线参数, 其中 ρ 为密度, c 为声速, S 为 Hugoniot 线的斜率。

表 1 几种常见材料的 Hugoniot 线参数

Table 1 Parameters of Hugoniot curve of some common materials

Material	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$c/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	S	Material	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$c/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	S
HNS-IV ^[6]	1.600 0	1.430	2.630	Ti ^[6]	4.511 8	5.220	0.767
Al ^[9]	2.785 0	1.290	5.370	Kapton ^[11]	1.414 0	2.737	1.410

根据质点速度就可以得到冲击入射压力 p , 可以表示为^[8]

$$p = (c_e + S_e u_p) \rho_e u_p \quad (6)$$

压力和质点速度的具体计算方法已在文献[8]中详细阐述。Bowden 等^[4] 和 Schwarz 等^[5] 利用铜箔电爆炸和激光驱动飞片冲击起爆 HNS-IV 炸药, 并利用 VISAR 和 PDV 测试了飞片的阈值速度。尽管他们使用的 HNS-IV 炸药的颗粒度存在一定差距, 但是用 25 μm 的 Kapton 飞片冲击起爆 HNS-IV 炸药时, 所计算的入射压力和脉冲作用时间的相对误差在 12% 以内, 因此可以采用 Bowden 等^[4] 和 Schwarz 等^[5] 获得的飞片起爆 HNS-IV 阈值速度计算冲击起爆判据。

根据飞片的材料采用(3)式和(4)式计算脉冲作用时间 τ , 并将其与文献结果相比较, 如表 2 所示。由表 2 可知, 压力和脉冲作用时间的计算结果与文献结果的相对误差(分别为 δ_1 和 δ_2) 均在 7.0% 以内。

将计算结果按照 $p^n\tau$ 形式进行拟合可得 HNS-IV 炸药的冲击起爆判据参数为: $K=1.38$ 和 $n=2.08$ 。拟合结果的决定因子 $R^2=0.9902$, 决定因子 R^2 越接近于 1, 说明拟合精度越高。本研究的拟合精度高于文献[4, 6], 因此, HNS-IV 炸药的 $p^n\tau$ 判据可以表示为 $p^{2.08}\tau > 1.38 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$)。图 1 为 HNS-IV 炸药的 p - τ 曲线。

表 2 计算结果与文献结果的比较

Table 2 Comparing calculated results with literature results

$d_t/\mu\text{m}$	Material	$v_t/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	p/GPa		$\delta_1/\%$	τ/ns		$\delta_2/\%$
			Calc.	Ref.		Calc.	Ref.	
25.0	Kapton	2.84 ^[5]	10.43	9.8 ^[5]	6.43	10.80	10.3 ^[5]	4.85
76.0	Kapton	1.84 ^[6]	5.22	5.3 ^[5]	1.51	38.00	36.3 ^[5]	4.68
140.0	Kapton	1.51 ^[5]	4.09	4.0 ^[5]	2.25	73.80	70.8 ^[5]	4.24
165.0	Kapton	1.53 ^[5]	4.16	4.1 ^[5]	1.46	86.70	83.1 ^[5]	4.33
254.0	Kapton	1.46 ^[5]	3.90	3.8 ^[5]	2.63	135.00	130.0 ^[5]	3.85
3.0	Al	3.66 ^[4]	27.27	27.1 ^[4]	0.63	1.61	1.6 ^[4]	0.62
3.5	Al	3.30 ^[4]	23.25	23.1 ^[4]	0.65	1.96	1.9 ^[4]	3.16
4.0	Al	3.16 ^[4]	21.76	21.6 ^[4]	0.74	2.28	2.2 ^[4]	3.64
4.5	Al	2.92 ^[4]	19.29	19.1 ^[4]	0.99	2.64	2.6 ^[4]	1.54
5.0	Al	2.77 ^[4]	17.81	17.7 ^[4]	0.62	2.99	2.9 ^[4]	3.10
25.0	Kapton	2.96 ^[4]	11.12	11.1 ^[4]	0.18	10.70	10.7 ^[4]	0

1.2 冲击起爆 James 判据

1996 年, James 在 Walker-Wasley 和 $p^n\tau$ 判据的基础上提出了 James 判据。这种起爆判据具有更大的适用范围, 其表达式为^[2]

$$\Sigma_c/\Sigma + E_c/E = 1 \quad (7)$$

式中: Σ 为比动能, $\Sigma = u^2/2$; u 为炸药的质点速度; E 为能通量, $E = pu\tau$; Σ_c 和 E_c 为常数, 由炸药的特性决定。只有当 $\Sigma_c/\Sigma + E_c/E < 1$ 时, 炸药才会起爆。

利用表 2 中计算得到的 p 、 τ 、 u 可以得到 Σ 和 E , 然后按照 (7) 式的形式采用最小二乘法拟合得到 James 判据的参数: $\Sigma_c = 0.1900$, $E_c = 0.0954$, $R^2 = 0.8669$ 。图 2 为 HNS-IV 炸药的 E - Σ 曲线。由图 2 可知, James 判据的拟合精度较 $p^n\tau$ 判据的拟合精度差, 这可能是因为 James 判据额外考虑了质点速度对起爆情况的影响, 加大了拟合的不确定度。参数拟合结果与文献[4]中的报道值相近 ($\Sigma_c = 0.2042$, $E_c = 0.0879$), 因此, HNS-IV 炸药的 James 判据可以表示为 $0.1900/\Sigma + 0.0954/E = 1$ 。

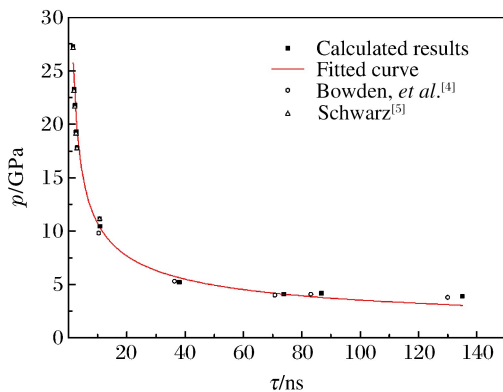
图 1 HNS-IV 炸药的 p - τ 曲线

Fig. 1 Pressure versus duration for HNS-IV explosive

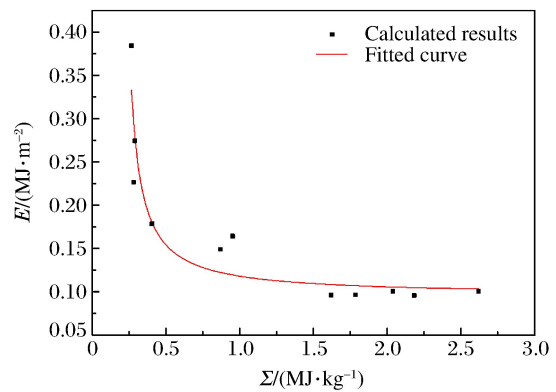
图 2 HNS-IV 炸药的 E - Σ 曲线

Fig. 2 Specific kinetic energy versus energy fluence for HNS-IV explosive

2 铜叠氮化物爆炸驱动飞片冲击起爆 HNS-Ⅳ 炸药

基于纳米多孔铜“原位”转化为铜叠氮化物技术的微装药起爆装置,由于具有体积小、能避免装药和压药的潜在危险性、起爆能量低及环境友好等优点,已成为 MEMS 火工元器件研究的主要方向之一。采用 ANSYS/LS-DYNA 程序模拟铜叠氮化物爆炸驱动飞片冲击起爆 HNS-Ⅳ 炸药的过程,具体模型和参数参考文献[11-12]。飞片的直径与微装药直径相同,材料为金属钛;加速膛长度固定为 560 μm,材料为聚碳酸酯;HNS-Ⅳ 的装药尺寸为∅4 mm×4 mm。模拟过程中,起爆情况可以通过观察 HNS-Ⅳ 炸药在不同起爆深度下压力曲线峰值的成长情况或压力场云图的变化情况确定,如果 HNS-Ⅳ 炸药受到外界冲击载荷的作用后能够形成稳定的爆轰波(压力稳定在 30 GPa 附近),则可以认为 HNS-Ⅳ 炸药被起爆,否则未被起爆,具体情况见文献[12]。

对于铜叠氮化物爆炸驱动飞片起爆 HNS-Ⅳ 炸药,研究表明,飞片呈现为“曲面状”^[13]。因此不能用(3)式和(4)式计算其脉冲作用时间。考虑到飞片形状的影响,曲面飞片的脉冲作用时间可以近似为^[2]

$$\tau = \frac{D_0}{18c_e} \tag{8}$$

式中: D_0 为飞片的初始直径。炸药内的声速 c_e 计算方法如下^[2]

$$c_e = \left\{ (w - u) \left\{ \frac{\Gamma u}{2} + \frac{w + B_1 u}{A_1} \left[w - u \left(1 + \frac{\Gamma}{2} \right) \right] \right\} \right\}^{0.5} \tag{9}$$

式中: w 为炸药的冲击波速度; u 为炸药的质点速度; A_1 和 B_1 分别为为 w - u 曲线的截距和斜率; Γ 为 Grüneisen 系数,一般取 $\Gamma=1$ 。根据模拟得到的飞片速度,并考虑飞片的实际形状,采用(8)式和(9)式计算出冲击瞬间的入射压力、脉冲作用时间和质点速度。之前冲击起爆国内生产的 HNS-Ⅳ 炸药实验数据表明:当微装药的厚度为 0.3 mm 时,直径在 0.5~1.0 mm 范围内均不能起爆 HNS-Ⅳ 炸药;当微装药的厚度为 0.6 mm 时,直径在 0.8~1.0 mm 范围内均能起爆 HNS-Ⅳ 炸药^[14]。据此,调整接触的能量传输控制系数为 0.01。调整后,数值模拟结果与实验结果相一致。表 3 给出了铜叠氮化物爆炸驱动飞片起爆 HNS-Ⅳ 炸药的模拟结果。

表 3 铜叠氮化物爆炸驱动飞片起爆 HNS-Ⅳ 炸药的模拟结果
Table 3 Simulation results of initiating HNS-Ⅳ explosive by micro-charge detonation-driven flyer

Explosive size/ (mm×mm)	v_f / (km·s ⁻¹)	p /GPa	τ /ns	u / (km·s ⁻¹)	$p^{2.08}\tau$ / (GPa ^{2.08} ·μs)	$\frac{0.1900}{\Sigma} + \frac{0.0954}{E}$	Simulation results
∅0.8×0.3	2.29	15.70	4.381	1.68	1.35	0.960	Non-detonation
∅0.8×0.4	2.43	17.16	4.155	1.76	1.54	0.883	Non-detonation
∅0.8×0.5	2.62	19.23	3.881	1.88	1.82	0.787	Detonation
∅0.8×0.6	2.67	19.79	3.815	1.91	1.90	0.766	Detonation
∅0.8×0.7	2.82	21.50	3.628	2.00	2.14	0.707	Detonation
∅0.8×0.8	2.86	21.96	3.581	2.03	2.21	0.690	Detonation
∅0.4×0.5	2.45	17.38	2.062	1.78	0.78	1.620	Non-detonation
∅0.5×0.5	2.56	18.57	2.477	1.85	1.08	1.230	Non-detonation
∅0.6×0.5	2.58	18.79	2.952	1.86	1.32	1.030	Non-detonation
∅0.7×0.5	2.61	19.12	3.408	1.88	1.58	0.886	Detonation
∅0.9×0.5	2.61	19.12	4.381	1.88	2.03	0.713	Detonation
∅1.0×0.5	2.61	19.12	4.868	1.88	2.25	0.653	Detonation

由表 3 可知,铜叠氮化物存在最佳装药尺寸,当铜叠氮化物的装药尺寸为∅0.7 mm×0.5 mm、加速膛长度为 560 μm 时,28 μm 厚的钛飞片能冲击起爆 HNS-Ⅳ 炸药。根据表 3 中数据可以修正之前拟合得到的 $p^n\tau$ 判据和 James 判据。图 3 为 HNS-Ⅳ 炸药的 $p^n\tau$ 判据散点分布图。由图 3 可知,数值模拟结果与拟合的 $p^n\tau$ 判据基本一致。当铜叠氮化物的装药尺寸为∅0.8 mm×0.4 mm 时,模拟结果表明

HNS-IV 炸药未起爆,而拟合的 $p^n\tau$ 判据表明 HNS-IV 炸药起爆。这可能是由于各研究机构所采用 HNS-IV 炸药的合成工艺、配方不一致,导致了 HNS-IV 炸药的密度、孔隙率等参数不同(国内使用的 HNS-IV 炸药密度为 1.56 g/cm^3 ,国外报道的 HNS-IV 密度为 1.60 g/cm^3),进而影响飞片阈值速度(50%起爆 HNS 时飞片的速度)的测量以及压力、质点速度和脉冲作用时间的计算。因此,依据小飞片(直径小于 1 mm ,厚度小于 $50 \mu\text{m}$)冲击起爆 HNS-IV 炸药的数值模拟和实验研究,可以将 HNS-IV 炸药 $p^n\tau$ 判据调整为 $p^{2.08}\tau > 1.54 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$)。调整后的 $p^n\tau$ 判据能更准确地反映国内生产 HNS-IV 炸药的冲击起爆性能。

图 4 为 HNS-IV 炸药的 James 判据散点分布图。从图 4 可以看出,拟合的 James 判据与模拟结果基本一致。当铜叠氮化物的装药尺寸为 $\varnothing 0.8 \text{ mm} \times 0.3 \text{ mm}$ 和 $\varnothing 0.8 \text{ mm} \times 0.4 \text{ mm}$ 时,模拟结果表明 HNS-IV 炸药未起爆,而拟合的 James 判据表明 HNS-IV 炸药起爆。在实际冲击起爆实验中,装药尺寸为 $\varnothing 0.8 \text{ mm} \times 0.3 \text{ mm}$ 和 $\varnothing 0.8 \text{ mm} \times 0.4 \text{ mm}$ 的铜叠氮化物驱动 $28 \mu\text{m}$ 厚钛飞片,只有极少数能起爆国内生产的 HNS-IV 炸药,成功起爆概率小于 50%,这很好地反映在拟合的 James 判据上。因此,依据小飞片(直径小于 1 mm ,厚度小于 $50 \mu\text{m}$)冲击起爆密度为 1.56 g/cm^3 的 HNS-IV 炸药的数值模拟和实验研究,可以将 James 判据调整为 $0.1900/\Sigma + 0.0954/E < 0.883$,即 $0.215/\Sigma + 0.108/E < 1$ 。

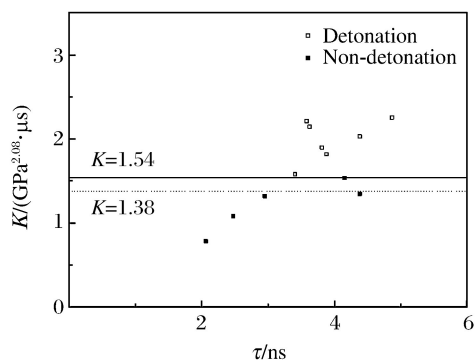


图 3 HNS-IV 炸药的 $p^n\tau$ 判据散点分布

Fig. 3 Scatter distribution map of $p^n\tau$ criteria for HNS-IV explosive

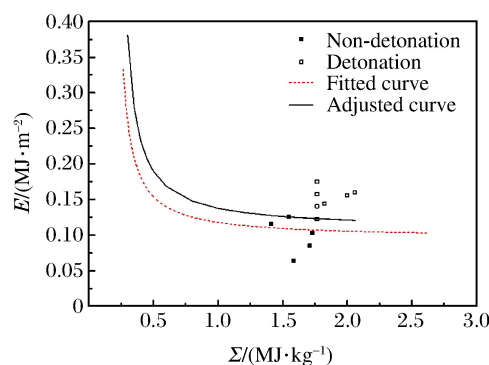


图 4 HNS-IV 炸药 James 判据散点分布

Fig. 4 Scatter distribution map of James criteria for HNS-IV explosive

3 结 论

考虑到能量加载方式和飞片材料对冲击起爆性能的影响,根据文献测量的飞片阈值速度拟合得到了 HNS-IV 炸药的两种冲击起爆判据:(1) $p^n\tau$ 判据, $p^{2.08}\tau > 1.38 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$), $R^2 = 0.9902$; (2) James 判据, $0.1900/\Sigma + 0.0954/E < 1$, $R^2 = 0.8669$ 。从决定因子 R^2 来看,本研究的拟合精度较文献报道的结果更高。

利用 ANSYS/LS-DYNA 程序模拟了铜叠氮化物爆炸驱动飞片起爆 HNS-IV 炸药的过程,模拟结果与文献报道的实验结果一致。依据小飞片冲击起爆 HNS-IV 炸药的数值模拟和实验研究,修正了 HNS-IV 炸药的两种冲击起爆判据, $p^n\tau$ 判据调整为 $p^{2.08}\tau > 1.54 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$), James 判据调整为 $0.215/\Sigma + 0.108/E < 1$ 。调整后的起爆判据与数值模拟结果相一致,更能准确地反映国内生产的 HNS-IV 炸药的冲击起爆性能,具有更高的实用性。

参考文献:

- [1] JAMES H R. Critical energy criterion for the shock initiation of explosives by projectile impact [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 1988, 13(2): 35-41.
- [2] JAMES H R. An extension to the critical energy criterion used to predict shock initiation thresholds [J]. Propellants,

- Explosives, Pyrotechnics, 1996, 21(1): 8-13.
- [3] HASKINS P J, COOK M D. A modified criterion for the prediction of shock initiation threshold for flyer plate and rod impacts [C]//14th International Detonation Symposium, Coeur d'Alene Resort, Idaho, 2010.
- [4] BOWDEN M, MAISEY M P, KNOWLES S. Shock initiation of hexanitrostilbene at ultra-high shock pressures and critical energy determination [C]//AIP Conference Proceedings, Maryland: AIP Publishing, 2012, 1426(1): 615-618.
- [5] SCHWARZ A C. Study of factors which influence the shock-initiation sensitivity of hexanitrostilbene (HNS): SAND-80-2372 [R]. Albuquerque, NM: Sandia National Laboratory, 1981.
- [6] BOWDEN M D, MAISEY M P. Determination of critical energy criteria for hexanitrostilbene using laser-driven flyer plates [C]//Optical Engineering & Applications, International Society for Optics and Photonics, 2008: 707004.
- [7] WALKER F E, WASLEY R J. Critical energy for shock initiation of heterogeneous explosives [J]. Explosive Stoffe, 1969, 17(1): 9-14.
- [8] YADAV H S. Initiation of detonation in explosives by impact of projectiles [J]. Defence Science Journal, 2006, 56(2): 169-177.
- [9] 张宝坪, 张庆明, 黄风雷. 爆轰物理学 [M]. 北京: 兵器工业出版社, 2006: 241-244.
- [10] NEAL W, BOWDEN M. High fidelity studies of exploding foil initiator bridges, Part 2: Experimental results [C]//AIP Conference Proceedings, AIP Publishing, 2017, 1793(1): 030022.
- [11] TARVER C M, CHIDESTER S K. Ignition and growth modeling of short pulse shock initiation experiments on fine particle Hexanitrostilbene (HNS) [C]//Journal of Physics: Conference Series, Bristol: IOP Publishing, 2014, 500(5): 052044.
- [12] 郭俊峰, 曾庆轩, 李明愉, 等. 叠氮化铜驱动飞片起爆 HNS-IV 的研究 [J]. 火工品, 2015(6): 1-4.
GUO J F, ZENG Q X, LI M Y, et al. Study on HNS-IV initiated by flyer driven by cupric azide [J]. Initiators & Pyrotechnics, 2015(6): 1-4.
- [13] 郭俊峰, 曾庆轩, 李明愉, 等. 飞片材料对微装药驱动飞片形貌的影响 [J]. 高压物理学报, 2017, 31(3): 315-320.
GUO J F, ZENG Q X, LI M Y, et al. Influence of flyer material on morphology of flyer driven by micro charge [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2017, 31(3): 315-320.
- [14] ZENG Q X, LI B, LI M Y, et al. A miniature device for shock initiation of hexanitrostilbene by high-speed flyer [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2016, 41(5): 864-869.

Short Pulse Shock Initiation Criteria for HNS-IV Explosive

GUO Junfeng^{1,2}, ZENG Qingxuan^{1,2}, LI Mingyu¹, YU Qingxia¹

(1. State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

2. National Key Laboratory of Applied Physics and Chemistry, Shaanxi Applied Physics and Chemistry Research Institute, Xi'an 710061, China)

Abstract: Flyer shock-initiated HNS-IV explosive is an important topic in the research of the in-line explosive train. In this study, with the influence of the energy loading method, which may be electrical explosion, laser and micro charge detonation, and flyer material on the shock initiation taken into consideration, the parameters of $p^n\tau$ and the James criteria for HNS-IV explosive were obtained according to flyer threshold velocity measured by literatures. Meanwhile, the process of initiating HNS-IV explosive the flyer driven by copper azides was simulated using the ANSYS/LS-DYNA program, based on whose results the parameters of $p^n\tau$ and the James criteria for HNS-IV explosive were adjusted. It was found that the $p^n\tau$ criteria for HNS-IV explosive should be adjusted to $p^{2.08}\tau > 1.54 \text{ GPa}^{2.08} \cdot \mu\text{s}$ ($0.001 \mu\text{s} < \tau < 0.14 \mu\text{s}$, $3.8 \text{ GPa} < p < 28.0 \text{ GPa}$), while the James criteria should be adjusted to $0.215/\Sigma + 0.108/E < 1$. The two adjusted criteria, which might have a higher practicability, were consistent with the simulation results.

Keywords: shock initiation; HNS-IV; initiation criteria; numerical simulation

JB-9014 钝感炸药冲击 Hugoniot 关系测量*

刘俊明¹, 张旭², 裴红波², 舒俊翔², 覃双¹, 钟斌², 张蓉²

(1. 中国工程物理研究院研究生部, 四川 绵阳 621999;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999)

摘要: 采用火炮加载技术对 JB-9014 钝感炸药进行一维平面冲击实验。通过激光干涉测速仪测量冲击波到达炸药样品前、后表面的时刻以及炸药/镀膜氟化锂窗口界面粒子速度。利用冲击波到达炸药样品前、后表面的时刻差和炸药样品的厚度计算出冲击波在炸药样品中的传播速度, 并结合炸药样品/氟化锂窗口接触面处粒子速度求出炸药样品冲击波后粒子速度, 进而获得了炸药样品在 3.1~9.7 GPa 压力范围内的冲击 Hugoniot 关系。对炸药样品中冲击波速度以及波后粒子速度进行不确定度分析, 得到炸药样品中冲击波速度和波后粒子速度的合成标准不确定度约为 0.54% 和 1.7%。将未反应炸药的冲击 Hugoniot 曲线和冲击波层面的 Rankine-Hugoniot 关系进行联立得到冲击波后炸药样品内的压力和密度, 进而拟合得到炸药样品在冲击绝热状态下沿 (p, ρ) 面的 p - ρ 曲线。

关键词: 激光干涉测速仪; 冲击 Hugoniot 关系; 钝感炸药; 粒子速度; 不确定度

中图分类号: TJ55; O521.3

文献标识码: A

炸药的冲击 Hugoniot 关系是指炸药从同一初始状态出发, 经过不同的冲击压缩达到的最终状态的集合, 反映了冲击波后炸药热力学量之间的关系^[1], 是炸药性能的关键参数, 对研究炸药的冲击起爆、确定化学反应速率函数、进行爆轰数值模拟具有重要意义。实际应用中使用的最多的炸药 Hugoniot 关系就是炸药中冲击波速度 D_s 与波后粒子速度 u_s 之间的关系, 研究发现大部分炸药 D_s 与 u_s 近似成线性关系, 即

$$D_s = c_{0,s} + \lambda_s u_s \quad (1)$$

式中: $c_{0,s}$ 和 λ_s 为待定系数, 即 Hugoniot 参数, 下标 s 代表炸药样品。

到目前为止, 国内外测试炸药 Hugoniot 关系常用的实验方法有楔形试验法^[2]、压力对比法^[3-4]、组合式电磁速度计法^[5-8]、速度对比法^[9]等。采用的测试手段有扫描相机^[2]、锰铜压力计^[4]、电磁速度计^[5-8]等。张旭等^[4]采用压力对比法对 JB-9014 炸药进行了实验研究, 利用锰铜压力计测量待测炸药样品和 LY12 铝标准样品在 LY12 铝飞片同时撞击下的界面压力, 运用冲击波关系式和正交回归直线拟合分析, 确定了 JB-9014 炸药的冲击 Hugoniot 关系。但是, 由于锰铜压力计响应时间一般大于 100 ns, 响应时间较慢且测量数据量较小, 测量精度偏低, 因此有必要发展新的测试方法来提高 JB-9014 炸药冲击 Hugoniot 数据的测试精度。

为提高 JB-9014 炸药冲击 Hugoniot 数据的测试精度, 本次实验利用新的测试手段——激光干涉测速仪(PDV), 通过对不同冲击压力下炸药样品的冲击波速度 D_s 和波后粒子速度 u_s 的测量, 获得了在 3.1~9.7 GPa 压力范围内 JB-9014 炸药的冲击 Hugoniot 关系。实验在中国工程物理研究院流体物理研究所 $\varnothing 57$ mm 口径火炮上进行, 实验中使用的 JB-9014 炸药是国内研制的以 TATB 为主要成分的塑

* 收稿日期: 2017-10-31; 修回日期: 2017-11-17

基金项目: 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金(U1630113); 国防技术基础项目(JSZL2015212C001)

作者简介: 刘俊明(1990—), 男, 硕士研究生, 主要从事炸药状态方程研究. E-mail: 13521934162@163.com

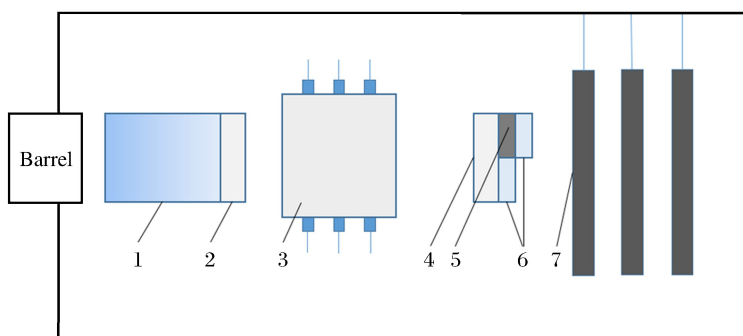
通信作者: 张旭(1972—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事流体动力学研究. E-mail: caepzx@sohu.com

性黏结炸药,其组分中包含质量分数为95%的TATB和5%黏结剂,其典型装药密度为 1.895 g/cm^3 ,对应的炸药爆速为 7660 m/s 。

1 实验部分

1.1 实验装置

采用火炮加载技术和激光干涉测速技术对炸药样品进行一维平面冲击实验,实验整体装置示意图如图1所示。实验装置主要包括:火炮加载装置、蓝宝石飞片、激光飞片测速环、样品装置靶、激光干涉测速仪以及示波器等。实验中使用的炸药样品尺寸为 $\varnothing 20\text{ mm} \times 5\text{ mm}$,炸药样品安装在基板上,两个LiF光学窗口分别安装于炸药后表面和基板后表面上。将飞片安装在弹托上,利用 $\varnothing 57\text{ mm}$ 口径火炮将弹托发射且最终以速度 W 飞离炮管,并撞击样品装置靶的基板。样品装置靶的实物图如图2所示,示意图如图3所示。利用PDV同时测量基板/LiF窗口交界面和炸药样品/LiF窗口交界面粒子速度。



1. Sabot; 2. Sapphire flyer; 3. Velocity-measuring ring; 4. Sapphire substrate;
5. Explosive sample; 6. LiF optical window; 7. Target buffer

图1 实验装置示意图

Fig. 1 Illustration of experimental devices

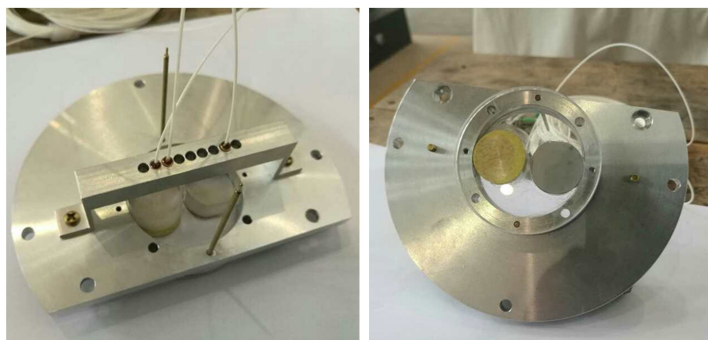


图2 炸药样品装置靶

Fig. 2 Explosive target sample devices

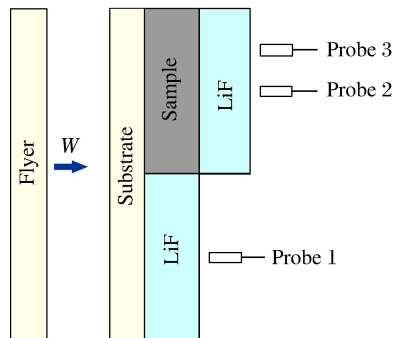


图3 炸药样品装置示意图

Fig. 3 Illustration of explosive sample devices

1.2 实验原理

本次冲击 Hugoniot 关系测量实验中,冲击波速度 D_s 是通过测量冲击波在一定厚度样品中的走时得到,其精度主要取决于冲击波走时的测量精度。利用激光干涉测速仪记录冲击波到达炸药前、后两个表面的时刻 t_1 、 t_2 ,则 $\Delta t = t_2 - t_1$ 。由于激光干涉测速仪的响应时间很快(5 ns),所以能够较为精准地记录冲击波到达炸药样品前、后表面的时刻。使用数显千分尺测定炸药样品的厚度 H ,则炸药样品内冲击波速度 D_s 可表示为

$$D_s = H/\Delta t \quad (2)$$

冲击波后炸药样品粒子速度 u_s 测量原理如图4所示。当飞片以一速度 W 撞击基板后,将分别在

飞片和基板中产生左行和右行冲击波,右行冲击波使基板中的压力、粒子速度等状态由初始的 $p_{0,L}$ 、 $u_{0,L}$ 突变为 $p_{1,L}$ 、 $u_{1,L}$ 。其后,冲击波由基板传入炸药样品中,使基板和炸药样品中的压力、粒子速度等由 $p_{1,L}$ 、 $u_{1,L}$ 、 $p_{0,s}$ 、 $u_{0,s}$ 突变为 p_L 、 u_L 、 p_s 、 u_s ,如图 4(a)所示。当冲击波经由炸药传入 LiF 窗口中后,使炸药样品和窗口材料中的压力、粒子速度由 p_s 、 u_s 、 $p_{0,w}$ 、 $u_{0,w}$ 突变为 $p_{1,s}$ 、 $u_{1,s}$ 、 p_w 、 u_w ,如图 4(b)所示。其中 PDV 记录的为炸药/LiF 窗口交界面的粒子速度,即冲击波后 LiF 窗口材料的粒子速度 u_w ,由连续性条件可知 $p_{1,s} = p_w$ 、 $u_{1,s} = u_w$ 。下标 L 代表蓝宝石基板,下标 w 代表 LiF 窗口,下标 0 表示初态。

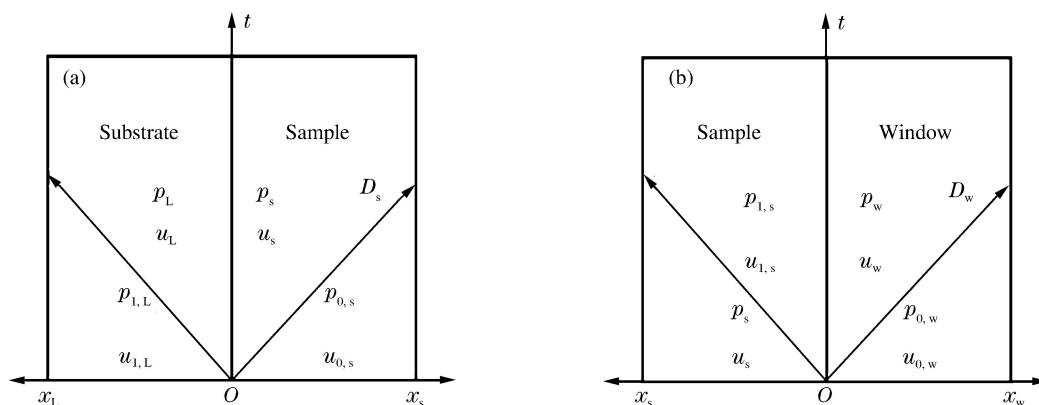


图 4 实验原理图

Fig. 4 Sketch of experimental principle

由凝聚介质冲击波基本关系式和实验关系式^[10]可知,LiF 窗口波后压力 p_w 和冲击波速度 D_s 可表示为

$$p_w = \rho_{0,w} D_w u_w \quad (3)$$

$$D_w = c_{0,w} + \lambda_w u_w \quad (4)$$

式中: $c_{0,w} = 5.176 \text{ km/s}$, $\lambda_w = 1.353$ 为 LiF 窗口材料($\rho_{0,w} = 2.641 \text{ g/cm}^3$)的 Hugoniot 参数。炸药样品波后压力 p_s 和密度 ρ_s 可表示为

$$p_s = \frac{1}{2} u_w (\rho_{0,w} D_w + \rho_{0,s} D_s) \quad (5)$$

$$p_s = \rho_{0,s} D_s u_s \quad (6)$$

$$\rho_s = \frac{\rho_{0,s} D_s}{D_s - u_s} \quad (7)$$

由于炸药样品与窗口材料阻抗不匹配,所以由激光干涉测速仪(PDV)测得的 LiF 窗口波后粒子速度 u_w 并不等于炸药样品冲击波后粒子速度 u_s 。由(3)式~(6)式得到炸药样品波后粒子速度 u_s 为

$$u_s = \frac{u_w [\rho_{0,w} (c_{0,w} + \lambda_w u_w) + \rho_{0,s} D_s]}{2 \rho_{0,s} D_s} \quad (8)$$

由(2)式、(8)式可见,在实验中,只需要测得冲击波在炸药内走时 Δt 、炸药样品厚度 H 以及冲击波后 LiF 窗口粒子速度 u_w ,即可获得炸药样品的冲击波速度 D_s 及对应的波后粒子速度 u_s 。

2 实验结果分析

2.1 实验结果

利用 PDV 同时测量基板/LiF 窗口交界面和炸药样品/LiF 窗口交界面粒子速度,实验结果如图 5~图 8 所示。

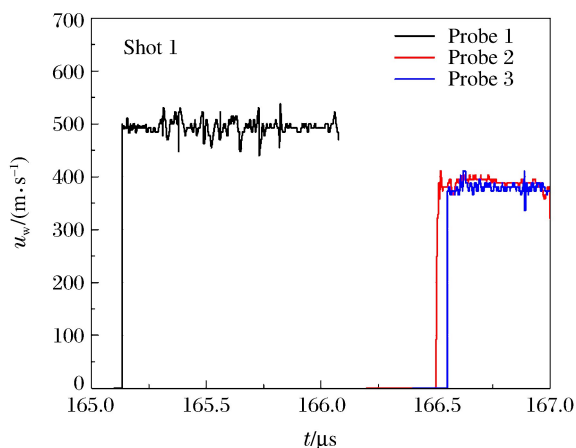


图5 3.966 0 GPa 压力下的粒子速度-时间图

Fig. 5 Particle velocity-time relation at 3.966 0 GPa

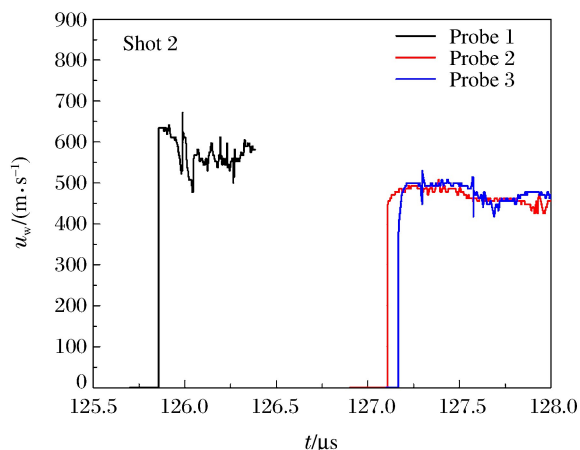


图6 5.551 5 GPa 压力下的粒子速度-时间图

Fig. 6 Particle velocity-time relation at 5.551 5 GPa

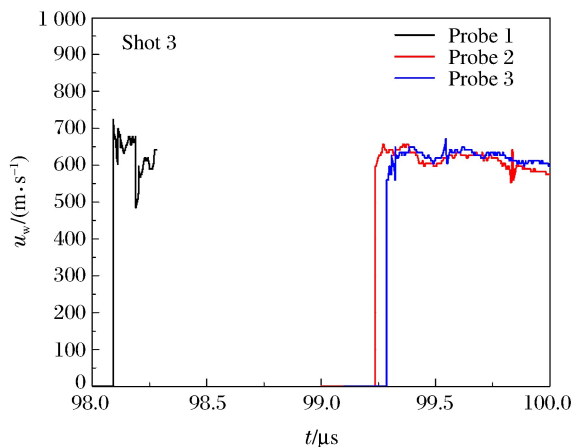


图7 7.552 7 GPa 压力下的粒子速度-时间图

Fig. 7 Particle velocity-time relation at 7.552 7 GPa

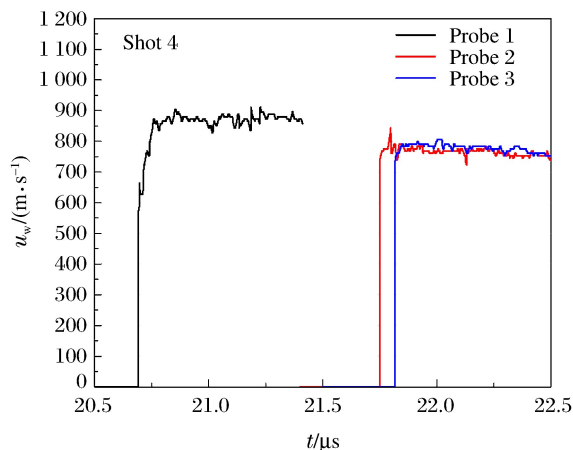


图8 9.726 5 GPa 压力下的粒子速度-时间图

Fig. 8 Particle velocity-time relation at 9.726 5 GPa

应用(2)式与(8)式,可分别得到冲击波后炸药样品内的冲击波速度 D_s 和相应波后粒子速度 u_s , 计算结果见表1中的 Shot 1~Shot 4。

表1中 Shot 5~Shot 8 是本题组在火炮上利用反向碰撞法获得的 JB-9014 炸药冲击 Hugoniot 数据。反向碰撞法是将样品作为飞片去撞击透明 LiF 光学窗口,通过激光干涉测速仪(PDV)测量炸药冲击靶速度以及炸药/镀膜氟化锂窗口界面粒子速度,然后根据冲击波阵面上的守恒条件计算炸药样品的冲击 Hugoniot 关系。反向碰撞法的具体实验步骤和测量原理可参考文献[14]。

表1中 Shot 9~Shot 12 是本题组利用 PVDF 压电薄膜采用测压法获得的 JB-9014 炸药冲击 Hugoniot 数据。PVDF 压电薄膜具有响应时间快(25 ns)^[11]、测压范围宽、耐冲击等优点,在冲击、爆炸压力测量中得到广泛应用。通过 PVDF 压电薄膜测量冲击波到达炸药样品前表面、中部的时刻和压力,利用数显千分尺测量炸药样品的厚度。根据(2)式、(6)式,可分别得到炸药样品内的冲击波速度 D_s 和相应波后粒子速度 u_s 。

将3种方法获得的炸药样品内的冲击波速度 D_s 及波后粒子速度 u_s 采用正交回归直线拟合得到炸药样品在 3.1~9.7 GPa 压力范围内的冲击 Hugoniot 关系,拟合结果如图9所示。与文献[4]给出的同种 JB-9014 炸药的 Hugoniot 数据相比,本研究测得的数据整体偏高。文献[4]中的数据是利用锰铜压力计获得,锰铜压力计响应时间较慢(>100 ns)且测量数据量较小,测量精度与压阻系数的标定精度、

封装保护等因素有关,因此测试数据的精度较低、分散性较大。

根据(6)式、(7)式,可得到炸药样品冲击波后的压力 p_s 和密度 ρ_s ,计算结果见表 1,将冲击波后炸药样品内的压力 p_s 和密度 ρ_s 数据拟合可得到 JB-9014 炸药在冲击绝热状态下沿 (p,ρ) 面的 p - ρ 曲线,如图 10 所示。

表 1 实验测量结果
Table 1 Experimental measurement results

Experiment No.	Experiment set-up	$\rho_0/$ ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	$W/$ ($\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$)	$u_w/$ ($\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$)	$u_s/$ ($\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$)	$D_s/$ ($\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$)	$p_s/$ GPa	$\rho_s/$ ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)
Shot 1	Sapphire flyer	1.894	0.689	0.363	0.574	3.647 40	3.966 0	2.246 5
Shot 2	Sapphire+JB-9014 explosive	1.893	0.805	0.484	0.735	3.990 23	5.551 5	2.320 4
Shot 3	Sample (5 mm)+LiF window	1.893	1.076	0.625	0.913	4.369 33	7.552 7	2.393 0
Shot 4		1.898	1.324	0.766	1.084	4.726 97	9.726 5	2.456 3
Shot 5	Sapphire flyer	1.893	0.696	0.216	0.480	3.433	3.119	2.200 0
Shot 6	JB-9014 explosive	1.889	0.918	0.300	0.618	3.788	4.422	2.257 3
Shot 7	Sample (20 mm)+LiF	1.893	1.173	0.394	0.779	4.028	5.941	2.346 9
Shot 8	Window+(PDV)	1.891	1.490	0.527	0.963	4.501	8.196	2.405 7
Shot 9	Copper flyer	1.898	0.634		0.481	3.408 32	3.112 7	2.204 0
Shot 10	PVDF gauge	1.898	0.989		0.604	3.776 49	4.229 3	2.253 4
Shot 11	Cu (5 mm)+JB-9014 sample	1.893	1.003		0.639	4.000 00	4.838 5	2.252 9
Shot 12	x2 (5 mm)+Cu (15 mm)	1.889	1.074		0.813	4.135 71	6.350 0	2.356 2

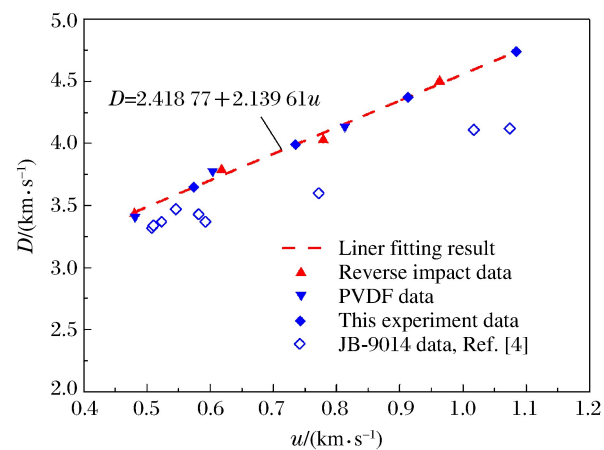


图 9 D - u 关系
Fig. 9 D - u relation

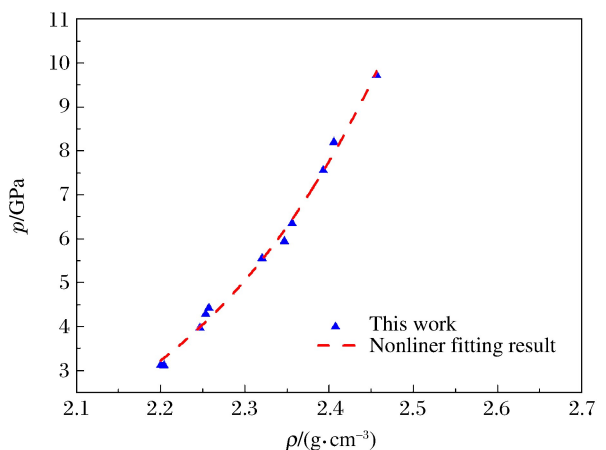


图 10 p - ρ 关系
Fig. 10 p - ρ relation

2.2 误差分析

Hugoniot 数据测量实验通常是进行冲击波速度 D_s 和冲击波后粒子速度 u_s 的测量,其中 D_s 是通过测量冲击波在一定厚度样品中的走时得到,而 u_s 通常不能直接测量,必须通过相关量的间接测量得到。作为一个完整的实验数据,必须给出其测量不确定度。

本次测量 JB-9014 炸药 Hugoniot 数据的实验,不确定度主要来源于炸药样品中冲击波速度 D_s 、粒子速度 u_s 、LiF 窗口粒子速度 u_w 、Hugoniot 参数 $c_{0,w}$ 和 $\lambda_{0,w}$ 以及 LiF 窗口材料折射率变化。其中 LiF 窗口折射率变化引入的不确定度在将激光干涉测速仪(PDV)频率信号转化为速度信号时已经做出修正,修正系数为 1.267 8。炸药样品厚度测量的标准不确定度不超过 0.2%^[12],前、后表面时刻差测量的标准不确定度不超过 0.5%。由(2)式和不确定度传递规律^[13],冲击波速度 D_s 的合成标准不确定度不超过 0.54%。如果 LiF 窗口材料的 Hugoniot 参数 $c_{0,w}$ 和 $\lambda_{0,w}$ 的不确定度按 0.5%^[14]计算,窗口材料粒子

速度 u_w 的标准不确定度按 1%^[14] 计算,窗口材料和炸药样品初始密度 $\rho_{0,w}$ 和 $\rho_{0,s}$ 的不确定度由不确定度传递规律计算得到约为 1%,由(8)式和不确定度传递规律, u_s 的合成标准不确定度约为 1.7%。

3 结 论

(1) 采用火炮加载技术和激光干涉测速技术对 JB-9014 炸药样品进行一维平面冲击实验,测量样品冲击 Hugoniot 数据。实验原理简单,数据处理方便,精度较高,实验获得的冲击 Hugoniot 数据粒子速度合成标准不确定度约为 1.7%,冲击波速度的合成标准不确定度约为 0.54%,不确定度较小。

(2) 利用激光干涉测速仪测量炸药样品冲击波后粒子速度实验装置简单,响应时间快,测量信号前沿窄,测量精度高。

(3) 通过实验测量和曲线拟合得到了未反应 JB-9014 炸药在 3.1~9.7 GPa 压力范围内的冲击 Hugoniot 曲线为 $D=2.41877+2.13961u$,同时获得了该炸药在冲击绝热状态下沿 (p,ρ) 面上的 $p-\rho$ 曲线。

参考文献:

- [1] 经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 第2版. 北京: 科学出版社, 1999: 197-198.
JING F Q. Introduction to experimental equation of state [M]. 2nd Ed. Beijing: Science Press, 1999: 197-198.
- [2] DICK J J, FOREST C A, RAMSAY J B, et al. The Hugoniot and shock sensitivity of plastic-bonded TATB explosive PBX-9502 [J]. Journal of Applied Physics, 1988, 63(10): 4881-4888.
- [3] 于川, 池家春, 刘文翰, 等. JB-9001 钝感炸药 Hugoniot 关系测试 [J]. 高压物理学报, 1998, 12(1): 72-77.
YU C, CHI J C, LIU W H, et al. Shock Hugoniot relation of JB-9001 insensitive high explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1998, 12(1): 72-77.
- [4] 张旭, 池家春, 冯民贤, 等. JB-9014 钝感炸药冲击绝热线测量 [J]. 高压物理学报, 2001, 15(4): 304-308.
ZHANG X, CHI J C, FENG M X, et al. Hugoniot relation of JB-9014 insensitive high explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2001, 15(4): 304-308.
- [5] GUSTAVSEN R L, SHEFFIELD S A, ALCON R R. Measurement of shock initiation in the tri-amino-tri-nitro-benzene based explosive PBX9502; wave forms embedded gauges and comparison of four different material lots [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 99(11): 1-17.
- [6] DICK J J, MARTINEZ A R, HIXSON R S. Plane impact response of PBX-9501 and its components below 2 GPa: LA-13426-MS [R]. Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory, 1998.
- [7] ZI P D, CHEN J, ZHANG X, et al. Double shock experiments on PBX explosive JOB-9003 [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2017, 42(7): 784-790.
- [8] 王延飞, 刘杰, 张旭, 等. 未反应炸药 JOB-9003 的 JWLL 状态方程 [J]. 高压物理学报, 2016, 30(5): 387-391.
WANG Y F, LI J, ZHANG X, et al. JWLL equation of state of unreacted JBO-9003 explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2016, 30(5): 387-391.
- [9] FU H, LI T, TAN D W. Shock Hugoniot relation of unreacted heterogeneous explosive [J]. International Journal of Modern Physics B, 2011, 25(21): 2905-2913.
- [10] 李维新. 一维不定常流与冲击波 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2003: 212-214.
LI W X. One-dimensional non-steady flow and shock waves [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2003: 212-214.
- [11] SATO Y, YOSHIDA M, NAGAYAMA K, et al. Stress-strain relationship of polycarbonate over a wide range of strain rate, including a shock wave regime [J]. International Journal of Impact Engineering, 2008, 35(12): 1778-1783.
- [12] 蒋贵芳. (0~100)mm 数显千分尺示值误差测量结果的不确定度评定 [J]. 计量与测试技术, 2012, 39(4): 69-70.
JIANG G F. Uncertainly assessment of the measuring result of (0-100 mm) digital micrometer error [J]. Metrology & Measurement Technique, 2012, 39(4): 69-70.

- [13] 戴诚达,王翔,谭华. Hugoniot 实验的粒子速度测量不确定度分析 [J]. 高压物理学报,2005,19(2):113-119.
DAI C D, WANG X, TAN H. Evaluation for uncertainty of particle velocity in Hugoniot measurement [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2005, 19(2): 113-119.
- [14] 谭叶,俞宇颖,戴诚达,等. 反向碰撞法测量 Bi 的低压 Hugoniot 数据 [J]. 物理学报,2011,60(10):106401.
TAN Y, YU Y Y, DAI C D, et al. Measurement of low-pressure Hugoniot data for bismuth with reverse-impact geometry [J]. Acta Physics Sinica, 2011, 60(10): 106401.

Measurement of Hugoniot Relation for JB-9014 Insensitive Explosive

LIU Junming¹, ZHANG Xu², PEI Hongbo², SHU Junxiang²,
QIN Shuang¹, ZHONG Bin², ZHANG Rong²

(1. *The Graduate School of CAEP, Mianyang 621999, China;*
2. *Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China*)

Abstract: In this paper we measured the Hugoniot data for JB-9014 explosive by measuring the times when the shock wave reached the surfaces of the explosive sample and the particle velocity at the sample/window interface on a gun using PDV. Calculating the difference between the times when the shock wave reaches the front and the back surfaces of the sample explosive and its thickness, we figured out the propagation velocity of the shockwave in the sample, and found that the combined standard uncertainties of the shock velocity and the particle velocity were 0.54% and 1.7% within the pressure range of 3.1-9.7 GPa, through uncertainty analysis. Moreover, we also derived the relation between the pressure and the density of the JB-9014 explosive sample from the simultaneous equation of the Hugoniot relation and the Rankine-Hugoniot relationship of the shock wave form and obtained the fitted p - ρ curve in the sample along the (p, ρ) surface under heat-insulated shock.

Keywords: PDV; Hugoniot relation; insensitive explosive; particle velocity; uncertainty

RDX 基含铝炸药三波点高度的数值模拟^{*}

段晓瑜, 郭学永, 聂建新, 王秋实, 焦清介

(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:为研究含铝炸药近地空中爆炸的三波点特性,利用 ANSYS/AUTODYN 显式有限元程序,对 3 种 RDX 基含铝炸药 HL-01(RDXph)、HL-02(85%RDXph+15%Al)和 HL-03(70%RDXph+30%Al)空中爆炸过程进行了模拟。结果表明:计算得到的压力时程曲线与实测压力时程曲线较吻合,且在不同位置处的超压值也接近实验值,说明所建立的模型及状态方程参数选取合理;与经验图表法的对比说明,基于爆热当量的经验图表法不适用于含铝炸药三波点高度的计算,而用数值模拟方法可以较好地获得含铝炸药的三波点高度;同一爆炸高度下,3 种炸药的三波点高度由大到小依次为 HL-03、HL-02、HL-01;对于同种炸药,三波点高度随着爆炸高度的减小而增加。

关键词:含铝炸药;空中爆炸;数值模拟;三波点

中图分类号: O384

文献标识码: A

炸药在地表附近爆炸,当冲击波入射角超出某个临界值时,入射波和反射波会结合形成一个加强的爆炸冲击波,即马赫波^[1-2]。入射波、反射波和马赫波的连接点称为“三波点”,三波点是入射波作用与马赫波作用的分界点^[3]。马赫反射对于工程防护有重要作用,同时由于马赫反射的存在,在进行炸药自由场爆炸冲击波参数测试时,难以准确区分所测得的冲击波是入射波还是反射波^[4]。为了避开地面反射的影响,只能通过升高测点位置测得入射波^[5]。因此,准确预报三波点的位置不仅对实现弹药的高效毁伤和工程防护具有重要意义,对指导自由场冲击波参数的测量也具有重要意义。

关于三波点高度的研究:Swisdak^[6]将 TNT 空中爆炸的三波点高度与对比爆炸高度及对比水平距离之间的关系用图表表示出来;乔登江^[7]对大量的空爆实验结果进行分析,归纳了计算 TNT 空中爆炸三波点高度的经验公式;郭炜等^[8]利用空中爆炸试验研究了 TNT 空中爆炸的三波点高度,确定了三波点高度的变化轨迹;任会兰等^[9]对含铝炸药近地空中爆炸的三波点特性研究则尚不充分。

本研究利用 ANSYS/AUTODYN 显式有限元程序^[10],通过模拟炸药空中爆炸过程研究了含铝炸药 HL-02(85%RDXph+15%Al,质量分数)和 HL-03(70%RDXph+30%Al,质量分数)近地空中爆炸的三波点特性,并与理想炸药 HL-01(RDXph)进行对比。

1 模型的建立

1.1 计算模型

以含铝炸药空中爆炸试验方案为基本物理模型,建立数值计算模型。试验时,在以爆心水平投影点为圆心、夹角为 60°的两条半径上布置 Kistler 空气壁面传感器,传感器到爆心的水平距离分别为 3、4、5、7、9 和 12 m,依次对应计算模型中 1[#]、2[#]、3[#]、4[#]、5[#]、6[#]观测点。传感器敏感面与地面平齐,各传感器布置如图 1 所示。试验所用炸药分别为 HL-01、HL-02 和 HL-03,采用圆柱形装药,长径比约为

^{*} 收稿日期:2017-02-21;修回日期:2017-03-23

作者简介:段晓瑜(1990—),女,博士,主要从事含铝炸药爆炸作用研究。E-mail:dxxy900401@163.com

通信作者:郭学永(1975—),男,博士,副研究员,主要从事含能材料爆炸特性研究。E-mail:nust@bit.edu.cn

2 : 1,装药质量为 10 kg,药柱中心离地面高度为 1 m,起爆点为药柱上端面中心处,计算模型与试验工况保持一致。为了计算方便,采用二维轴对称模型,建模时采用 BOX,计算空气域为 5 m×17 m,空气域下方为 0.5 m×17 m 的混凝土。网格划分总数为 550×1 700=935 000,网格尺寸为 1 cm×1 cm^[11]。空气采用多物质 Euler 算法,混凝土地面采用拉格朗日算法,炸药以物质填充的方式填入空气域。两种网格通过流固耦合算法相互作用^[12]。炸药初始压力取 0.1 MPa(1 个大气压),采用缺省人工黏性系数,模型外围施加压力流出(Flow-out)及透射边界条件,计算模型如图 2 所示。

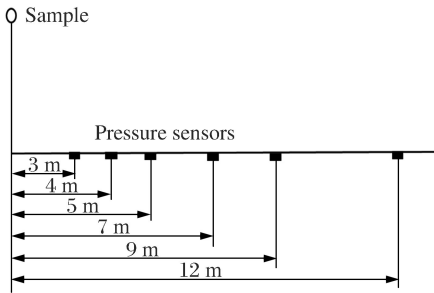


图 1 传感器布置示意
Fig. 1 Distribution of sensors

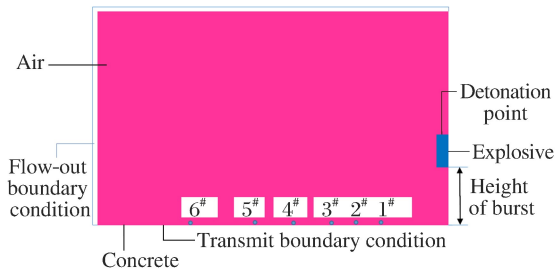


图 2 计算模型
Fig. 2 Simulation model

1.2 材料模型与状态方程

炸药的爆炸产物压力(p)采用 JWL^[13] 状态方程描述

$$p=A\left(1-\frac{\omega}{R_1v}\right)e^{-R_1v}+B\left(1-\frac{\omega}{R_2v}\right)e^{-R_2v}+\frac{\omega E_0}{v}$$
 (1)

式中:等号右边第 1 项在高压段起作用,第 2 项在中压段起主要作用,第 3 项代表低压段; E_0 为单位质量内能, v 为比容, A 、 B 、 R_1 、 R_2 、 ω 为常数,各参数值由圆筒试验^[14] 拟合得到。对于 RDX 基含铝炸药,一般采用 JWL-Miller 能量释放模型。含铝炸药爆炸产物 Miller 能量释放模型^[15] 如下

$$\frac{d\lambda}{dt}=G(1-\lambda)^ap^b$$
 (2)

式中: λ 表示铝粉反应度, G 是能量释放常数, a 是能量释放指数, b 是压力指数。这些参数与铝粉粒度、比表面积有关,可以通过对比含铝炸药水下爆炸测试数据和 AUTODYN 计算结果进行迭代反推确定,具体方法参考文献[16]。根据文献[9],本研究的反应速率常数取 $a=1/2$ 、 $b=1/6$ 、 $G=0.11$ 。

依据商航^[17] 的 $\varnothing 50$ mm 圆筒试验数据对 3 种炸药的 JWL 状态方程进行标定,得到各参数取值如表 1 所示,其中: D_{CJ} 、 p_{CJ} 分别是爆速和爆压。

表 1 炸药 JWL 状态方程参数
Table 1 Parameters of JWL equation for explosives

Explosive	Density/ (g·cm ⁻³)	A/ GPa	B/ GPa	R ₁	R ₂	ω	E ₀ / (10 ¹⁰ J·m ⁻³)	D _{CJ} / (km·s ⁻¹)	p _{CJ} / GPa
HL-01	1.673	694.52	13.75	4.55	1.30	0.49	0.96	8.325	29.39
HL-02	1.763	1897.54	24.77	5.83	1.72	0.35	1.19	8.121	23.91
HL-03	1.865	2225.42	27.59	5.85	1.73	0.49	1.42	7.879	20.70

空气采用理想气体状态方程;混凝土采用 p - α 状态方程,强度和失效模型采用 RHT 模型定义,各参数均取自 AUTODYN 的材料库。

2 模型验证

实验测得地表上距离炸药中心投影点 3、4、5、7、9、12 m(依次对应模型中 1#、2#、3#、4#、5#、6# 观

测点)处冲击波的峰值超压。为了验证数值模拟的准确性,将不同传感器测得的超压取平均值后与数值模拟结果进行对比,如图 3~图 5 所示,其中: X 是距爆心水平投影点的距离(简称爆心距)。图 6 显示了实测与模拟的冲击波压力时程曲线的对比。

从图 3~图 5 中可以看出,3 种炸药在不同测点处的超压模拟值与测量值基本一致,且距离爆炸中心越远,二者的相对偏差越小,误差不大于 5%。从图 6 可以看出,计算得到的冲击波信号与实验结果吻合较好。综上可知,本研究采用的模型设置以及参数选择是正确的,该数值模拟方法可用于含铝炸药空中爆炸三波点高度的仿真计算。

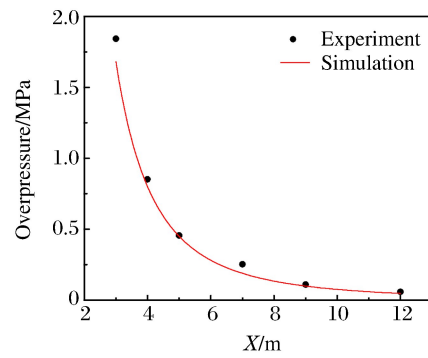


图 3 HL-01 的峰值超压-爆心距曲线

Fig. 3 Overpressures of HL-01 vs. distance from blast center

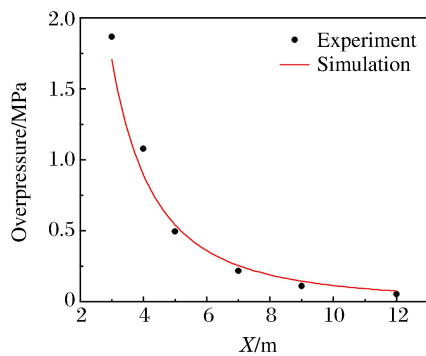


图 4 HL-02 的冲击波超压-爆心距曲线

Fig. 4 Overpressures of HL-02 vs. distance from blast center

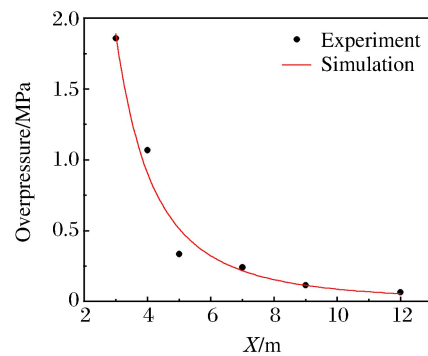


图 5 HL-03 的冲击波超压-爆心距曲线

Fig. 5 Overpressures of HL-03 vs. distance from blast center

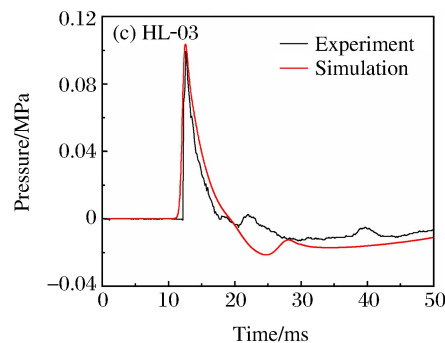
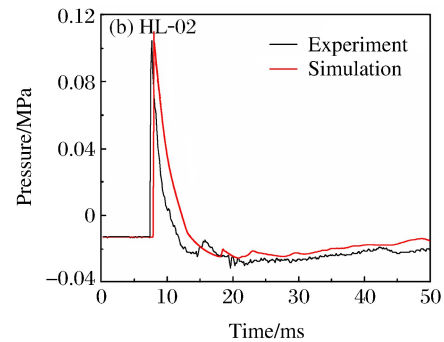
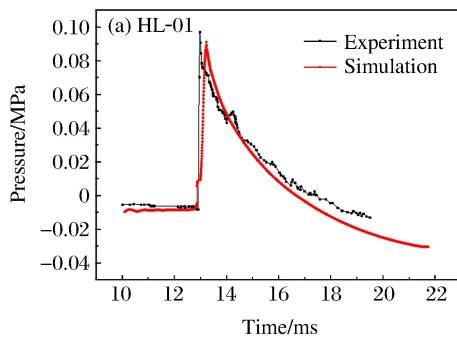


图 6 $X=9$ m 处 3 种炸药的冲击波压力时程

Fig. 6 Pressure histories of 3 explosives at $X=9$ m

3 三波点的计算分析

按照第2节建立的模型计算空中爆炸冲击波的传播及其与地面的相互作用,从而观察三波点高度的变化轨迹。图7是HL-02装药起爆后不同时刻的压力云图。

从图7可以看出:(1)爆炸冲击波在向外扩展的过程中,入射波与地面反射波相互作用,产生马赫反射,即压力云图的红色部分,根据压力云图很容易读取三波点的高度;(2)随着时间的增加,三波点的高度逐渐升高。

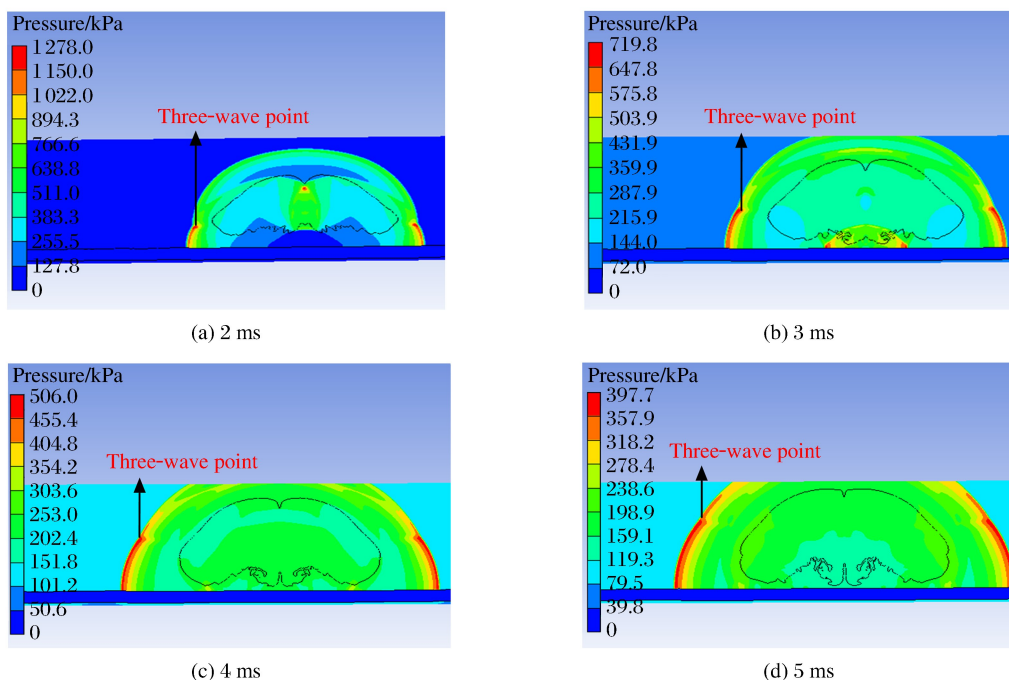


图7 冲击波传播过程中压力变化云图

Fig. 7 Pressure nephogram of shockwave propagation process

3.1 数值计算结果与经验图表算法的对比

采用文献[7]中给出的 TNT 爆炸三波点高度的试验图表,如图8所示,其中: λ_x 为对比水平距离, λ_H 为对比爆炸高度, λ_T 为对比三波点高度。用图8计算 TNT 三波点高度时,只需计算其对比爆炸高度和对比水平距离,查看对应的图表即可;对于其他炸药,则需换成该炸药 TNT 当量计算。

(1) HL-01 模拟值与经验值的对比

通常人们使用某炸药爆热与 TNT 爆热之比近似作为该炸药的 TNT 当量。HL-01 爆热可用 EXPLO5^[18] 计算得到,为 5408 J/g, TNT 爆热为 4552 J/g^[19],计算得到 HL-01 在 1.1 节所示模型中的对比爆炸高度,即 $\lambda_H = 0.44 \text{ m} \cdot \text{kg}^{-1/3}$,依据图8曲线插值得到相应的图表法三波点高度。表2列出了 HL-01 的三波点高度模拟计算值和图表法经验值(线性插值)。

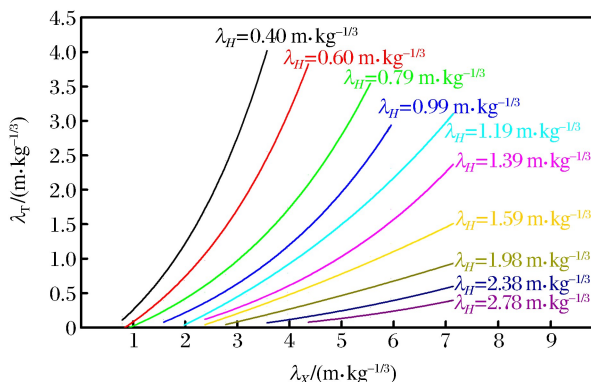


图8 TNT距离地面不同高度处爆炸的三波点位置
Fig. 8 Height of three-wave point for TNT at different blasting heights

由表 2 可知,HL-01 的对比爆炸高度为 $0.44\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$,其三波点的模拟值完全落在经验图中对比爆炸高度为 0.40 和 $0.60\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$ 的曲线之间。这说明:一方面,该经验公式可以大致估计理想炸药的三波点高度;另一方面,本研究所建立的数值模型对于预测装药爆炸的三波点高度是可行的,并且可以用于完善文献[7]中的图表参数。

表 2 HL-01 的三波点高度的模拟值与经验值
Table 2 Height of three-wave point for HL-01 gained by simulation and empirical chart

X/m	Height of three-wave point/m		
	$\lambda_H=0.40\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$	$\lambda_H=0.44\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$	$\lambda_H=0.60\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$
2.5	0.68	0.38	0.34
3.0	1.12	0.61	0.57
3.5	1.71	0.84	0.81
4.0	2.05	1.15	1.05
4.5	2.74	1.72	1.37
5.0	3.37	2.51	2.05
5.5	4.15	3.11	2.51

(2) HL-02 模拟值与经验值的对比

HL-02 的爆热同样用 EXPLO5 计算得到,为 $7\,271\text{ J/g}$,换算成 TNT 当量后对应的对比爆炸高度为 $0.4\text{ m}\cdot\text{kg}^{-1/3}$ 。利用经验图表法得到三波点高度,其与模拟值的对比如表 3 所示。由表 3 可见,含铝炸药 HL-02 的三波点高度的图表法经验值与模拟值的相对误差随爆心距的减小而增大, 2.5 m 处经验值相对于模拟值的误差达到 43.89% , 5.0 m 以后误差急剧降到 3% 以内。

表 3 HL-02 的三波点高度的模拟值与经验值
Table 3 Height of three-wave point for HL-02 gained by simulation and empirical chart

X/m	Height of three-wave point/m		Error between simulation and empirical values/%
	Simulation	Empirical value	
2.5	0.66	0.95	43.89
3.0	1.02	1.35	32.31
3.5	1.46	1.80	23.25
4.0	1.90	2.30	21.01
4.5	2.54	2.80	10.20
5.0	3.50	3.60	2.82
5.5	4.21	4.30	2.11

对于理想炸药 HL-01 的三波点高度,两种方法计算结果是一致的,证明了数值模拟方法的正确性。表 3 说明,含铝炸药不适用图表法,主要原因是采用图表法时,非 TNT 炸药需通过爆热换算成该炸药的 TNT 当量,三点波高度主要和冲击波能有关,含铝炸药的爆热虽高,却不能都转化为冲击波能。

综上所述,计算含铝炸药的三波点高度时,使用经验图表法会产生较大误差,使用数值模拟得到的结果更为可信。

3.2 数值计算 3 种炸药的三波点高度

通过模拟 HL-01、HL-02 和 HL-03 3 种炸药的冲击波传播过程,依据压力云图(见图 7)对三波点高度进行判读,得到 3 种炸药在不同测点处的三波点高度(h_T),如图 9 所示。

由图 9 可见,3 种炸药的三波点高度均随着距爆心水平距离的增加而不断升高;3 种炸药具有相似的三波点轨迹,且在同一水平距离处, $h_T(\text{HL-03})>h_T(\text{HL-02})>h_T(\text{HL-01})$,表明对于 RDX 基含铝

炸药,铝粉质量分数在30%以内时,铝粉含量与三波点高度成正相关关系。

通过数值模拟得到了3种炸药在不同位置处的冲击波传播速度(D),如表4所示,可见,冲击波传播速度也是 $D(\text{HL-03}) > D(\text{HL-02}) > D(\text{HL-01})$ 。冲击波传播速度越高,三波点离开地面向上方运动的速度越快,三波点的高度也越高。这表明对于RDX基含铝炸药,铝粉质量分数在30%以内时,铝粉含量与冲击波能成正相关关系,与文献[20]中关于含铝炸药水中爆炸能量输出特性的研究结论是一致的。铝含量超过30%的情况需结合空爆试验进一步研究。

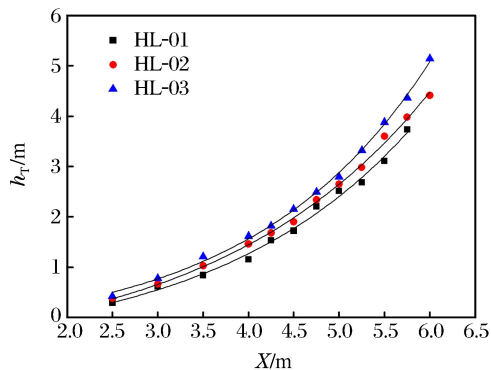


图9 不同炸药三波点高度-爆心距曲线

Fig. 9 Height of three-wave point vs. distance from blast center

表4 冲击波在不同位置处的波速

Table 4 Shock velocity at different distances from blast center

X/m	Shock velocity/ $(\text{m} \cdot \text{s}^{-1})$		
	HL-01	HL-02	HL-03
3.5	1008	1139	1345
4.5	833	856	897
5.5	606	643	706

3.3 爆炸高度对三波点高度的影响

以HL-02炸药为例,选取爆炸高度分别为1.0、1.5、2.0 m 3种情况进行模拟,相应的对比爆炸高度分别为0.45、0.70和0.93 $\text{m} \cdot \text{kg}^{-1/3}$ 。计算得出的HL-02三波点高度-爆心距曲线如图10所示。

由图10可知,同一测点的三波点高度均随着爆炸高度的减小而增加。这是由于爆炸高度越低,冲击波传播到地面时间越短,入射冲击波强度越高,越容易发生马赫反射,马赫波的增长越快,最终导致三波点的高度越高。

4 结论

利用ANSYS/AUTODYN程序,结合含铝炸药的JWL状态方程,通过对炸药空中爆炸过程的数值模拟,研究了HL-01、HL-02和HL-03 3种不同组分炸药空中爆炸的三波点特性。

(1) 对于理想炸药,数值模拟与经验图表法的计算结果具有一致性,可以利用数值模拟结果对经验图表进行进一步的补充。

(2) 基于爆热当量的经验图表法不适用于含铝炸药三波点高度的计算,而采用数值模拟方法可以获得准确的含铝炸药三波点高度。

(3) 3种炸药具有相似的三波点轨迹,在同一炸高和同一爆心距下,三波点高度的顺序为 $h_T(\text{HL-03}) > h_T(\text{HL-02}) > h_T(\text{HL-01})$,表明对于RDX基含铝炸药系列,铝粉含量在30%以内时,铝粉含量与三波点高度成正相关关系,与冲击波能也成正相关关系。铝粉含量超出30%的情况需结合空爆试验进一步研究。

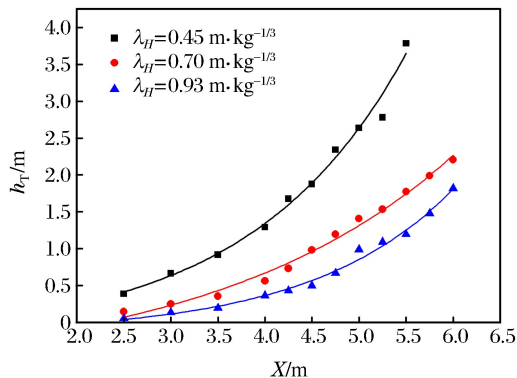


图10 不同对比炸高下三波点高度-爆心距曲线

Fig. 10 Height of three-wave point vs. distance from blast center at different scaled blasting heights

参考文献:

- [1] BAKER W E. Explosions in air [M]. Austin: University of Texas Press, 1973.
- [2] 郭伟, 俞统昌, 金朋刚. 三波点的测量与实验技术研究 [J]. 火炸药学报, 2007, 30(4): 55-57, 61.
GUO W, YU T C, JIN P G. Test of triple point and study on its test technology [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2007, 30(4): 55-57, 61.
- [3] 郝莉, 马天宝, 王成, 等. 爆炸冲击波绕流的三维数值模拟研究 [J]. 力学学报, 2010, 42(6): 1042-1049.
HAO L, MA T B, WANG C, et al. Three dimensional numerical simulation study on the flow of the explosion shock wave around the wall [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2010, 42(6): 1042-1049.
- [4] 王建灵, 郭伟, 冯晓军. TNT-PBX 和 Hexel 空中爆炸冲击波参数的实验研究 [J]. 火炸药学报, 2008, 31(6): 42-44, 68.
WANG J L, GUO W, FENG X J. Experimental research on the air explosion shock wave parameters of TNT, PBX and Hexel [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2008, 31(6): 42-44, 68.
- [5] 北京工业学院八系. 爆炸及其作用: 下 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1979: 15-25.
The Eighth Department of Beijing Institute of Technology. Explosions and effects: volume II [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1979: 15-25.
- [6] SWISDAK M M. Explosion effects and properties. part I. explosion effects in air: A018544 [R]. New York: Naval Surface Weapons Center, 1975: 10-16.
- [7] 乔登江. 空中爆炸冲击波 (I) 基本理论 [J]. 爆炸与冲击, 1985, 5(4): 78-85.
QIAO D J. Explosion waves in air (I) basic theory [J]. Explosion and Shock Waves, 1985, 5(4): 78-85.
- [8] 郭伟, 俞统昌, 金朋刚. 三波点的测量与实验技术研究 [J]. 火炸药学报, 2007, 30(4): 55-57.
GUO W, YU T C, JIN P G. Test of triple point and study on its test technology [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2007, 30(4): 55-57.
- [9] 任会兰, 宁建国, 许香照. 不同炸药量在工事中爆炸的三维数值模拟 [J]. 高压物理学报, 2013, 27(2): 216-222.
REN H L, NING J G, XU X Z. The 3D numerical simulation different explosives charges in the fortifications [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2013, 27(2): 216-222.
- [10] ANSYS AUTODYN manuals; version 12.1 [Z]. ANSYS Inc., 2007.
- [11] 辛春亮. 高能炸药爆炸能量输出结构的数值仿真 [D]. 北京: 北京理工大学, 2008: 114-120.
XIN C L. Numerical simulation of explosive energy output structure of high explosives [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2008: 114-120.
- [12] 郭攀, 刘君, 武文华. 爆炸冲击载荷作用下流固耦合数值模拟 [J]. 力学学报, 2013, 45(2): 283-287.
GUO P, LIU J, WU W H. Numerical modeling for fluid-structure interaction under blast and impact loading response [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2013, 45(2): 283-287.
- [13] LEE E, FINGER M, COLLINS W. JWL equations of state coefficients for high explosives; UCID-16189 [R]. Livermore, California: Lawrence Livermore Laboratory, 1973.
- [14] 陈朗, 冯长根, 黄毅民. 含铝炸药圆筒试验及爆轰产物 JWL 状态方程研究 [J]. 火炸药学报, 2001, 24(3): 13-15.
CHEN L, FENG C G, HUANG Y M. The cylinder test and JWL equation of state detonation product of aluminized explosives [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2001, 24(3): 13-15.
- [15] MILLER P J. A reactive flow model with coupled reaction kinetics for detonation and combustion of non-ideal explosives [C]//MRS Proceedings, 1994: 413-420.
- [16] ZHOU Z Q, NIE J X, GUO X Y, et al. A new method for determining the equation of state of aluminized explosive [J]. Chinese Physics Letters, 2015, 32(1): 016401.
- [17] 商航. RDX 含铝炸药空中爆炸特性研究 [D]. 北京: 北京理工大学, 2016.
- [18] EXPLO5.05 program user's guide [Z]. Zagreb, Croatia, 2010.
- [19] 孙业斌. 军用混合炸药 [M]. 北京: 兵器工业出版社, 1969: 364-369.
SUN Y B. Military mixing explosives [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1969: 364-369.

- [20] LIN M J, MA H H, SHEN Z W, et al. Effect of aluminum fiber content on the underwater explosion performance of RDX-based explosives [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2014, 39(2): 230-235.

Numerical Simulation of the Three-Wave Point of RDX-Based Aluminized Explosives

DUAN Xiaoyu, GUO Xueyong, NIE Jianxin,
WANG Qiushi, JIAO Qingjie

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

Abstract: To identify the properties of the three-wave point for aluminized explosives in the near-earth air blast, we simulated the explosion process of 3 kinds of RDX-based aluminized explosives, i. e. , HL-01 (RDXph), HL-02 (85% RDXph + 15% Al) and HL-03 (70% RDXph + 30% Al), using the ANSYS/AUTODYN software. The results show that the pressure histories and the near-earth overpressures obtained from the simulation almost overlapped those measured from the experiment, indicating that the chosen model and parameters were appropriate. The comparison of the simulation results with those from the empirical chart shows that it was not suitable to calculate the height of three-wave point for aluminized explosives from the empirical chart, while it was so by simulation. At the same explosion height, the height sequence of three-wave point was $HL-03 > HL-02 > HL-01$. For the same explosive, the height of three-wave point increased with the decrease of the explosion height.

Keywords: aluminized explosives; air explosion; numerical simulation; three-wave point

铝粉粒径对温压炸药爆炸性能 及热安定性的影响^{*}

王明烨, 韩志伟, 李 席, 王伯良

(南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094)

摘要: 为了研究铝粉粒径对温压炸药在有限空间内爆炸能量输出的影响, 在温压炸药中分别添加了粒径为 40 nm、3 μm 和 35 μm 的 3 种铝粉。利用爆炸容器进行内爆炸实验, 获得了冲击波压力时程曲线, 经计算分析得到 1.0、1.2 和 1.5 m 处的超压和冲量数值, 并采用差示扫描量热仪 (DSC) 研究这 3 种粒径铝粉对温压炸药热安定性的影响。实验研究结果表明: 铝粉粒径对温压炸药在有限空间的爆炸能量有较大影响, 含粒径为 3 μm 的样品 2 在各距离处的超压较样品 1 提升了 6.0% 以上, 较样品 3 提升了 10% 以上; 3 组样品的热安定性均随着铝粉粒径的减小而降低, 活化能最大降幅达 31.1%, 升温速率接近零时的峰值温度 (T_{p0}) 最大降低了 11.7 $^{\circ}\text{C}$ 。

关键词: 铝粉粒径; 温压炸药; 爆炸; 能量; 热安定性

中图分类号: TJ55; TQ560.7

文献标识码: A

温压炸药是利用压力效应和热效应造成毁伤的一类炸药, 一般由高能炸药、金属或非金属超细燃料粉、活性剂和黏结剂按一定比例混合制成, 从爆轰特性看属于非理想炸药^[1]。温压炸药利用空气中的氧气作为氧化剂, 单位质量装药可释放的能量能够得到很大提高, 使其成为应对密闭或半密闭空间目标的优选炸药^[2]。因此, 研究温压炸药在有限空间的爆炸特性具有重要意义。

温压炸药的爆轰性能与约束条件、主体组分、铝粉粒径大小和形状等相关, 国内外学者对此做了大量研究。在铝粉粒径对炸药爆炸特性研究方面, 金朋刚等^[3]研究了不同粒径铝粉及含量在 HMX 基炸药中的能量释放特性, 结果表明, 当铝粉含量为 35%, 含 13 μm 铝粉的炸药能释放更多能量; Nikita 等^[4]分析了铝粉粒径对高能炸药性能的影响, 在相同条件下, 超细铝粉相较于微米级铝粉其燃烧速度和燃烧完全度分别增加了 2.5 倍和 4 倍; 李媛媛等^[5-6]在自行设计的半密闭和密闭容器中研究了不同铝粉粒径及含量炸药内爆温度场和压力场特性, 结果显示, 含细粒径铝粉的炸药爆热值和压力值较粗粒径铝粉的炸药要高; 苗勤书等^[7]应用含铝炸药的二次反应论和惰性热稀释理论解释了铝粉形状和粒度对炸药爆炸性能的影响机理, 其根本原因是由于铝粉比表面积不同造成的, 提出了含铝炸药性能的一种优化方向; 段晓瑜等^[8]认为添加 50 μm 铝粉使含铝炸药的准静态压力更大。在铝粉粒径对炸药分解特性研究方面, 赵凤起等^[9]应用 DSC 研究了超细铝粉 (150 nm) 和普通铝粉 (4 μm) 对 RDX 的影响, 发现超细铝粉消除了二次分解肩峰而普通铝粉对其影响很小; 梁磊等^[10]采用 DSC 研究了纳米铝粉对 RDX 热分解的影响, 结果显示, 纳米铝粉使 RDX 的放热峰峰温降低; Zhu 等^[11]利用多种实验方法, 发现 RDX 的活化能随着铝粉粒径的增大而提高; Mei 等^[12]通过在 CL-20 中添加两种不同粒径的铝粉, 测试其不同升温速率下的活化能和起始分解温度, 研究铝粉粒径对 CL-20 热稳定性的影响。以上有关铝粉粒径对炸药爆炸特性的影响倾向于普通含铝炸药, 而有关铝粉粒径对炸药热安定性影响的研究集

^{*} 收稿日期: 2017-08-07; 修回日期: 2017-10-30

基金项目: 国家自然科学基金 (11702142); 江苏省自然科学基金 (BK20170825); 江苏高校优势学科建设工程资助项目

作者简介: 王明烨 (1993—), 男, 硕士, 主要从事炸药爆炸输出特性研究. E-mail: wangmingye0417@163.com

通信作者: 王伯良 (1964—), 男, 博士, 教授, 主要从事爆炸理论及其应用研究. E-mail: boliangwang@163.com

中在单质炸药,而温压炸药的能量输出较普通含铝炸药和单质炸药更为优秀。目前针对不同粒径铝粉的温压炸药在有限空间的爆炸特性研究还不够充分,且只侧重其爆炸性能的提高,却忽略了炸药在生产使用中最重要的安全使用性问题。温压炸药中添加的铝粉都是以粉末状加入其中的,小粒径铝粉由于高表面能,使其更易集聚和氧化,提高了炸药的感度,给炸药带来了较大的安全隐患^[13]。因此有必要综合研究铝粉粒度径对温压炸药爆炸特性和热分解性的影响规律。

本研究利用爆炸容器在有限空间中测量温压炸药的超压和冲量,分析铝粉粒径对炸药爆炸场冲击波参数的影响规律,研究铝粉粒径对温压炸药爆炸特性的影响,揭示铝粉粒径与铝粉反应性能之间的关系;并使用差示扫描量热仪(DSC)对温压炸药进行分析,以期得到铝粉粒径对温压炸药热安定性的影响。通过上述研究为温压炸药铝粉的选择、配方设计提供技术支持。

1 实 验

1.1 实验样品

实验样品由奥克托金(HMX)、铝粉、少量的助燃剂和黏结钝感剂组成,实验采用的铝粉有 3 种,为了便于区分,将铝粉的名称定为与中位径相近的整数,铝粉购自鞍钢实业微细铝粉有限公司,具体配方见表 1。装药均为 340 g 圆柱形药柱,外径为 60 mm,传爆药为 JH-14,尺寸为 $\varnothing 20.0\text{ mm}\times 21.5\text{ mm}$,质量为 11.5 g,用 8 号电雷管从药柱上端起爆,炸高为 160 cm。

表 1 温压炸药组分
Table 1 Components of thermobaric explosive

Sample	HMX/%	Oxidizing agent/ %	Binder desensitized agent/%	Al/%			$\rho_0/(g\cdot cm^{-3})$
				40 nm	3 μm	35 μm	
1	52.5	8	4.5	35			1.915 8
2	52.5	8	4.5		35		1.909 9
3	52.5	8	4.5			35	1.924 6

1.2 铝粉特性

实验采用的 3 种铝粉的扫描电镜(Scanning Electronic Micrograph,SEM)图像如图 1 所示,可以看出,40 nm 和 3 μm 铝粉样品颗粒饱满,球形度好。35 μm 大部分呈规则球形,但同时也存在不规则的颗粒,而且还存在一定的团聚现象。该团聚现象主要是由于颗粒之间的范德华力和库仑力所导致的软团聚^[14],很难避免,可在使用前对铝粉进行超声分散,能减轻该现象。

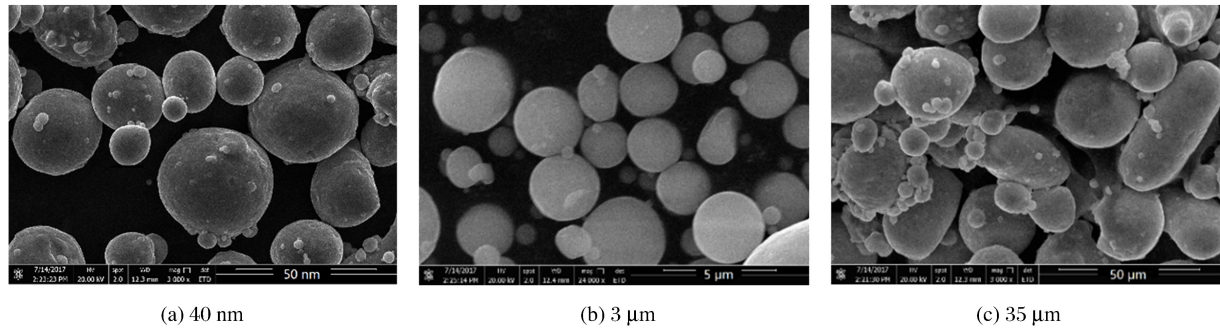


图 1 铝粉 SEM 图
Fig. 1 SEM images of Al particles

1.3 爆炸容器及测试系统

实验在 16MnR 钢无缝焊接而成的双层密闭爆炸容器中进行。密闭爆炸容器是由中间为圆柱形壳体和上下围球罐体组成的,下球罐填入细沙,内层半径为 1.5 m,内层高 4 m,圆柱型容器的左右各有一个半径 0.15 m 的传感器安装模板,爆炸容器圆柱壳体中部有 1.6 m 高的双层密闭防爆安全门,爆炸容器的布局如图 2 所示。冲击波压力传感器敏感面与装药中心水平正对,装药通过细钢丝吊挂于容器中心位置。

实验所用压力测试系统是由数据采集仪、压力传感器及计算机控制处理系统组成。其中数据采集仪是瑞士 ElsysAG 公司的 TraNET FE 208 型多通道数据采集仪,实验数据采样频率为 1 MHz;传感器由美国 PCB 公司生产,量程 0~3.45 MPa,频率为 500 kHz。传感器在爆炸容器内的分布如图 3 所示。

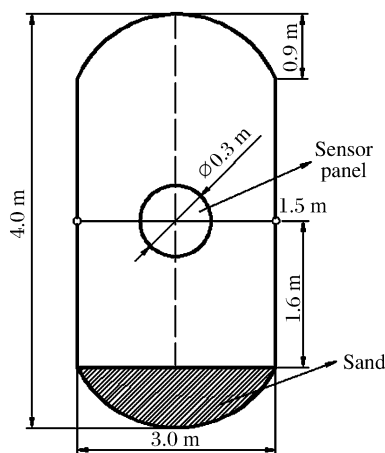


图 2 爆炸容器示意图

Fig. 2 Sketch of test device

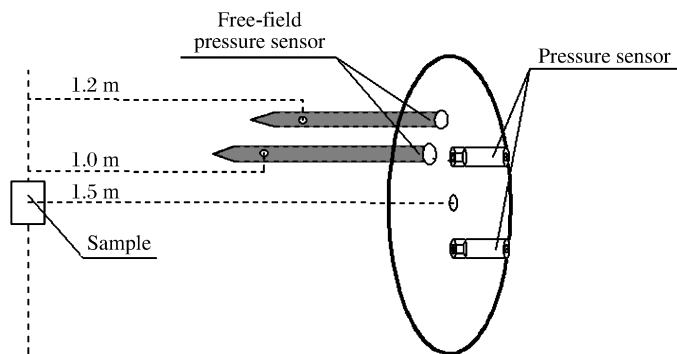


图 3 传感器位置示意图

Fig. 3 Sketch of sensor position

2 测试结果与分析

2.1 冲击波参数

每组温压炸药配方均实验 3 次,每发实验在相同距离处均获得两条测试曲线,先将形状上明显不属于冲击波波形、量级上显著高于理论计算即到达时间不合理的异常信号去除,再对采集到信号进行判读,获得冲击波参数。通过爆炸容器测得含不同粒径铝粉的温压炸药在不同测点处的压力时程曲线,如图 4 所示。

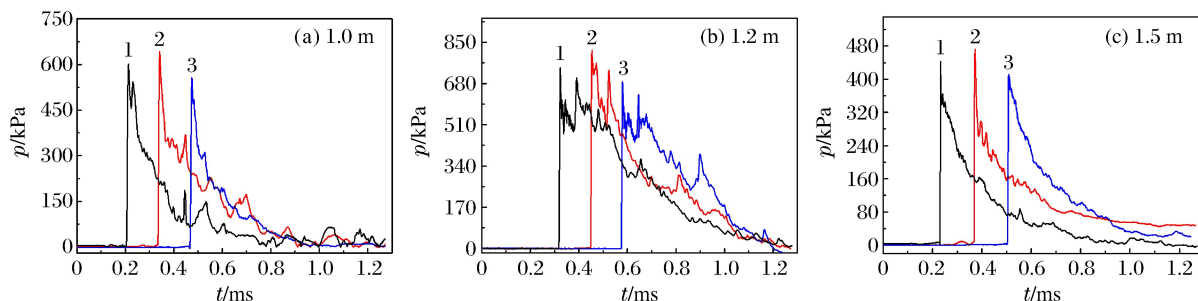


图 4 不同测点处超压时程曲线图

Fig. 4 Shock wave history at different test points

由图 4 可知,样品 2 的超压在各个距离处均最大,可以认为在能产生压力峰值的时间范围内,样品 2 中的铝粉对爆炸的促进作用更大。在随后的压力衰减过程中,3 组样品的超压时程曲线呈现重合的趋势,

说明这 3 种铝粉在温压炸药爆炸压力的后期衰减作用相似。

样品 3 在 1 m 处冲击波波形如图 5 所示,有限空间内温压炸药的毁伤作用主要与冲击波正压部分有关,将正压部分放大,如图 6 所示。可获取冲击波超压峰值 p_{\max} 和正压冲量 i_+ ,其中 i_+ 为计算值,计算公式为

$$i_+ = \int_{t_2}^{t_1} p(t) \, dt \tag{1}$$

式中: i_+ 为冲击波冲量,Pa·s; t_1 和 t_2 分别为冲击波压力上升和下降到压力 p_1 时的时间,ms; $p(t)$ 为任意时刻冲击波的压力值,kPa; t 为时间,ms。

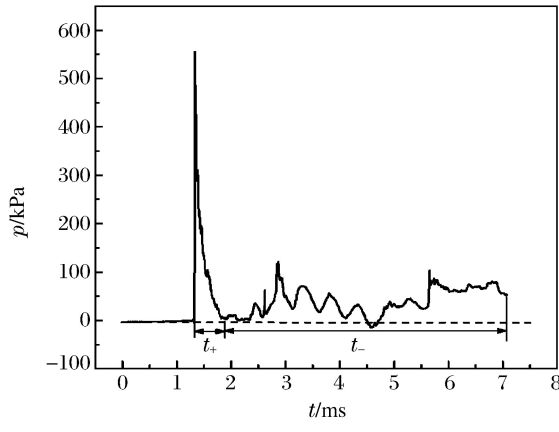


图 5 温压炸药冲击波波形图

Fig. 5 Shock wave of thermobaric explosive

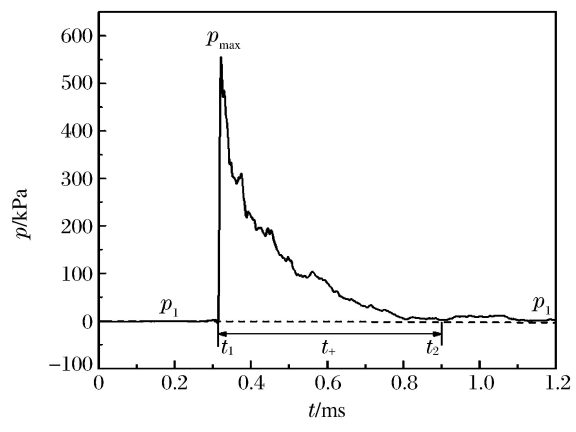


图 6 冲击波参数

Fig. 6 Shock wave parameters

表 2 不同测点处的冲击波参数

Table 2 Shock wave parameters at different test points

Sample	p/kPa			$i_+ / (\text{Pa} \cdot \text{s})$		
	1.0 m	1.2 m	1.5 m	1.0 m	1.2 m	1.5 m
1	601.7	443.2	754.8	80.3	71.5	228.3
2	642.4	471.7	808.1	91.6	76.3	238.6
3	553.1	412.9	713.8	72.6	69.8	231.6

2.2 铝粉粒径对温压炸药能量特性分析

由图 4 和表 2 可知,铝粉粒径对温压炸药爆炸超压和冲量的提升作用大小顺序为 $3 \, \mu\text{m} > 40 \, \text{nm} > 35 \, \mu\text{m}$ 。1.0、1.2 和 1.5 m 处的压力时间曲线呈现振荡波形,1.5 m 处主峰后面出现明显的反射峰,这是因为该处传感器位于爆炸容器的壁面,冲击波在有限空间遇到固壁会形成反射,在特定位置会出现聚焦现象,使冲击波峰值压力增加。样品 1 与样品 2 相比,在 1.0、1.2 和 1.5 m 处的超压和冲量分别降低了 6.3%、6.0%、6.6% 和 12.3%、6.3%、4.3%,样品 3 在 1.0、1.2 和 1.5 m 处的超压和冲量比样品 2 分别降低了 13.9%、12.5%、11.7% 和 20.7%、8.5%、3.0%。

分析认为:铝粉粒度的不同导致了其表面积的不同^[15],理论上,粒径小、比表面积大的铝粉更易参与与爆轰反应中去,可以为传播速度较快的冲击波提供能量^[16],而且铝粉与爆轰产物的二次反应能够减缓有限空间冲击波的衰减速度,因此含有小粒径铝粉的温压炸药其有限空间的超压和冲量较高,如 $p_2 > p_3, i_{+2} > i_{+3}$ 。样品 1 的冲击波参数低于样品 2,这主要是由于铝粉的活性造成的。铝是一种活泼金属,粒径越小其还原性越强,越容易被氧化,从而在表面形成一层氧化膜,导致样品中活性铝的含量降低,能够参与到反应中的铝粉含量被降低^[17-18]。为了验证上述推测,由鞍钢实业微细铝粉有限公司提供

这 3 种粒径铝粉的活性介绍,将其各自的氧化程度列于表 3。通过表 3 中的数据可以看出,随着铝粉粒径的减小,其氧化程度逐渐升高。小粒径的铝粉其表面积较大,有利于反应的进行,但同时更易被氧化,这两个因素的共同作用导致了样品 1 的冲击波参数低于样品 2。

表 3 3 种粒径铝粉的氧化程度
Table 3 Oxidation degree of aluminum
with different particle sizes

Element	Oxidation degree/%		
	Sample 1	Sample 2	Sample 3
Al	84.24	90.57	93.29
Other	15.76	9.43	6.71

3 测试结果与分析

3.1 实验仪器与条件

差示扫描量热实验所用仪器型号为热流型 DSC-204,由德国耐驰公司生产,样品池为带镀金垫片的不锈钢密闭坩埚,60 mL/min 氮气气氛,样品质量为(0.70±0.03)mg,升温速率为 2、4、8 和 10 °C/min,温度范围为 50~400 °C。

3.2 结果与讨论

按照上述实验方法,测量含不同粒径铝粉的温压炸药的 DSC 曲线,测试结果列于表 4,β 为升温速率,M 为样品质量,T₀ 是指放热峰的起始分解温度,T_p 是指放热峰的峰值温度。测试曲线如图 7 所示。

表 4 3 组样品在不同升温速率下的 DSC 结果
Table 4 DSC results of 3 sets of samples at different heating rates

Sample	β/(°C · min ⁻¹)	M/mg	Decomposition process	
			T ₀ /°C	T _p /°C
1	2	0.72	271.6	273.4
	4	0.70	276.6	278.7
	8	0.69	280.4	284.0
	10	0.71	281.0	285.5
2	2	0.70	274.1	276.4
	4	0.69	277.3	279.5
	8	0.71	279.9	284.6
	10	0.71	280.4	285.6
3	2	0.69	276.6	277.9
	4	0.71	278.1	280.1
	8	0.69	279.6	284.9
	10	0.73	280.6	285.8

分析表 4 和图 7 可知,样品 1、样品 2 和样品 3 的 DSC 曲线中均主要存在一个放热峰,随着升温速率的升高,放热分解峰向高温方向偏移。相同升温速率下,样品 3 的起始分解温度和峰值分解温度较样品 1 和样品 2 都有不同程度的提高。以 2 °C/min 为例,其起始分解温度和峰值分解温度分别较样品 1 和样品 2 提高了 5.0 和 4.5、2.5 和 1.5 °C。但随着升温速率的提高,这种影响会减小,使 4、8 和 10 °C/min 升温速率下的 3 组样品的起始分解温度和峰值分解温度相差不大。

为了进一步了解铝粉粒度对温压炸药热分解性的影响,利用 Kissinger 方法((2)式)对 3 个样品的分解过程进行动力学分析,求取表观活化能 E 和指前因子 A。在此基础上,利用(3)式和(4)式分别求得加热速率趋于零时的分解峰温(T_{p0})和热爆炸临界温度(T_b)。计算得到的动力学参数列于表 5 中。

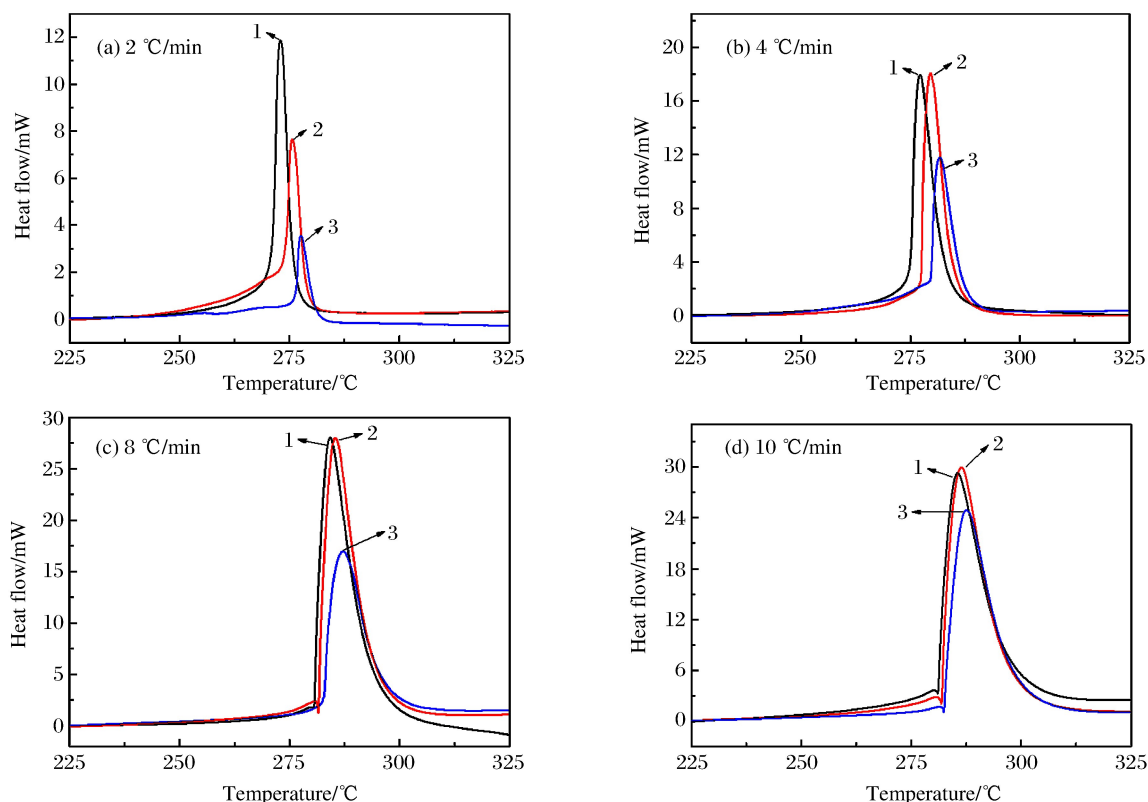


图7 3组样品在不同升温速率下的DSC曲线

Fig. 7 DSC results of 3 sets of samples at different heating rates

$$\ln\left(\frac{\beta}{T_p^2}\right) = \ln\left(\frac{RA}{E}\right) - \frac{E}{R} \frac{1}{T_p} \quad (2)$$

$$T_{pi} = T_{p0} + b\beta_i + c\beta_i^2 + d\beta_i^3 \quad i = 1, 2, 3 \quad (3)$$

$$T_b = \frac{E - \sqrt{E^2 - 4RET_{p0}}}{2R} \quad (4)$$

式中: β 表示升温速率, K/min; T_p 表示放热峰的峰值温度, K; E 表示表观活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$; R 是理想气体常数, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; A 表示指前因子, s^{-1} ; T_{pi} 表示不同升温速率下峰值温度, K; T_{p0} 表示升温速率接近零时的峰值温度, K; b, c, d 表示常数; T_b 表示热爆炸临界温度, K。

表5 3组样品的动力学参数

Table 5 Kinetic parameters of 3 sets of samples

Sample	$E/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	$\lg A$	r	$T_{p0}/^\circ\text{C}$	$T_b/^\circ\text{C}$
1	331.2	77.9	0.999 8	265.3	267.1
2	421.7	97.6	0.994 3	273.6	275.1
3	480.9	117.8	0.990 8	277.0	278.3

由 Kissinger 方法得到的数据可以看出,随着铝粉粒径的减小,温压炸药的活化能也随之减小,较之样品3,样品1和样品2的活化能降低了31.1%和12.3%。活化能表示了反应能垒的高度,活化能较小说明对温度更敏感,那么添加较小粒径铝粉的温压炸药其热安定性降低。根据文献[19-20]的结论可知,火药、炸药和火工药剂的 T_{p0} 值越高,其热安定性越好, T_{p0} 的计算结果见表5。可以发现,粒径最大的样品3比样品1和样品2的 T_{p0} 值分别提升了3.4和11.7 $^\circ\text{C}$,说明加入较大粒径铝粉的温压炸药其热安定性较好。由活化能和 T_{p0} 值这两种数值比较方法都得到相同的结论,说明结果是可信的。

4 结 论

(1) 铝粉粒径对温压炸药爆炸的能量特性有较大影响,通过对比实验发现,含铝粉粒径为 $3\ \mu\text{m}$ 的样品超压和冲量数值在各距离处均最大。

(2) 温压炸药的热安定性随着铝粉粒径的减小而降低,粒径最小的样品 1 的活化能和 T_{p0} 值较样品 2 和样品 3 分别降低了 21.5% 和 8.3 °C、31.1% 和 11.7 °C。

(3) 综合比较 3 组样品的能量输出特性与热安定性后发现,样品 2 的温压炸药在有限空间内既具有高压的特点,也兼备了一定的热安定性,因此,该粒径范围内的铝粉可为优化温压炸药的配方提供参考依据。

参考文献:

- [1] AE W G. Aspects of thermobaric weaponry [J]. ADF Health, 2003, 4(4): 3-6.
- [2] 赵新颖,王伯良,李席,等. 温压炸药爆炸冲击波在爆炸堡内的传播规律 [J]. 含能材料, 2016, 24(3): 231-237.
ZHAO X Y, WANG B L, LI X, et al. Shockwave propagation characteristics of thermobaric explosive in an explosion chamber [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2016, 24(3): 231-237.
- [3] 金朋刚,郭炜,王建灵,等. 不同粒度铝粉在 HMX 基炸药中的能量释放特性 [J]. 含能材料, 2015, 23(10): 989-993.
JIN P G, GUO W, WANG J L, et al. Energy releasing characteristics of aluminum powder in HMX-based explosives [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2015, 23(10): 989-993.
- [4] MURAVYEV N, FROLOV Y, PIVKINA A, et al. Influence of particle size and mixing technology on combustion of HMX/Al composition [J]. Propellants Explosives Pyrotechnics, 2010, 35(3): 226-232.
- [5] 李媛媛,南海. 半密闭条件下爆炸场的温度与压力测量 [J]. 火炸药学报, 2008, 31(1): 48-52.
LI Y Y, NAN H. Detonation field temperature and pressure test under semi-enclosed condition [J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants, 2008, 31(1): 48-52.
- [6] 李媛媛,王建灵,徐洪涛. Al-HMX 混合炸药爆炸场温度的实验研究 [J]. 含能材料, 2008, 16(3): 241-243.
LI Y Y, WANG J L, XU H T. Experimental study on blasting temperature of Al-HMX compound explosive [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2008, 16(3): 241-243.
- [7] 苗勤书,徐更光,王廷增. 铝粉粒度和形状对含铝炸药性能的影响 [J]. 火炸药学报, 2002, 25(3): 4-5.
MIAO Q S, XU G G, WANG T Z. Influence of aluminum particle size on energy output characteristics and thermal stability of emulsion explosive [J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants, 2002, 25(3): 4-5.
- [8] 段晓瑜,郭学永,焦清介,等. 铝粉粒度和铝氧比对含铝炸药在密闭空间内爆炸特性的影响 [J]. 含能材料, 2017, 6(5): 472-478.
DUAN X Y, GUO X Y, JIAO Q J, et al. Effect of aluminum size and content on explosive performance of aluminized explosives in confined space [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2017, 6(5): 472-478.
- [9] 赵凤起,陈沛,杨栋,等. 纳米金属粉对 RDX 热分解特性的影响 [J]. 南京理工大学学报, 2001, 25(4): 420-423.
ZHAO F Q, CHEN P, YANG D, et al. Effects of nanometer metal powders on thermal decomposition characteristics of RDX [J]. Journal of Nanjing University of Science and Technology, 2001, 25(4): 420-423.
- [10] 梁磊,王晶禹,董军. 纳米铝粉对硝铵炸药热分解催化性能的影响 [J]. 火炸药学报, 2009, 32(6): 75-78.
LIANG L, WANG J Y, DONG J. Effects of nano-Al powder on the thermal decomposition catalytic performance of nitroamine explosives [J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants, 2009, 32(6): 75-78.
- [11] ZHU Y L, HUANG H, REN H, et al. Influence of aluminum particle size on thermal decomposition of RDX [J]. Journal of Energetic Materials, 2013, 31(3): 178-191.
- [12] MEI X, JIAO Q, ZHU Y, et al. Thermal study of HNIW (CL-20) and mixtures containing aluminum powder [J]. Journal of Thermal Analysis & Calorimetry, 2014, 116(3): 1159-1163.

- [13] 夏先贵,柏劲松,林其文,等.含铝炸药起爆机理的研究[J].含能材料,1997,7(3):133-136.
XIA X G,BAI J S,LIN Q W,et al. A study on initiation mechanism of Al containing explosive [J]. Chinese Journal of Energetic Materials,1997,7(3):133-136.
- [14] RAI A,PARK K,ZHOU L,et al. Understanding the mechanism of aluminum nanoparticle oxidation [J]. Combustion Theory and Modelling,2006,10(5):843-859.
- [15] 李鸿宾,金朋刚,郭炜,等.炸药在密闭空间中爆炸超压测试与分析[J].科学技术与工程,2013,13(28):8448-8451.
LI H B,JIN P G,GUO W,et al. Overpressure test and analysis of TNT blast in confined chamber [J]. Science Technology and Engineering,2013,13(28):8448-8451.
- [16] 裴明敬,胡华权,陈立强,等.铝粉在温压炸药爆炸过程中的响应分析[J].火炸药学报,2013,36(4):7-12.
PEI M J,HU H Q,CEHN L Q,et al. The behavior of aluminum powder in thermobaric explosive detonating [J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants,2013,36(4):7-12.
- [17] 冯晓军,王晓峰,李媛媛,等.铝粉粒度和爆炸环境对含铝炸药爆炸能量的影响[J].火炸药学报,2013,36(6):24-27.
FENG X J,WANG X F,LI Y Y,et al. Effect of aluminum particle size and explosion atmosphere on the energy of explosion of aluminized explosive [J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants,2013,36(6):24-27.
- [18] 黄亚峰,田轩,冯博,等.真空环境下铝粉粒度与形状对RDX基炸药爆炸场压力和温度的影响[J].含能材料,2016,24(2):144-148.
HUANG Y X,TIAN X,FENG B,et al. Effect of particle size and shape of aluminum powder on the explosion field pressure and temperature of RDX-based explosion in vacuum environment [J]. Chinese Journal of Energetic Materials,2016,24(2):144-148.
- [19] 龚悦,汪旭光,何杰,等.铝粉粒度对乳化炸药能量输出特性及热安定性的影响[J].化工学报,2017,68(4):1721-1727.
GONG Y,WANG X G,HE J,et al. Influence of aluminum particle size on energy output characteristics and thermal stability of emulsion explosive [J]. Journal of Chemical Engineering,2017,68(4):1721-1727.
- [20] LI H Q,AN C W,DU M Y,et al. Study on kinetic parameters of thermal decomposition reaction and thermal stability of 3,4-bis(3-nitrofurazan-4-yl) furoxan based on kissinger method [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants,2016,39(3):58-65.

Influence of Aluminum Particle Size on Explosion Performance and Thermal Stability of Thermobaric Explosive

WANG Mingye, HAN Zhiwei, LI Xi, WANG Boliang

(School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science
and Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: In the present study we fabricated a thermobaric explosive with 3 kinds of aluminum powders (40 nm, 3 μm and 35 μm) to study the influence of the aluminum particle size on the explosive energy output of the thermobaric explosive in a confined space. We measured its shock wave pressure histories at 1.0 m, 1.2 m and 1.5 m of the explosion chamber, and obtained the overpressure and impulse values by analyzing the curves. We also studied the thermal decomposition of thermobaric explosives with different particle sizes of aluminum powder using the DSC. The results show that the aluminum particle size has a great influence on the explosion energy of the thermobaric explosive in a confined space, the overpressure of 2[#] sample with particle size of 3 μm is at least 6.0% and 10% higher than 1[#] and 3[#] sample at each distance, the thermal stability of the 3 samples reduces with the decrease of the aluminum particle size, the biggest falling range of the activation energy is 31.1%, and the maximum value of T_{p0} is reduced by 11.7 $^{\circ}\text{C}$.

Keywords: aluminum particle size; thermobaric explosive; explosion; energy; thermal stability

弹黏塑性热点模型的冲击起爆临界条件^{*}

覃锦程, 裴红波, 李星翰, 张旭, 赵锋

(中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999)

摘要: 非均质炸药冲击起爆临界条件是武器传爆系列设计以及安全性能评估中十分关注的问题。基于 Kim 弹黏塑性热点模型, 通过数值求解冲击波作用下炸药局部热点的温升模型, 获得了 TATB 和 HMX 基炸药在不同冲击压力作用下的冲击起爆临界阈值, 定量分析了孔隙度对炸药冲击起爆临界阈值的影响。与实验数据对比, 结果表明: 在 1~10 GPa 范围内, 采用该模型计算得到的冲击起爆临界阈值与一维短脉冲试验相符, 对应的炸药冲击起爆临界阈值近似为一常量; 当压力大于 10 GPa 时, 非均匀炸药的冲击起爆机制开始由局部热点机制向整体均匀加热机制转变; 在一定压力范围内, 炸药孔隙度越大, 冲击起爆临界阈值越小。

关键词: 起爆判据; 热点模型; 弹黏塑性; 冲击起爆

中图分类号: TJ55; O38

文献标识码: A

非均质炸药在冲击波作用下, 波后会形成局部热点。热点的温升取决于炸药化学反应、外界做功和热传导能量损失的关系, 当炸药化学反应释放能量与外界做功获得的能量之和大于热传导损失的能量时, 该区域内能量便得到累积, 温度继续升高, 化学反应加剧^[1], 直到形成稳定爆轰。否则当热传导损失能量过大, 热点温度不断降低, 化学反应停止。在冲击作用下, 炸药的临界起爆阈值一直是人们研究的重点, 与武器传爆系列的设计以及安全性密切相关。

确定炸药冲击起爆临界阈值的一个重要方法, 是对热点的形成过程求解热传导方程进行研究。Rideal 等^[2]推导得到了热点增长过程中热点最小半径和热点临界温度间的关系。Boddington 等^[3]给出了热点升温的解析公式, 求出热点温度升高至“无穷大”所需的时间。Thomas^[4]计算得到热点发生剧烈反应时的临界温度, 和与之对应的冲击波输入能量的解析关系。目前工程上使用最为广泛的炸药冲击起爆判据由 Walker 等^[5]首先提出

$$p^2 \tau = \text{const} \quad (1)$$

式中: p 是冲击波加载压力, τ 是加载时间, 等式右侧常数主要由炸药本身性质决定。由于可以较好地表征炸药的冲击起爆现象, 这个判据得到了广泛的运用。章冠人^[6]通过推广 Thomas^[4]的能量解析关系, 以冲击波后炸药的均匀加热机制理论证明了这一判据, 此后给出了一种对该判据基于黏弹塑性热点燃烧的细观证明^[7]。对判据的修正和讨论方面, 胡双启等^[8]对该判据进行了热点高压区内侧向传播面积的修正; Peter 等^[9]引入了点火延迟时间, 对判据进行修正以使之与实验结果符合得更好。

为了方便研究, 以前一般假设一个确定的热点尺寸和热点温度, 以代替具体的热点形成过程, 通过考虑这个温度下热点的化学反应和化学放热, 来求解热点的热传导方程, 最终得到炸药冲击起爆条件下热点尺寸和温度的临界关系。热点初始尺寸和温度的选择对计算结果有重要的影响, 但以往论证中的取值往往没有经过严格的讨论和证明。此外部分论证^[6]认为对于炸药的起爆机制, 均相炸药和非均相炸药的区别仅在于均匀加热和非均匀加热, 能量都来源于冲击波本身, 可以不加区分。Loboiko 等^[10]对

^{*} 收稿日期: 2017-10-10; 修回日期: 2017-11-02

基金项目: 国家自然科学基金(11602248); 国防科工局技术基础项目(JSZL2015212C001); 科学挑战专题(TZ2018001)

作者简介: 覃锦程(1993—), 男, 硕士研究生, 主要从事炸药爆轰反应区研究. E-mail: jc_qin@163.com

通信作者: 裴红波(1987—), 男, 博士, 助理研究员, 主要从事炸药基础爆轰性能研究. E-mail: hongbo2751@sina.com

大量实验数据总结分析后指出,冲击波波后对于炸药基体的加热机制,可以由冲击波后的温升区分为两种情况,高于 1000 K 时对应冲击波对炸药整体直接均匀加热的“热起爆”,低于 1000 K 时则为冲击波对热点压缩做功主导的“冷起爆”。因此,需要对热点初始尺寸和温度以及两种起爆机制进行讨论,补充现有起爆判据的理论分析。

Carroll 等^[11]通过将弹塑性材料空隙简化为空心球求解,得到了空隙坍塌过程中热点吸收的塑性功。Kim 等^[12]基于这一求解方法,提出一种空隙塌缩模型,由于可以准确地计算由黏塑性做功导致的热点形成过程,目前在研究热点的诸多模型中,该模型得到广泛的使用和研究。为了将塑性功效应加入热点的形成过程进行讨论,将 Kim 模型引入热传导方程中,通过计算验证了判据(1)在 1~10 GPa 低压区间的适用性,并研究了冲击起爆过程中,不同冲击压力下冲击波对炸药整体均匀加热的“热起爆”,和热点非均匀加热“冷起爆”的竞争关系。

1 热点温升的临界时间

Kim 提出的空隙塌缩模型,可以计算出受压炸药内部,由黏塑性加热生成的热点尺寸和温度。考虑热点的形成过程,热点内部的热平衡方程表示为

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{2.25\gamma [p_0 - p_g - 2\sqrt{3}k \ln(r_o/r_i)]^2}{k(r_i^{-3} - r_o^{-3})r_o^6} + \lambda \nabla^2 T + \rho Q k_0 e^{-E/RT} \quad (2)$$

式中:左边代表温升,等式右边第一项是黏塑性做功,第二项是热传导,第三项是化学反应释能部分。 c_p 、 ρ 、 λ 、 Q 是炸药定压比热、密度、热传导系数以及反应热, p_0 、 p_g 是冲击波压力和大气压, k 是炸药的剪切屈服强度, γ 为黏性系数,因为讨论的是热点附近的小区域,故做功项中半径取炸药等效空心球的内径 r_i , r_o 为空心球的外径。

章冠人^[6]对(2)式采用以下无量纲化变量和 Frank-Kamenetskii 近似

$$\begin{cases} \theta = \frac{E}{RT_0^2}(T - T_0), \quad \eta = \frac{\lambda t}{\rho c_p r_i^2} = \frac{a^2 t}{r_i^2}, \quad a = \frac{\lambda}{\rho c_p} \\ \delta = \frac{Q k_0 E r_i^2 \exp(-E/RT_0)}{\lambda R T_0^2}, \quad \xi = \frac{x}{r_i} \\ K = \frac{2.25 E r_i^2 \gamma [p_0 - p_g - 2\sqrt{3}k \ln(r_o/r_i)]^2}{\lambda R T_0^2 k (r_i^{-3} - r_o^{-3}) r_o^6} \\ \exp(-E/RT) \approx \exp(-E/RT_0) \cdot \exp(\theta) \end{cases} \quad (3)$$

对(2)式进行无量纲化,可以得到

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} = K + \delta \exp(\theta) + \nabla_\xi^2 \theta \quad (4)$$

在冲击脉冲的压力幅值 p_0 恒定时,(3)式表示的单位时间内的简化做功温升 K 是恒值,于是此处任务变为求(4)式中 K 和 δ 的临界取值,当存在满足某一 $f(K, \delta) > f_c$ 的条件阈值时,热点温度会剧烈上升,反之由于热传导的冷却效应,温度下降或不再继续上升而使炸药无法起爆。

在最开始时由于温度较低,温度梯度较小,热传导效应即(4)式中最后一项可以忽略,时间到达温度开始剧烈上升的临界值时,热传导的冷却效应才起较大作用^[6],故在临界时间前(4)式可化为

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} = K + \delta \exp(\theta) \quad (5)$$

将(5)式对时间积分可得

$$\int_0^{\theta_c} \exp(-\theta) d\theta = \delta_c \int_0^{\lambda_c} d\lambda + K \int_0^{\lambda_c} \exp(-\theta) d\lambda \quad (6)$$

下标“c”表示各物理量在临界点的值,由于温度到达临界值后,理想条件下可以瞬间上升到无穷大,故(6)式左边可化为

$$\int_0^{\theta_c} \exp(-\theta) d\theta \approx \int_0^\infty \exp(-\theta) d\theta = 1 \quad (7)$$

同时(6)式中右边第二项自然常数 e 的负 $\theta(\lambda)$ 次指数项积分存在上限,因此由积分中值定理,可将该项表示为某平均系数的乘积形式

$$\int_0^{\lambda_c} \exp(-\theta) d\lambda = \bar{W} \lambda_c$$

(8)

式中: \bar{W} 的大小由温升的剧烈程度决定,此时(6)式可化简为

$$1 = \delta_c \lambda_c + K \bar{W} \lambda_c$$

(9)

可得临界时间

$$\lambda_c = \frac{1}{\delta_c + K \bar{W}}$$

(10)

由此可知,热点到达剧烈温升的临界时间存在,并由化学反应和黏塑性做功两部分共同决定。

2 模型建立与数值求解

冲击波在通过炸药内部时,会对炸药整体均匀加热,整个过程在波后 1 ns 内完成^[10],由于冲击温升时间极短,加热完成的温度可以作为(2)式的初始温度。

炸药的冲击温升可通过求解状态方程得到,对于未反应炸药,显含温度形式的 JWL 状态方程

$$p_0 = A e^{-R_1 \bar{v}} + B e^{-R_2 \bar{v}} + \omega c_v \frac{T_0}{\bar{v}}$$

(11)

式中: p_0 冲击波为对炸药输入压力, $\bar{v}=v/v_0$ 为炸药的相对比容, T_0 为冲击波通过瞬间炸药的温度。

对于炸药的冲击波后温度 T_0 ,可近似拟合为与炸药比容相关的 Hom 状态方程形式

$$\ln(T_0) = F_s + G_s \ln v_s + H_s (\ln v_s)^2 + K_s (\ln v_s)^3 + J_s (\ln v_s)^4$$

(12)

通过给定初始输入压力 p_0 ,联立求解(11)式、(12)式,可以得到炸药在冲击波后的初始温度 T_0 和比容 v_s ,表 1 将求解状态方程所需的参数列出,其中 TATB 的 HOM 状态方程采用了成分相近的 COMP-B 炸药参数^[15]。

表 1 计算炸药初始温度所需状态方程参数

Table 1 JWL & HOM EOS parameters for calculating initial temperature of unreacted explosives						
Explosive	A/GPa	B/GPa	R ₁	R ₂	ω	c _v /(μJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)
HMX ^[13]	6 969	−172.7	7.8	3.9	0.857 8	25.05
TATB ^[14]	632 07	−4.472	11.3	1.13	0.893 8	24.87
Explosive	F _s	G _s	H _s	K _s	J _s	
HMX ^[15]	−9.042	−71.32	−125.2	−92.04	−22.19	
TATB ^[15]	−8.868	−79.74	−159.4	−135.4	−39.13	

将(2)式化为温升描述的显式,有

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{2.25\gamma [p_0 - p_g - 2\sqrt{3}k\ln(r_i/r_o)]^2}{c_p \rho k (r_i^{-3} - r_o^{-3}) r_o^6} + \frac{\lambda \nabla^2 T}{c_p \rho} + \frac{Qk_0}{c_p} e^{-T^*/T}$$

(13)

以冲击波后等效空心球的初始温度和密度作为初始条件,对(13)式采用 Fortran 语言自编程序数值求解,表 2 将模型计算所需的参数和来源列出,其中对 TATB 采用了组分接近的 PBX-9502 炸药剪切屈服强度^[18]。

表 2 Kim 空穴坍塌模型参数

Table 2 Parameters for Kim's pore collapse model					
Explosive	Frequency factor	Activation	Specific heat c _p /	Density	Shear yield
	K ₀ /Ms	temperature T [*] /K	(10 ³ m ² ·s ⁻² ·K ⁻¹)	ρ/(g·cm ⁻³)	strength k/MPa
HMX ^[16]	50	26 500	1.385	1.84	8.0
TATB ^[16]	31.8	30 140.8	2.005 ^[17]	1.80	12.702 ^[18]
Explosive	Chemical heat	Thermal conductivity	Viscosity	Outer radius	Inner radius
	Q/(10 ⁶ m ² ·s ⁻²)	λ/(10 ⁻¹⁰ m·s ⁻¹ ·K ⁻¹)	coefficient γ/s ⁻¹	of pore r _o /cm	of pore r _i /cm
HMX	5.439	8.0	300 ^[12]	0.01	0.003 24
TATB	2.51	8.0	300 ^[12]	0.01	0.003 24

在 $p_0=4\text{ GPa}$ 初始压力作用下,HMX 炸药内部热点温升曲线,和热点形成过程中导致温升的化学反应和塑性功作用比例,分别如图 1、图 2 所示。

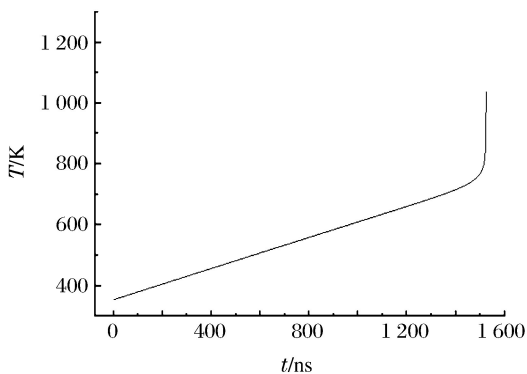


图 1 热点形成过程温升计算结果
Fig. 1 Calculated result of temperature rising
in the hot-spot formative process

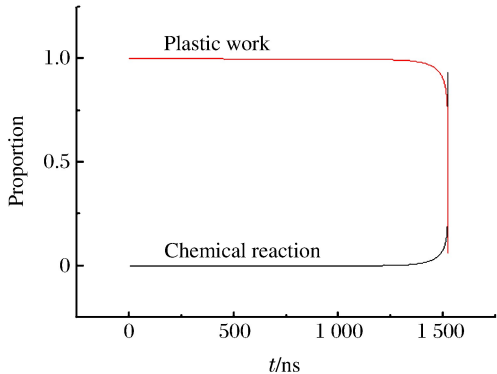


图 2 热点形成过程中导致温升的化学反应和塑性功作用比例
Fig.2 Proportion of temperature rising due to chemical reaction
and plastic work in the hot-spot formative process

由图 1 可见,温度在随时间近似线性升高的过程中,到达某一特征临界点后骤增,温升速率趋于无穷大,即存在明显的拐点。因此可以将该处视为冲击压缩的临界时间点,以温度作为参考依据,若能达到该临界温度则认为热点温度升高足够,能够引燃炸药基体进一步形成爆轰。图 2 给出了热点形成过程中两种主要效应的作用比例,可以看出,在压缩过程前期温升由做功主导,温度接近临界点后化学反应才变得剧烈,对温升的贡献显著增加,不同冲击压力对应的临界时间计算结果如表 3 所示。

表 3 冲击脉冲压力、温升临界时间及对应起爆阈值计算结果
Table 3 Calculated result of impulse pressure,temperature rising time
and corresponding initiation threshold

Pressure/ GPa	Time/ ns	Initiation threshold/ (GPa ² · ns)	Pressure/ GPa	Time/ ns	Initiation threshold/ (GPa ² · ns)
25			2	5 877	23 508
20	11	4 400	1	22 869	22 869
15	65	14 625	0.60	64 980	23 392
10	215	21 500	0.55	78 355	23 702
9	277	22 437	0.50	96 911	24 277
8	362	23 168	0.45	124 914	25 295
7	485	23 765	0.44	132 530	25 657
6	671	24 156	0.43	141 293	26 125
5	974	24 350	0.42	151 635	26 748
4	1 522	24 336	0.40	181 031	28 964
3	2 674	24 066	0.38		

由表 3 计算结果可知,对于压力区间 1~10 GPa 的脉冲而言,基本满足 $p^2\tau=\text{const}$ 的经验关系。同时可以看出,1 GPa 以下的低压区域计算阈值偏离常值较大,该结果与 Peter 等^[9] 低压长脉冲下,实际压力阈值往往高于判据曲线,同时存在最小起爆压力值的低压冲击起爆实验结论保持一致。热平衡方程(2)的分析仅是对于单一热点而言,而在炸药的起爆过程中,还涉及热点对周围炸药基体的燃烧扩散,实际需要的最低压力应该高于热点计算的最小值,所以由(2)式在 1 GPa 及以下压力范围内计算得到的最小起爆压力,应该小于实验临界起爆压力。

对于高压短脉冲段,冲击阈值在 10 GPa 以上与 10 GPa 以下计算所得结果较大,温升临界时间缩短到 100 ns 以内,该时间长度和炸药的爆轰反应区时间相当。这是因为在高压区间,主要的起爆机制发生了转变,即此时冲击温升占主导,波后炸药瞬间达到较高的初始温度,故更容易发生起爆。由计算可得在输入压力为 25 GPa 时仅由冲击波引起的整体加热已使炸药初始温度达到 1 000 K 左右,足够令炸药发生剧烈化学反应,所以在高压下,热点形成对炸药的冲击起爆影响较小。另外由 Peter 等^[9]的非均匀炸药冲击起爆实验可知,主要成分为 HMX、密度为 1.84 g/cm³ 的 PBX-9404 实验拟合起爆阈值为 $p^2\tau=17\,000\text{ GPa}^2\cdot\text{ns}$,密度为 1.80 g/cm³ 的 TATB 实验拟合阈值为 $p^2\tau=37\,000\text{ GPa}^2\cdot\text{ns}$,同密度和孔隙度的 HMX 模型计算结果约为 24 000 GPa²·ns, TATB 为 60 000 GPa²·ns。实验值和计算结果都反映了敏感和钝感炸药,具有明显不同的起爆脉冲阈值,两者起爆阈值的区别由两种炸药不同的冲击压缩性质、化学反应性质、吸收做功能力和比热等共同决定。

此外,使用该模型可定量研究炸药孔隙度对起爆阈值的影响。热点一般形成在缺陷、微裂纹和微损伤附近,炸药的孔隙度表征了炸药中缺陷、微裂纹和微损伤的质量分数。若干实验结果已经证明,非均匀炸药的孔隙度对于冲击起爆有重要的影响。在 Kim 模型中,孔隙度 φ 定义为

$$\varphi = \frac{V_i}{V_o} = \frac{r_i^3}{r_o^3} \quad (14)$$

内径 r_i 为平均缺陷尺寸,外径 r_o 为炸药颗粒的平均尺寸,保持外径不变,根据不同的孔隙度取不同的空心球内径,采用不同强度的冲击波加载,以同样的数值方法进行计算,可以得到 PBX-9404 炸药不同孔隙度下 $p^2\tau$ 的计算值。

图 3 为不同孔隙度下 PBX-9404 的冲击起爆阈值。可以看出,随着炸药孔隙度的下降,冲击起爆阈值呈上升趋势,这是因为炸药内部缺陷越少,冲击压缩下热点越难以形成,炸药的冲击起爆越难以发生。

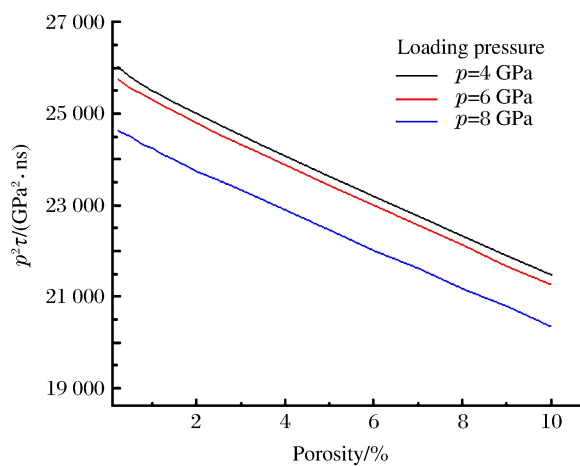


图 3 不同孔隙度下 PBX-9404 的冲击起爆阈值

Fig. 3 Initiation thresholds of PBX-9404 with different porosities

3 结 论

(1) 从 Kim 的弹黏塑性空心球压缩模型出发,考虑了热点在炸药冲击起爆过程中的影响,由计算热点温升陡变点的方法,验证了 1~10 GPa 压力下一维短脉冲冲击起爆判据的适用性。

(2) 从计算结果可以看出,就冲击起爆而言,10 GPa 以上和 10 GPa 以下的冲击波加载,对炸药的起爆起主要作用的两种机制有明显的区别。随着压力升高,逐渐由热点“冷起爆”向冲击波对炸药整体加热的“热起爆”转化。

(3) 通过计算验证炸药存在一个理论最小冲击起爆压力值。此外,还验证了炸药孔隙度越大,冲击越容易发生的实验现象。

参考文献:

- [1] 孙锦山,朱建士. 理论爆轰物理 [M]. 北京:国防工业出版社,1995:332-334.
SUN J S, ZHU J S. Theoretical detonation physics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1995: 332-334.
- [2] RIDEAL E K, ROBERTSON A J B. The sensitiveness of solid high explosives to impact [J]. Proceedings of the Royal Society A, 1948, 195(1041): 135-150.
- [3] BODDINGTON T. The growth and decay of hot spots and the relation between structure and stability [J]. Symposium on Combustion, 1963, 9(1): 287-293.

- [4] THOMAS P H. An approximate theory of “hot spot” critically [J]. Combustion and Flame, 1973, 21(1): 99-109.
- [5] WALKER F E, WASLEY R J. Critical energy for shock initiation of heterogeneous explosives [J]. Explosive Stoffe, 1969, 17(1): 9-13.
- [6] 章冠人. 瞬时加热热点的近似临界理论 [J]. 爆炸与冲击, 1982, 2(3): 53-60.
ZHANG G R. An approximate theory of criticality of “hot spot” of instantaneous addition of heat [J]. Explosion and Shock Waves, 1982, 2(3): 53-60.
- [7] 章冠人. 粘弹塑性热点燃烧模型的冲击起爆理论 [J]. 爆炸与冲击, 1988, 8(3): 20-24.
ZHANG G R. Theory of initiation of hot spot in heterogeneous explosive with visco-elastic-plastic and combustion model [J]. Explosion and Shock Waves, 1988, 8(3): 20-24.
- [8] 胡双启, 谭迎新, 张景林. 凝聚炸药的冲击起爆 [J]. 中国安全科学学报, 1995, 5(4): 57-61.
HU S Q, TAN Y X, ZHANG J L. Shock initiation of heterogeneous explosive [J]. China Safety Science Journal, 1995, 5(4): 57-61.
- [9] PETER J H, MALCOLM D C. A modified criterion for the prediction of shock initiation thresholds for flyer plate and rod impacts [C]//14th International Detonation Symposium. Coeur d’Alene, ID, 2010: 199-207.
- [10] LOBOIKO B G, LUBYATINSKY S N. Reaction zones of detonating solid explosives [J]. Combustion Explosion & Shock Waves, 2000, 36(6): 716-733.
- [11] CARROLL M M, HOLT A C. Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials [J]. Journal of Applied Physics, 1972, 43(4): 1626-1636.
- [12] KIM K, SOHN C H. Modeling of reaction buildup processes in shock porous explosive [C]//8th International Symposium on Detonation. Albuquerque, NM, 1985: 926-933.
- [13] LEE E L, TARVER C M. Phenomenological model of shock of shock initiation in heterogeneous explosives [J]. Physics of Fluids, 1980, 23(12): 2362-2372.
- [14] GARCIA M L, TARVER C M. Three-dimensional ignition and growth reactive flow modeling of prism failure tests on PBX 9502 [C]//13th International Detonation Symposium. Norfolk, VA, 2006: 164-169.
- [15] 章冠人, 陈大年. 凝聚炸药起爆动力学 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1991: 129-130.
ZHANG G R, CHEN D N. Condensed explosive initiation dynamics [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 1991: 129-130.
- [16] 张震宇, 田占东, 陈军, 等. 爆轰物理 [M]. 长沙: 国防工业出版社, 2016: 206-207.
ZHANG Z Y, TIAN Z D, CHEN J, et al. Detonation physics [M]. Changsha: National Defense Industry Press, 2016: 206-207.
- [17] LIU Y R, DUAN Z P, ZHANG Z Y, et al. A mesoscopic reaction rate model for shock initiation of multi-component PBX explosives [J]. Journal of Hazardous Materials, 2016, 317: 44-51.
- [18] HOFFMAN D M. Mechanical mocks for insensitive high explosives [J]. Journal of Energetic Materials, 2003, 21(4): 201-222.

Shock Initiation Thresholds of Heterogeneous Explosives with Elastic-Visco-Plastic Hot Spot Model

QIN Jincheng, PEI Hongbo, LI Xinghan, ZHANG Xu, ZHAO Feng

(*Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China*)

Abstract: The initiation criterion of heterogeneous explosives is important for weapon design and safety evaluation. In this paper, based on Kim’s elastic-visco-plastic “hot-spot” model, we numerically solved a temperature rising model of a local hot-spot inside the explosive, and obtained the initiation thresholds for TATB and HMX under different shock loading pressures. We quantitatively analyzed the influence of explosives’ porosities on the shock initiation thresholds, and compared the calculated thresholds with experimental results. We drew the following conclusions: under a pressure of 1-10 GPa, the calculated initiation thresholds agree well with the one-dimensional shock initiation experimental results; the corresponding initiation thresholds of the explosives are approximately constant; under a pressure above 10 GPa, as the pressure rises gradually, the dominant shock initiation mechanism of the heterogeneous explosives transforms from the uneven heating of the local hot spot, to the shock’s direct heating of the bulk of the explosive. Furthermore, we also verified that, within a given pressure range, the initiation threshold dropped as the explosives’ porosities increased.

Keywords: initiation criterion; hot spot model; elastic-visco-plastic; shock initiation

带舱大型战斗部跌落响应数值分析^{*}

李广嘉^{1,2}, 周涛², 曹玉武², 栗保华²

(1. 南京理工大学机械工程学院, 江苏 南京 210094;

2. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 采用 ANSYS/LS-DYNA 动力学仿真软件模拟战斗部跌落试验, 基于材料本构模型对战斗部跌落安全性进行预测, 得到了不同状态下战斗部跌落的结构变形和装药响应数据。结果表明: 带舱战斗部 45° 倾斜跌落时, 壳体和主装药受到的应力和过载均最小, 但舱体变形最严重; 战斗部大端向下垂直跌落时, 壳体受到的应力较小, 但炸药受到的应力和过载均最大, 工况最恶劣。研究结论为带舱大型战斗部的跌落考核试验提供了指导。

关键词: 弹药安全性; 跌落试验; 带舱战斗部

中图分类号: O389

文献标识码: A

跌落考核是战斗部安全性检验必须经历的试验之一, 通常采用直接跌落方式进行, 获取战斗部的宏观响应结果。但是, 由于工程试验不能完整地显现跌落过程中战斗部结构及装药的冲击力学响应, 同时受研制成本和时间的制约, 不适用以试验方式一一验证不同角度、不同结构的试验工况, 因此采用数值仿真研究战斗部在不同工况跌落刺激下的动态响应规律, 能够克服试验耗资巨大、安全性保障等实际问题, 节约研究成本和时间, 为战斗部工程研制提供理论支撑^[1-3]。目前, 国内关于弹药安全性跌落研究多集中于战斗部用炸药^[4-5], 对大型带舱战斗部跌落的力学响应研究较少。本工作通过数值模拟对带舱大型战斗部跌落进行研究, 建立仿真模型, 得到不同状态下战斗部跌落时结构及装药的响应结果, 以预估并指导试验实施。

1 带舱战斗部数值计算

1.1 数值计算模型

计算模型由带舱战斗部和跌落试验钢板组成。带舱大型战斗部结构剖面如图 1 所示, 它具有质量大 ($m \geq 1\,000\text{ kg}$)、毁伤元多 (破片数量达数万枚)、带外形舱等结构特征。

由于舱体外形由上、下两种直径结构过渡而形成, 且战斗部布置的十余万枚毁伤元尺寸不一致, 因此采用全尺寸模型建模; 同时考虑到计算模型尺寸大, 且核心问题是研究战斗部装药在跌落工况下的响应, 为了提高计算效率, 计算网格划分采用由密到疏过渡的方式, 并对战斗部中心装药位置网格进行加密处理。跌落试验主要考核战斗部的装药安定性和结构

设计。试验中, 带舱战斗部与钢板碰撞后进行来回减幅弹跳, 最终静止。此过程中带舱战斗部经受的过载随时间变化, 相应的战斗部装药的应变率及其内应力也随时间变化^[6-12]。带舱战斗部的跌落高度为 3 m, 其跌落速度低于阈值速度, 跌落弹跳振动中, 炸药没有点火只发生塑性变形。因此, 炸药的本构模



图 1 带舱大型战斗部结构剖面
Fig. 1 Structural profile of large warhead in cabin

^{*} 收稿日期: 2017-05-23; 修回日期: 2017-06-14

作者简介: 李广嘉 (1977—), 女, 工程师, 主要从事数值仿真、弹药战斗部技术研究. E-mail: 582673203@qq.com

通信作者: 周涛 (1979—), 男, 高级工程师, 主要从事爆炸力学和战斗部设计研究. E-mail: 33222800@163.com

型采用 MAT_PIECEWISE_LINEAR_PLASTICITY,此模型适用性好,可描述任意的应力-应变关系及应变率条件^[13]。

战斗部结构采用绝热材料,为防止应变率效应、能量消耗引起的材料软化效应等现象,采用塑性硬化模型 MAT_PLASTIC_KINEMATIC^[14-15]。计算采用国际单位制,主要参量如表 1~表 4 所示。其中: ρ 是密度, E 是杨氏模量, ν 是泊松比, N 是耦合标志, σ_Y 是屈服强度, E_{TAN} 是切线模量,FAIL 是失效参量, t_{DEL} 是最小时间步(针对单元删除), C 、 P 是应变率参数, v_p 是炸药反应率, β 是硬化系数。

表 1 炸药材料本构方程
Table 1 Constitutive equation of explosive materials

$\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	E/GPa	ν	σ_Y/MPa	E_{TAN}/MPa	FAIL	t_{DEL}	C
1 700	8.56	0.25	209	231	0	0	0

表 2 靶板材料模型及参数
Table 2 Target material model and the parameters

$\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	E/GPa	ν	N
7 850	200	0.3	0

表 3 扩爆药柱材料模型及参数
Table 3 Booster explosive material model and the parameters

$\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	E/GPa	ν	σ_Y/MPa	E_{TAN}/MPa	C	P	v_p
1 630	2.90	0.25	190	210	0	0	0

表 4 破片材料模型及参数
Table 4 Fragment material model and the parameters

$\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	E/GPa	ν	σ_Y/GPa	E_{TAN}/MPa	β
19 250	350	0.25	1.5	170	1

1.2 计算工况

根据 GJB 3857—99《弹药安全性试验规程》中裸弹跌落时的姿态^[4]确认数值模拟工况。即:带舱大型战斗部在距离钢板上方 3 m 高度处,以水平、垂直(大端向下和小端向下)和 45°倾斜 4 种不同姿态自由跌落到钢板上,钢板尺寸为 3.00 m(长)×0.90 m(宽)×0.61 m(厚),如图 2 所示。



图 2 带舱大型战斗部跌落试验工况
Fig. 2 Fall test conditions of large warhead in cabin

1.3 网格划分

由于试验战斗部结构复杂、尺寸大,模型采用全六面体三维网格划分,对复杂形体进行网格分离计算,如图 3 所示。使用 Lagrange 算法,战斗部与钢板接触部分之间添加相应的接触算法,并对战斗部施加重力。

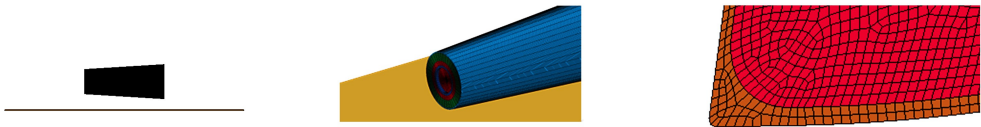


图 3 网格划分情况
Fig. 3 Meshing condition

2 数值计算结果

数值模拟结果表明,各种试验工况下炸药内应力均未超过阈值,装药状态稳定,带舱大型战斗部模拟跌落不燃不爆。当带舱战斗部大端向下垂直跌落,即战斗部上端距钢板 2.2 m、以 3.96 m/s 速度下落时,炸药所受过载最大,可被认为最恶劣工况,模拟结果如图 4 所示。

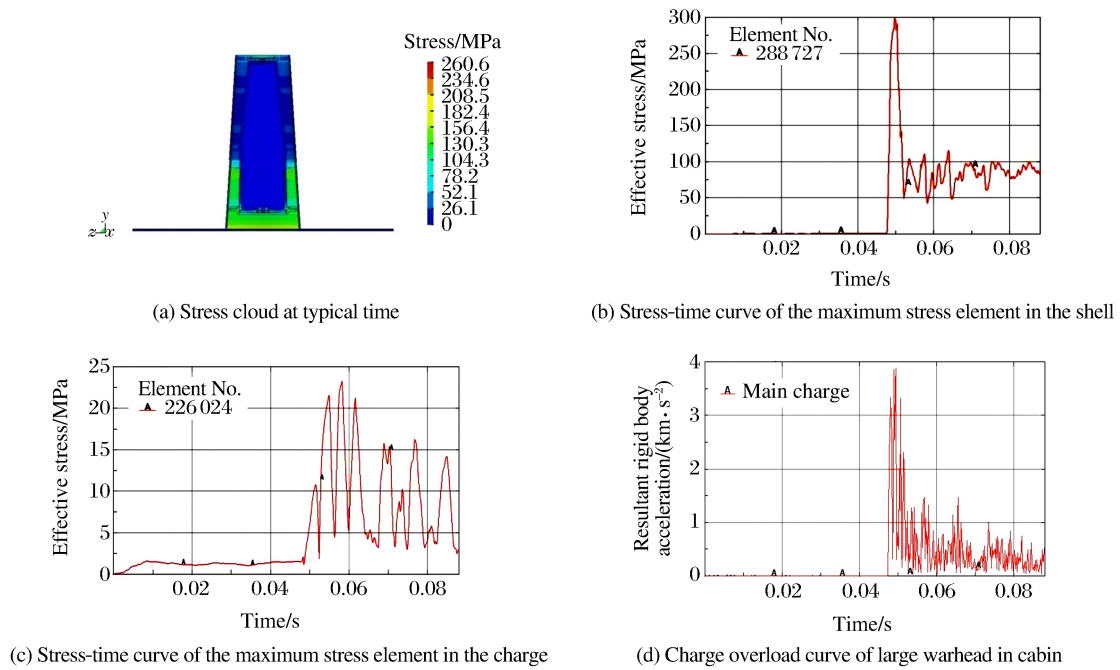


图 4 恶劣工况数值计算典型结果

Fig. 4 Typical numerical results under poor working conditions

表 5 给出了 4 种工况下战斗部内壳体及主装药的最大应力和过载结果,其中: g 表示重力加速度。由表 5 可知:带舱战斗部大端向下垂直跌落时炸药过载最大,为带舱战斗部最恶劣的跌落姿态;以水平姿态跌落时壳体应力最大,可能导致结构变形较大。

表 5 跌落试验仿真计算结果

Table 5 Fall test simulation results

Case	Maximum stress of shell/MPa	Maximum stress of charge/MPa	Maximum charge overload/ g
1	299.2	23.30	312.1
2	354.0	15.84	237.4
3	602.6	7.86	161.7
4	283.9	2.98	33.1

3 试验验证及分析

3.1 试验验证

选取最严酷的工况进行跌落试验,即大端向下、炸药过载最大。图 5 为试验布局,图 6 为试验结果。试验结果符合试验合格判据要求,带舱战斗部从距离地面 3 m 高处跌落安全,未燃未爆。

3.2 结果分析

数值计算的各工况结果如图 7~图 9 所示。从图 7 和图 8 可以看出,带舱战斗部跌落时炸药最大应力及最大过载为:工况 1(大端向下垂直跌落)>工况 2(小端向下垂直跌落)>工况 3(水平跌落)>工

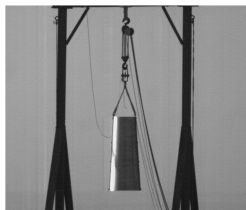


图5 试验布局

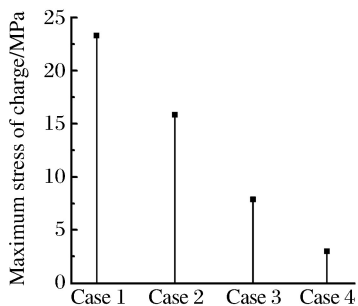
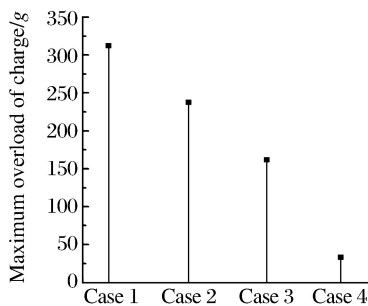
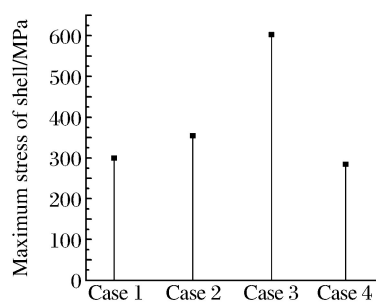
Fig. 5 Test layout



图6 试验结果

Fig. 6 Test result

况4(45°倾斜跌落),其中战斗部以工况1方式跌落时,炸药过载最大(312.1g),以工况4方式跌落时,炸药过载最小(33.1g),两者相差约1个数量级。主装药的最大应力为23.30 MPa,远远小于一般炸药发生冲击起爆时吉帕级的压力阈值,故不会发生爆炸。从图9可以看出,带舱战斗部壳体的应力为:工况3(水平跌落)>工况2(小端向下垂直跌落)>工况1(大端向下垂直跌落)>工况4(45°倾斜跌落),其中以工况3方式跌落时壳体受到的应力最大,为602.6 MPa,以工况4方式跌落的应力最小,为283.9 MPa。

图7 带舱战斗部各工况
炸药最大应力Fig. 7 Maximum stress of
explosives in various cases图8 带舱战斗部各工况
炸药最大过载Fig. 8 Maximum overload of
explosives in various cases图9 带舱战斗部各工况
壳体最大应力Fig. 9 Maximum stress of
shell in various cases

4 结 论

(1) 通过数值仿真研究可以考虑到所有严酷条件,模拟跌落试验的各种实际工况,得到战斗部结构及装药的动态响应规律,能够用于复杂结构炸药部件跌落的安全性分析,有效指导战斗部的工程研制。

(2) 带舱大型战斗部跌落的模拟试验表明:水平跌落时壳体受到的应力最大,炸药受到的应力较小,舱体变形较大;45°倾斜跌落时壳体和主装药受到的应力和过载均最小,但舱体变形最严重;大端向下垂直跌落时壳体受到的应力较小,炸药受到的应力和过载均最大,舱体变形最小。

参考文献:

- [1] 江明,唐成,袁宝慧. 导弹战斗部安全性试验评估 [J]. 四川兵工学报, 2015, 36(7): 6-9.
JIANG M, TANG C, YUAN B H. Summary of missile warhead's safety tests evaluation [J]. Journal of Sichuan Ordnance, 2015, 36(7): 6-9.
- [2] 董三强,冯顺山,金俊. 弹药安全性能评价模型研究 [J]. 兵工学报, 2011, 32(4): 421-425.
DONG S Q, FENG S S, JIN J. Researches on safety assessment model of ammunitions [J]. Acta Armamentarii, 2011, 32(4): 421-425.
- [3] 董海山. 钝感弹药的由来及重要意义 [J]. 含能材料, 2006, 14(5): 323-329.
DONG H S. The importance of the insensitive munitions [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2006, 14(5): 323-329.
- [4] 国防科工委司令部. 弹药安全性试验规程: GJB 3857-99 [S]. 1999.

- [5] 高大元,申春迎,黄谦,等.炸药件在模拟跌落试验中的响应[J].火炸药学报,2012,35(5):13-16.
GAO D Y, SHEN C Y, HUANG Q. Reaction of explosive subassembly under simulated drop test [J]. Chinese Journal of Explosive & Propellants, 2012, 35(5): 13-16.
- [6] WATT D, DESCHAMBAULT E, TOUZE P. Insensitive munitions (IM): a key aspect of improved munitions safety [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2006, 14(5): 323-329.
- [7] 王晓峰,赵省向.战术战斗部用炸药[M].西安:中国兵器工业第二〇四研究所,2003.
WANG X F, ZHAO S X. Tactical warhead with explosives [M]. Xi'an: China Ordnance Industry Institute, 2003.
- [8] 孙锦山.高能炸药的非常理想爆轰性能研究[J].含能材料,2004,12(增刊2):341-344.
SUN J S. Research on non-ideal detonation performance of high energy explosives [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2004, 12(Suppl 2): 341-344.
- [9] CHIDESTER S K, GREEN L G, LEE C G. A frictional work predictive method for the initiation of solid high explosives from low pressure impacts [C]//10th International Detonation Symposium, Boston, MA: Office of Naval Research, 1993: 785-792.
- [10] 宋浦,肖川,沈飞.炸药非常理想爆轰能量释放与能量利用的关系[J].火炸药学报,2011,34(2):44-46.
SONG P, XIAO C, SHEN F. Relationship of energy release and utilization of non-ideal detonation of explosive [J]. Chinese Journal of Explosive & Propellants, 2011, 34(2): 44-46.
- [11] 王晨,陈朗,鲁峰.炸药跌落响应数值模拟分析[J].含能材料,2012,12(6):748-753.
WANG C, CHEN L, LU F. Numerical simulation for spigot tests [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2012, 12(6): 748-753.
- [12] 王晨,陈朗,何乐.低强度冲击下炸药点火的数值模拟[J].火炸药学报,2012,35(2):44-48.
WANG C, CHEN L, HE L. Numerical simulation of explosive ignition under low impact loading [J]. Chinese Journal of Explosive & Propellants, 2012, 35(2): 44-48.
- [13] TARVER C M, HALLQUIST J O, ERICKSON L M. Modeling of shortpulse duration shock initiation of solid explosive [C]//Proceedings of 8th Symposium (International) on Detonation, Albuquerque, 1985: 951-961.
- [14] 时党勇,李裕春,张胜民.基于 ANSYS/LS-DYNA 8.1 进行显示动力分析[M].北京:清华大学出版社,2005.
- [15] HALQUIST J. LS-DYNA keyword user's manual version 971 [M]. Livermore, CA: Livermore Software Technology Corporation, 2007.

Numerical Analysis of Falling Response of Large Warhead in Cabin

LI Guangjia^{1,2}, ZHOU Tao², CAO Yuwu², LI Baohua²

(1. School of Mechanical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China;

2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: In this study, we used the ANSYS/LS-DYNA software to simulate the fall test of the cabin warhead in order to predict its safety performance, and obtained the structural stress deformation and charge overload response of the combat simulation of the warhead in different states. The results show that the stress and overload of the shell and the main charge are the smallest when the cabin warhead is tilted at 45°, but the deformation of the shell is the most severe; and the stress of the shell is small when the large part of the warhead is dropped vertically, but the stress and overload of the charge are the largest, indicating the worst assessment posture. The actual fall test of the large warhead in cabin is successfully passed, and the numerical simulation can provide theoretical support.

Keywords: ammunition safety; fall test; cabin warhead

一种隔热弹衣对弹体装药反应的影响^{*}

王洪波¹, 牛公杰¹, 钱立新¹, 魏雪婷¹, 卢永刚¹, 路中华², 张中礼¹, 张鹤³

(1. 中国工程物理研究院总体工程研究所, 四川 绵阳 621999;

2. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621999;

3. 内蒙合成化工研究所, 内蒙古 呼和浩特 010010)

摘要: 采用烤燃试验研究了一种隔热弹衣对弹体装药反应的影响。通过对比包覆隔热弹衣试验件和无隔热弹衣试验件火烧后的反应状态, 发现隔热弹衣对弹体装药反应等级没有明显影响, 但可有效延迟装药热点火反应时间达 32 min, 为火灾环境下弹药救援处置赢得时间。进一步分析发现, 隔热弹衣的热防护效果不仅与其自身的低导热性有关, 也与隔热弹衣和弹体之间的空气间隙有关。

关键词: 装药; 隔热弹衣; 烤燃试验; 反应等级

中图分类号: O381; TJ55

文献标识码: A

随着我国各种大型作战平台陆续服役, 实战化和复杂战场环境对武器弹药的安全性提出了更高要求。以机载弹药为例, 主要有航空炸弹和导弹, 其中航空炸弹的装药量相对较大, 但其安全性却相对较低。同时, 由于航空炸弹在弹药库内处于裸弹(无包装箱)分装存放状态, 一旦发生火灾, 潜在破坏力巨大。因此, 外界热刺激下弹药的安全性研究对提高武器弹药的安全性具有重要意义^[1]。

在弹体结构上设计压力缓解结构(Pressure Mitigation Structure)^[2]是提高弹药在热作用下安全性能的技术途径之一, 美欧各国在 20 世纪开始压力缓解结构设计研究, 已成功应用于部分型号弹药^[3-5], 但此技术适用于新研弹药, 不适用于现役弹药。为弹药装备隔热弹衣可有效提升弹药安全性, 不改变现役弹药的固有属性, 且可延缓热刺激下弹药的反应时间, 为火灾应急处理赢得时间。

以美国、法国为首的发达国家在隔热弹衣研究方面起步较早, 其隔热弹衣设计技术已成功应用于部分型号弹药上。美国海军现役弹衣主要有 MIL-C-81904、FM26^[6], 其 MK80 系列炸弹、MK7Mod6 炸弹、通用炸弹 BLU111 系列均配备了隔热弹衣。在现有弹衣基础上, 美国正计划开发新型弹衣, 其材料要求能够在快烤环境下保护弹头, 且在热防护、价格、使用维护、抗冲击、户外贮存、抗盐雾、勤务运输等环境适应性方面均比原有弹衣更具优越性。法国 CBEMS 导弹装备了隔热弹衣, 其普通隔热弹衣效率比 FM26 低 15%, 国产隔热弹衣的隔热效率与 FM26 相同^[7]。国内对隔热弹衣的研究正处于起步阶段^[8-10], 相关研究鲜有公开报道。

本工作针对弹药在库内贮存时的隔热防护需求, 开展某隔热弹衣的热防护效应试验研究, 考核在火烧环境下隔热弹衣对装药反应状态的影响, 以期新型隔热弹衣的设计提供参考。

1 烤燃试验

1.1 试验原理与方法

试验采用火烧方式进行, 试验油池直径为 2.0 m, 试验时将产品支架放入油池中心, 并将试验件水平摆

^{*} 收稿日期: 2017-05-03; 修回日期: 2017-05-22

基金项目: 国家自然科学基金(11672278); 中国工程物理研究院安全弹药中心自主课题(RMC-2015-ZZ-SJ-B01)

作者简介: 王洪波(1986—), 硕士, 工程师, 主要从事常规武器研制研究. E-mail: 414wanghb@caep.cn

放在支架上,通过点燃煤油对试验件进行加热。通过热电偶测量火焰温度、隔热弹衣内侧温度、弹体壳体外表面温度等数据,结合视频录像和试验后试验件残骸情况,确定试验件装药反应时间及反应等级。

1.2 试验条件

试验加载条件参照美军标 MIL-STD-2105D^[6] 进行,通过油池火烧对试验件加热,要求火焰完全覆盖试验件外表面,火源点火后 30 s 内火焰温度达到 550 °C,保持火焰温度在 550~850 °C 之间,直至弹体装药反应结束。

1.3 试验件

试验件由隔热弹衣和装药弹体组成,如图 1 所示。隔热弹衣材料厚 8 mm,由多层材料复合而成。装药弹体由壳体、装药、压盖和螺纹压环组成,其中:装药采用某 RDX 炸药,壳体、螺纹压环及压盖材料均为 30CrMnSiA 合金钢,壳体厚 15 mm。试验件实物如图 2 所示。

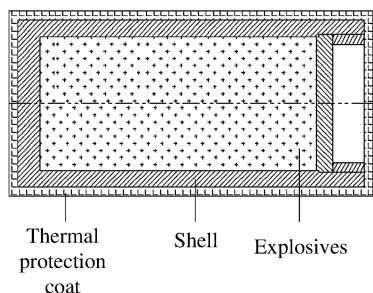


图 1 试验件结构简图
Fig. 1 Configuration of test sample

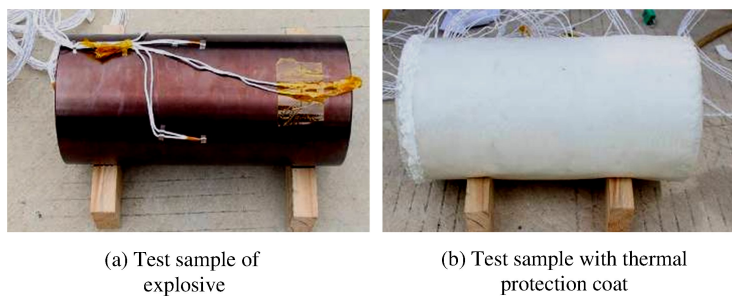


图 2 试验件照片
Fig. 2 Pictures of test sample

2 试验结果与分析

2.1 无隔热弹衣试验件快烤试验结果

无隔热弹衣试验件的摆放状态及其外侧火焰温度测点(Monitoring Point, MP)布置如图 3 所示,火焰温度监测点分布及火焰温度变化如图 4 所示。在前 20 s 内各点火焰温度基本呈线性上升,22 s 时各点火焰温度呈现波动状态。试验件在油池点火后 2.55 min 发生爆响,试验件从支架上飞出,与图 4(b)中监测点 3、4 的信号曲线急速下降,试验件发生反应从支架上飞出时刻相对应。

在整个火烧过程中,通过观察监控视频画面发现,出现了试验件头部暴露在火焰外的情况。由于油池尺寸、气象(风)及防护墙等因素,致使火焰并未完全覆盖试验件的两端,从而导致监测点 1 的火焰温度低于其他 3 点。

油火熄灭后试验件破坏情况如图 5 所示。压盖和螺纹压环崩落,且变形严重。火烧后壳体表面积炭严重,壳体柱壳段无明显变形,但壳体头部变形较严重,中心位置向外凸起,变形量约 16 mm。螺纹压环和压盖等部件虽有较大变形,但并未破碎形成破片,结合地面散落的大量残药,按照 MIL-STD-2105D、AOP-39(第 3 版)和 STANAG-4439(第 3 版)对弹药在快烤条件下装药反应等级划分标准的描述,装药弹体的反应等级可划分为爆燃反应^[2,6,11]。

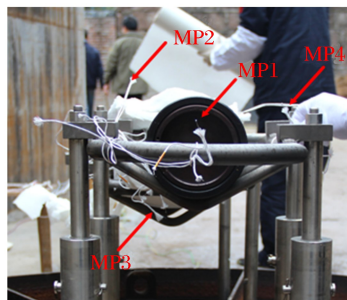


图 3 无隔热弹衣试验件摆放状态及其外侧火焰温度测点布置
Fig. 3 Placement of test sample without thermal protection coat and distribution of monitors

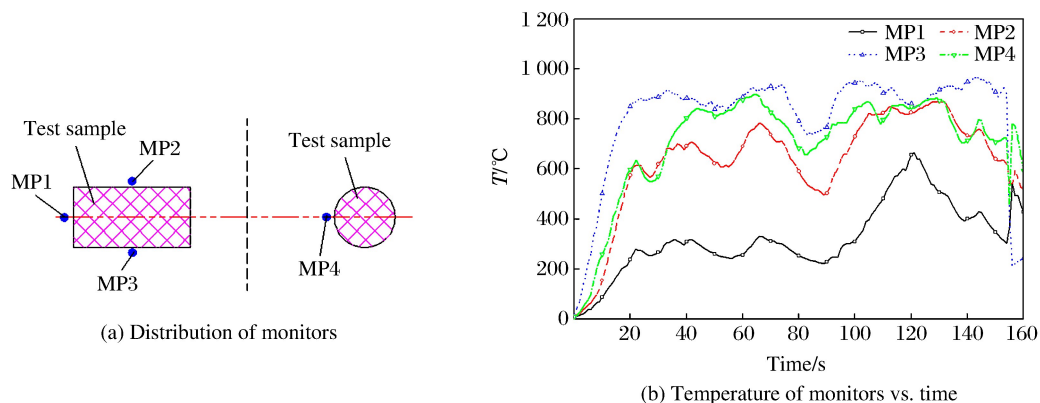


图 4 无隔热弹衣试验件外侧火焰温度监测点分布及其温度变化

Fig. 4 Distribution of monitors and their measured temperature of test sample vs. time without thermal protection coat



图 5 试验件破坏状态

Fig. 5 Damage state of test sample

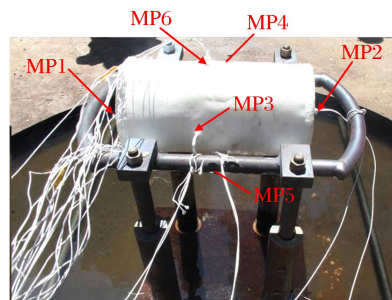
2.2 包覆隔热弹衣试验件快烤试验结果及分析

包覆隔热弹衣试验件的摆放状态及其外侧火焰温度监测点布置如图 6 所示,火焰温度监测点分布及其温度随时间的变化如图 7 所示。

试验件在油池中的火烧过程如图 8 所示。油池点火 30 s 后火焰基本稳定,整个火烧过程火焰较稳定;由于火场周围遮挡不闭合,受风的影响,存在火焰偏斜、试验件暴露在火焰之外的情况,但时间相对较短;油池点火后 34.67 min 试验件发生反应。由于隔热弹衣的热防护作用,试验件装药弹体的反应时间远大于无隔热弹衣包覆的情况。

隔热弹衣内表面(测点 9、10、11)、弹体外表面监测点(测点 12、13、14)分布及其温度变化如图 9 所示,温度随时间的变化取至试验件反应时刻。试验件头部的测点 9 与测点 12 的温度变化趋势较一致,整个火烧过程中,两测点温差逐渐减小,最后趋于一致,其主要原因是:隔热弹衣与弹体之间未紧密贴合,中间存在空气层,试验过程中,空气层起到隔热作用,随着火烧的进行,温度逐渐趋于平衡,温差逐渐减小,温度趋于一致。试验件中下部的测点 10 和测点 13 在火烧开始时存在较小温差,但很快两测点温度趋势一致,主要由于该处弹体直接压在隔热弹衣上,二者之间的空气较少。与此不同,尾部的测点 11 和测点 14 在整个火烧过程中温差均较大,且始终未趋于一致;由于尾部是隔热弹衣闭合处,测点 14 位于隔热弹衣端盖内层,与弹体测点 11 有较大空隙,空气层较厚,因此试验过程中温度未达到平衡。

包覆隔热弹衣的试验件上,同一位置由外而内各测点温度随时间的变化如图 10 所示。可见,试验件尾部火焰温度、隔热弹衣内表面、弹体外表面的温差较大,试验件反应时各测点温度分别为 879.6 °C、

图 6 包覆隔热弹衣试验件的摆放状态
Fig. 6 Placement of test sample with thermal protection coat

234.2 °C 和 231.7 °C。外侧火焰温度与隔热弹衣内侧温度温差达 645.4 °C。隔热弹衣内表面、弹体外表面的温差逐渐变小,由于隔热弹衣与弹体未紧密贴合,中间存在空气层,加热约 34 min 后,热传导处于平衡态,二者温差较小。

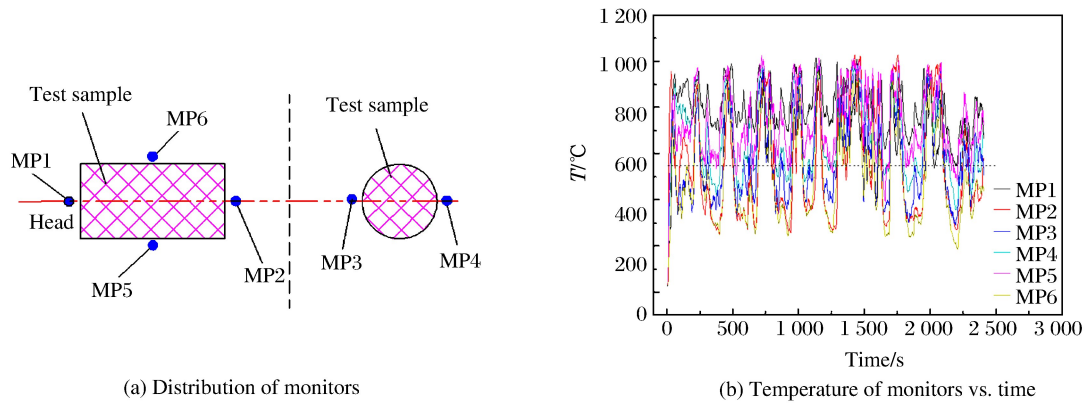


图7 包覆隔热弹衣试验件外侧火焰温度监测点分布及其温度变化

Fig. 7 Distribution of monitors and their measured temperature of flame vs. time with thermal protection coat

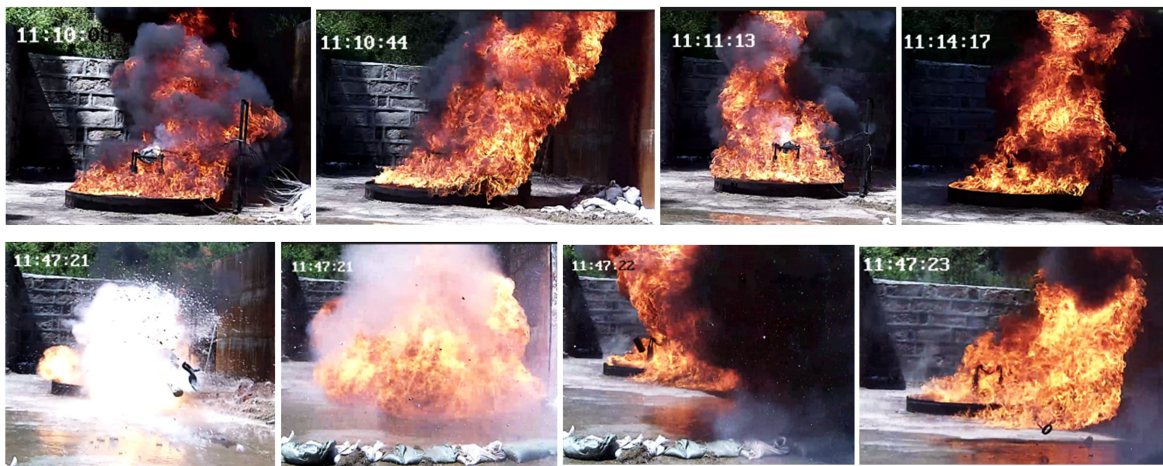


图8 试验件在油池中火烧过程序列图

Fig. 8 Fast cook-off state pictures of test sample with thermal protection coat in flame

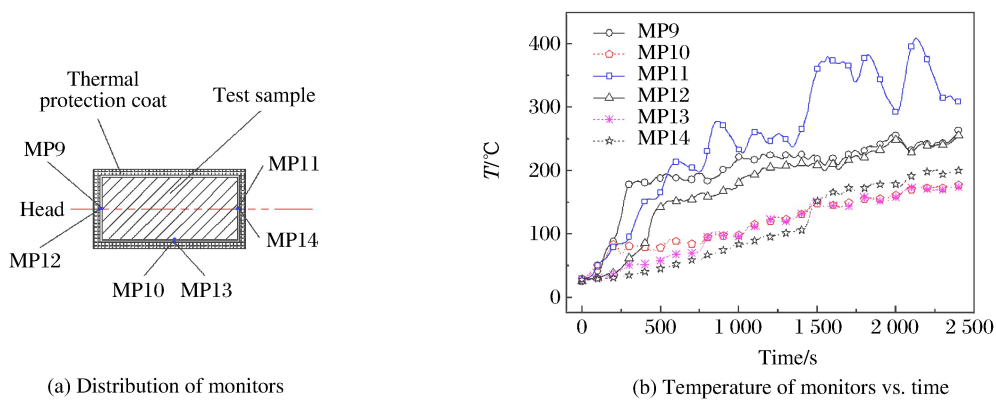


图9 隔热弹衣内表面、弹体外表面监测点分布及其温度变化

Fig. 9 Distribution of monitors and their measured temperature inside thermal protection coat varying with time

火烧结束后试验件的破坏情况如图 11 所示。从图 11 可见,火烧结束后隔热弹衣被炸破,装药弹体头部压盖和螺纹压环被冲出,其中螺纹压环变形明显,压盖未找到,弹体内底部有被烧蚀痕迹,并冲出部分残药。油池保持完整,支架前、后两端护栏脱落,效应靶上未出现破片着靶痕迹。综合试验件反应及破坏情况,结合残药和试验件的破坏情况,按照 MIL-STD-2105D、AOP-39(第 3 版)和 STANAG-4439(第 3 版)中对弹药在快烤条件下装药反应等级划分标准的描述,装药弹体的反应等级可划分为爆燃反应^[2,6,11]。

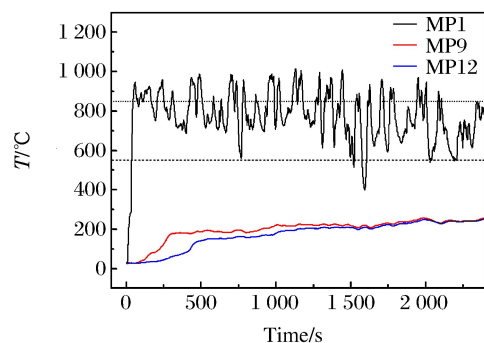


图 10 试验件尾部由外而内测点温度随时间的变化
Fig. 10 Temperature of monitors vs. time from outside to inside at the end of test sample



图 11 包覆隔热弹衣试验件破坏状态

Fig. 11 Damage state of test sample with thermal protection coat

无隔热弹衣装药试验件与包覆隔热弹衣装药试验件火烧后的反应等级均为爆燃,隔热弹衣对装药弹体的反应烈度无影响。但与无隔热弹衣装药试验件的快烤反应时间(2.55 min)相比,包覆隔热弹衣装药试验件的反应时间延迟至 34.67 min,有效延迟了装药热点火反应时间,可为救援处置赢取时间。由于火烧试验场地周围遮挡不闭合,导致火焰温度受风等自然环境的影响,使两发试验均存在火焰温度低于 550 °C 的情况,后续将通过改善试验条件,进一步深入研究隔热弹衣对弹体装药反应延迟时间的影响。

3 结 论

采用烤燃试验方法研究了隔热弹衣对装药弹体反应等级及反应延迟时间的影响。研究发现,无隔热弹衣装药试验件与包覆隔热弹衣装药试验件火烧后的反应烈度一致,反应等级均为爆燃,隔热弹衣对装药弹体的反应烈度无影响。与无隔热弹衣装药试验件快烤反应时间相比,隔热弹衣延迟弹体装药点火时间约 32 min,隔热弹衣热防护效果明显,有效延迟了装药热点火反应时间,可为救援处置赢取时间。利用空气间隙对装药弹体的热防护作用,在隔热弹衣与装药弹体之间预留一定的空气间隙,可增加隔热弹衣的热防护效果,延迟装药弹体的热点火时间。

参考文献:

- [1] 张蕊,冯长根,陈朗. 弹药的热烤(Cook-off)实验 [J]. 火工品, 2002(4): 37-39.
ZHANG R, FENG C G, CHEN L. Cook-off test of ammunition [J]. Initiators and Pyrotechnics, 2002(4): 37-39.
- [2] Guidance on the assessment and development of insensitive munitions (IM): AOP-39: Edition 3 [S]. Allied Ordnance Publication, 2010.
- [3] WALLS T. General purpose bomb fast cook-off mitigation techniques [C]//Insensitive Munitions & Energetic Materials Technology Symposium. Germany, Munich, 2010.
- [4] KELLEY S, CENTER A A, DIRECTORATE A. Venting techniques for penetrator warheads [C]//Insensitive

- Munitions & Energetic Materials Technology Symposium, Munich, Germany, 2010.
- [5] DELRIEU L, RÉGNAUT S, NOUGUEZ B. New French IM 500 lb bombs [C]//Insensitive Munitions & Energetic Materials Symposium, Munich, Germany, 2010.
- [6] Hazard assessment tests for non-nuclear munitions (AMSC N6037): MIL-STD-2105D [S]. 2011.
- [7] DELRIEU L, RÉGNAUT S, NOUGUEZ B. New French IM GP bombs development update [C]//Insensitive Munitions & Energetic Materials Symposium, 2012.
- [8] 钱立新, 梁斌, 牛公杰. 不敏感弹药安全要求及设计技术 [C]//2014年(第六届)含能材料与钝感弹药技术研讨会. 四川成都, 2014.
- QIAN L X, LIANG B, NIU G J. The requirements of insensitive munitions and design techniques [C]//Energetic Materials & Insensitive Munitions Symposium, Chengdu, Sichuan, 2014.
- [9] 梁斌, 钱立新, 牛公杰. 常规弹药热缓解技术研究初步分析 [C]//2014年(第六届)含能材料与钝感弹药技术研讨会. 四川成都, 2014.
- LIANG B, QIAN L X, NIU G J. Review of mitigation for pressure and thermal threats using devices [C]//Energetic Materials & Insensitive Munitions Symposium, Chengdu, Sichuan, 2014.
- [10] 牛公杰, 钱立新, 梁斌, 等. 端部具有压力缓解结构的弹体装药快烤试验研究 [C]//2016年(第七届)含能材料与钝感弹药技术研讨会. 海南海口, 2016.
- NIU G J, QIAN L X, LIANG B, et al. Experimental study on the fast cook-off of ammunition with pressure mitigation structure at head [C]//Energetic Materials & Insensitive Munitions Symposium, Haikou, Hainan, 2016.
- [11] Policy for introduction and assessment of insensitive munitions (IM): STANAG 4439; Edition 3 [S]. NATO Standardization Agency, 2010.

Influence of Thermal Protection Coat on the Reaction of Explosives in Projectile

WANG Hongbo¹, NIU Gongjie¹, QIAN Lixin¹, WEI Xueting¹,
LU Yonggang¹, LU Zhonghua², ZHANG Zhongli¹, ZHANG He³

(1. *Institute of System Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China;*

2. *Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China;*

3. *Inner-Mongolia Synthetic Chemical Research Institute, Hohhot 010010, China)*

Abstract: In this work, we researched the influence of a kind of thermal protection coat on the reaction of explosives in projectile by fast cook-off test. Based on the comparison of the reaction state of the test sample with and without the thermal protection coat, the results show that the thermal protection coat had little influence on the test sample's reaction intensity, and delayed the explosives' ignition reaction time by 32 min. The thermal protection coat can obviously win more time for the ammunition succor in fire accidents. Furthermore, the protective effect of the thermal protection coat is related with its own heat-conducting property and the airy space between the coat and the sample protected.

Keywords: explosive; thermal protection coat; cook-off test; reaction intensity



《高压物理学报》2018 年主题专刊名录

- ❖ 氢
- ❖ 高压物性实验研究
- ❖ 高压物性第一性原理计算
- ❖ 高压合成新材料
- ❖ 高压地球科学
- ❖ 静高压实验技术
- ❖ 动高压实验技术
- ❖ SHPB 实验技术
- ❖ 高压下材料和结构的力学性能和动态响应
- ❖ 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——破片
- ❖ 高压科学应用——爆燃及燃烧
- ❖ 高压科学应用——高压食品科学

★ 获取地址：<http://www.gywlxb.cn/topics>

2018 年“炸药起爆及安全性”主题专刊论文引用信息

- ☆ 余一,张蕾,姜胜利,等. TATB 在高温下分解的动力学模拟 [J]. 高压物理学报,2018,32(1):010106.
YU Y,ZHANG L,JIANG S L,et al. Decomposition of TATB at high temperature using *ab initio* molecular dynamics [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(1):010106.
- ☆ 宋云飞,郑朝阳,吴红琳,等. 桌面式激光驱动冲击波技术及其在含能材料分子反应机制研究中的应用 [J]. 高压物理学报,2018,32(1):010107.
SONG Y F,ZHENG Z Y,WU H L,et al. A desktop laser driven shock wave technique and its applications to molecular reaction mechanism of energetic materials [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(1):010107.
- ☆ 郭俊峰,曾庆轩,李明愉,等. HNS-IV 炸药的短脉冲冲击起爆判据 [J]. 高压物理学报,2018,32(2):025101.
GUO J F,ZENG Q X,LI M Y,et al. Short pulse shock initiation criteria for HNS-IV explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(2):025101.
- ☆ 段晓瑜,郭学永,聂建新,等. RDX 基含铝炸药三波点高度的数值模拟 [J]. 高压物理学报,2018,32(3):035101.
DUAN X Y,GUO X Y,NIE J X,et al. Numerical simulation of the three-wave point of RDX-based aluminized explosives [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(3):035101.
- ☆ 王明烨,韩志伟,李席,等. 铝粉粒径对温压炸药爆炸性能及热安定性的影响 [J]. 高压物理学报,2018,32(3):035201.
WANG M Y,HAN Z W,LI X,et al. Influence of aluminum particle size on explosion performance and thermal stability of thermobaric explosive [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(3):035201.
- ☆ 覃锦程,裴红波,李星翰,等. 弹黏塑性热点模型的冲击起爆临界条件 [J]. 高压物理学报,2018,32(3):035202.
QIN J C,PEI H B,LI X H,et al. Shock initiation thresholds of heterogeneous explosives with elastic-visco-plastic hot spot model [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(3):035202.
- ☆ 李广嘉,周涛,曹玉武,等. 带舱大型战斗部跌落响应数值分析 [J]. 高压物理学报,2018,32(4):045106.
LI G J,ZHOU T,CAO Y W,et al. Numerical analysis of falling response of large warhead in cabin [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(4):045106.
- ☆ 王洪波,牛公杰,钱立新,等. 一种隔热弹衣对弹体装药反应的影响 [J]. 高压物理学报,2018,32(4):045201.
WANG H B,NIU G J,QIAN L C,et al. Influence of thermal protection coat on the reaction of explosives in projectile [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,2018,32(4):045201.

征 稿 简 则

《高压物理学报》是我国高压物理领域唯一的专业性学术刊物。征稿内容包括：动态及静态高压技术，人工合成新材料，高温高压下材料的力、热、光、电、磁等特性以及物质微观结构的研究，动态及静态高压研究中的测试技术，高温高压下的相变，高温高压物态方程，高压地学，材料动态断裂，冲击和爆轰现象等。《高压物理学报》接受中、英文稿件。

自1987年创刊以来，《高压物理学报》取得了较大成就。2001年，《高压物理学报》被科技部和新闻出版总署评为“中国期刊方阵”双效期刊。国际主要检索系统Scopus、JSTChina、CA长期收录《高压物理学报》发表的文章。由北京高校图书馆期刊工作研究会和北京大学图书馆编著的《中文核心期刊要目总览》连续七版把《高压物理学报》列为物理学类核心期刊。

《高压物理学报》一贯秉承服务科学、服务读者、服务作者的办刊理念，慎重对待每一篇来稿，尊重作者劳动。优秀稿件享有快速发表通道，重大创新性成果可在1个月甚至更短时间内刊出。欢迎广大专家学者向《高压物理学报》投稿！



官方网站：www.gywlxb.cn

官方邮箱：gaoya@caep.cn

联系电话：0816-2490042