高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS
DOI：10.11858/gywlxb.20251175

含胶低密度炸药的爆轰性能及状态方程研究*

刘坤[1]，唐久棚[1,2]，王强[1]

（1. 中国工程物理研究院流体物理研究所，四川 绵阳，621999；
2. 冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室，四川 绵阳，621999）

摘　要：针对 PBX-9502 粉末和 502 胶按一定比例混合的低密度炸药，基于 BKW 程序，采用理论分析方法，对其爆轰性能和状态方程进行了研究。采用基团贡献法，计算了 Kel-F（PBX-9502 黏结剂）和氰基丙烯酸乙酯（502 胶主要成份）生成热，确定了 18 种含 F、Cl 元素产物气体的标准熵温度系数和余容，在 BKW 程序框架下对 5 种配比、4 种密度状态给出了爆轰产物的 CJ 爆速和爆压，并根据计算所得 CJ 等熵线拟合出相应的 JWL 状态方程参数。结果表明，爆速、爆压与初始密度正相关，而与 502 胶含量负相关。所得 JWL 状态方程参数可供通用爆轰计算软件使用，以实现装置爆轰性能评估，为实际应用中 502 胶配比和混合装药密度选择提供了理论依据，相关方法也可直接推广拓展至其他配方炸药(硫、铝)的爆轰参数研究中，具有重要的工程应用价值。

关键词：混合炸药；BKW；爆轰参数；JWL 状态方程

中图分类号：O521.2；O381　　**文献标识码：**A

PBX-9502 是以 TATB 为基的钝感炸药，因其高能低感等优良特性通常作为主装药被广泛应用于各种武器弹药当中。然而，大尺寸装药在存储搬运等过程中可能存在因操作不当导致装药局部发生崩落情形，当崩落体积不大时，为保证装药几何完整性和起爆传爆过程的可靠性，需要进行现场补药修复。其中一种可行的处理措施是以 PBX-9502 粉末和 502 胶水按特定比例混合并填入崩落区域。通常补药区域的炸药密度较低，其爆轰性能与原装药可能存在较大差异。基于实验直接开展补药后的炸药爆轰性能研究其成本过于高昂，较为经济的做法是基于数值模拟方法进行定量评估。获得补药所得低密度炸药的爆速、爆压及产物状态方程等参数是数值模拟的关键。然而，现场补药的制备量较小，且混合物状态无法精确控制，难以采用传统基础爆轰实验研究混合物的爆轰参数。对此，本文采用理论分析的方法开展相关研究。

目前，针对给定配方的炸药，采用理论分析方法进行爆轰性能快速评估的常用工具包括 BKW[1]、CHEQ[2]、CHEETAH[3]等，都是利用了化学反应达到平衡时系统自由能最小的基本原理，并在该条件下进一步确定出产物中各组分的摩尔分数、熵、内能等热力学量。这些代码在预测炸药爆轰性能等方面取得了巨大成功[4-6]，有力推动了爆轰物理相关理论与技术的发展。其中 BKW 程序由于其开源性，长期以来受到了持续的关注和发展，许多研究人员通过大量测试改进了模型参数[7,8]和产物气体余容[9]，使 BKW 程序对炸药爆轰性能的预测精度得到了极大改善。

然而由于 BKW 代码形成时间较早，产物气体数量最多仅为 12 种，且主要针对 CHNO 类炸药，其应用范围受到一定限制。本文结合 PBX-9502 和 502 胶混合炸药特点，对 BKW 程序进行了拓展，主要包括三个方面工作：1）扩展含氟/氯小分子产物数据库（新增 18 种气体）；2）采用基团贡献法估算 Kel-F 黏结剂和 502 胶水的生成焓；3）基于最速下降算法确定含 F、Cl 元素产物气体的余容。基于改进的 BKW 程序通过计算获得了成份配比、初始密度对 PBX-9502 和 502 胶混合炸药的爆速、爆压影响规律，并基于理论等熵线通过拟合给出了 JWL 形式产物状态方程参数，为含

*收稿日期：2025-08-28；修回日期：2025-11-17
基金项目：冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室基金（2023JCJQLB05407）
作者简介：刘　坤（1979－ ），男，博士，副研究员，主要从事冲击波与爆轰物理研究. E-mail：lkm@mail.ustc.edu.cn
通讯作者：王　强（1975－ ），男，学士，副研究员，主要从事爆轰物理与可靠性研究. E-mail：wangqiang@caep.cn

F、Cl 元素混合炸药爆轰性能快速预报提供了一种相对合理的技术手段，所建立的方法可进一步推广应用于包含其他元素(硫、铝等) 含能材料的爆轰性能研究。

1 计算方法

针对不同比例混合的 PBX-9502 粉末和 502 胶水，采用 BKW 程序研究其产物爆轰参数。BKW 程序是由 Mader 等人针对 CHNO 类炸药产物状态方程理论研究于上世纪 50~60 年代所开发的分析代码，是在已知炸药成分、密度、生成热等少量信息的前提下估算其 CJ 爆速、CJ 爆压以及 CJ 等熵线的重要工具，至今在炸药爆轰性能预估等方面仍发挥着重要作用。其基本方法是假定混合气体产物满足 BKW 状态方程，根据特定压力、温度下产物平衡时系统自由能最小原理确定出产物中各组分摩尔数，并由此确定出熵、内能等其他热力学量，HOM 即是以 BKW 程序计算所得产物等熵线为参考线的 Gruneisen 形式状态方程。图 1 为 BKW 程序确定爆轰产物 CJ 爆轰参数及 CJ 等熵线的基本流程。

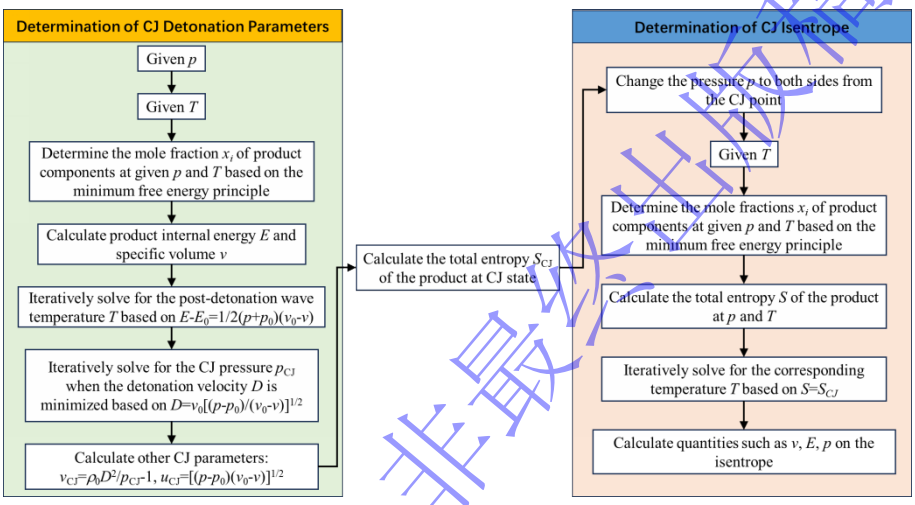


图 1 BKW 程序 CJ 状态及 CJ 等熵线的 BKW 程序计算流程图

Fig. 1 CJ state and CJ isentropic line flowchart of BKW program.

对处于高温高压状态爆轰产物混合气体，在维里方程一阶近似下可采用 BKW 状态方程进行描述

$$\begin{cases} \dfrac{PV}{RT}=1+xe^{\beta x} \\ x=\kappa\sum\limits_i \dfrac{x_i}{\overline{x}}\dfrac{k_i}{V(T+\theta)\alpha} \\ \overline{x}=\sum\limits_i x_i \end{cases} \tag{1}$$

其中P、T、V为产物气体压力、温度和体积，R为理想气体常数，x_i、k_i为i组分气体的摩尔数及余容，α、β、θ、κ为模型经验参数，其取值与炸药类型相关[7-9]（表1）。

表1 BKW状态方程模型参数

Table 1 Parameters of BKW equation of state

Explosives	α	β	θ	κ
Nitramines	0.5	0.16	400	10.90978
Nitroaromatics	0.5	0.09585	400	12.685
Triazoles	0.5	0.18	1850	11.800

对于固体产物，本文采用 Cowan-Fickett 状态方程进行描述

$$\begin{cases} P = P_1(V_S) + a(V_S)T_V + b(V_S)T_V^2 \\ P_1(V_S) = A_S + \dfrac{B_S}{V_S} + \dfrac{C_S}{V_S^2} + \dfrac{D_S}{V_S^3} + \dfrac{E_S}{V_S^4} \\ a(V_S) = A_1 + \dfrac{A_2}{V_S} \\ b(V_S) = C_1 + C_2 V_S + C_3 V_S^2 \\ V_S = \dfrac{\rho_0}{\rho} \\ T_V = \dfrac{T}{R} \end{cases} \tag{2}$$

其中A_S、B_S、C_S、D_S、E_S、A_1、A_2、C_1、C_2、C_3为模型参数，ρ_0为初始密度。

对任意产物，BKW 假定其标准熵是温度的多项式函数

$$S^{\Theta}(T) = \sum_{n=0}^{3} A_n T^n \tag{3}$$

再利用热力学关系数

$$\begin{aligned} dH &= TdS + Vdp \\ dG &= -SdT + Vdp \end{aligned} \tag{4}$$

结合(1)、(2)即可求出任意压力、温度状态下的其他热力学量。

本研究所考察的炸药涉及了 F、Cl 等其他元素，而原 BKW 程序未提供包含这些元素的产物相关参数，且产物种类数目相对有限(最多 25 种)，对此我们对 BKW 程序进行了改进完善，主要工作包括模块化程序重新设计、产物组分类型的自由添加和动态分配、含卤素元素小分子气体标准熵温度系数确定及其余容计算等，相关结果在第 2 节中依次介绍。

2 结果与讨论

2.1 PBX-9502 粉末与 502 胶混合炸药

PBX-9502 炸药包含 95%TATB($C_6H_6N_6O_6$)和 5%的 Kel-F 800($(C_2H_2F_2)_m(C_2F_3Cl)_n$)，502 胶主要成分为氰基丙烯酸乙酯($C_6H_7NO_2$)，二者在不同质量比下的 1mol 混合炸药对应的元素计量及生成热见表 2 所示，其中生成热由各组分生成热的摩尔加权给出

$$\Delta H_f^{\Theta} = \sum\nolimits_i \Delta H_{f,i}^{\Theta} \tag{5}$$

目前，只有 TATB 可通过文献[10,11]查得其生成热为 139.8kJ/mol，对 Kel-F 800 和氰基丙烯酸乙酯，本文通过基团贡献法[12]进行估算（见表 3），其生成热分别为-2174.0kJ/mol 和-284.0kJ/mol。需要说明的是，在开放环境下，氰基丙烯酸乙酯受空气中水和阴离子作用而发生聚合反应，因此 C=C 双键变为一个四价>C<基团和一个-CH_2-基团。

表 2 PBX-9502 粉末与 502 胶不同质量比下的元素计量与生成热

Table 2 Molecular formula and heat of formation of PBX-9502 powder and 502 adhesive at different mass ratios

序号	PBX-9502 wt%	502 wt%	元素计量 C	H	N	O	F	Cl	分子量	$\Delta H\Theta f$(298K) kJ/mol
1	100	0	6.0636	5.8727	5.8091	5.8091	0.3500	0.0955	263.1088	-204.5262
2	90	10	6.0516	6.0862	4.8983	5.0877	0.2837	0.0774	236.9762	-219.5778
3	80	20	6.0417	6.2611	4.1521	4.4966	0.2294	0.0626	215.5657	-231.9095
4	70	30	6.0335	6.4071	3.5295	4.0035	0.1841	0.0502	197.7035	-242.1976

5	60	40	6.0265	6.5307	3.0023	3.5859	0.1457	0.0397	182.5749	-250.9112
6	50	50	6.0205	6.6367	2.5499	3.2276	0.1128	0.0308	169.5971	-258.3860

表 3 Kel-F 800 和氰基丙烯酸乙酯生成热的基团贡献

Table 3 The group contribution for heat of formation of Kel-F 800 and ethyl cyanoacrylate

基团	Kel-F	聚氰基丙烯酸乙酯	$\Delta H\Theta f$(298K) kJ/mol
-CH_3	0	1	-46.0
-CH_2-	1	2	-22.0
>C<	7	1	20.0
-COO-	0	1	-337.0
-CN	0	1	123.0
-F	11	0	-195.0
-Cl	3	0	-49.0

2.2 产物成分及其标准熵

炸药在温度、压力等外载作用下，化学键发生断裂重组，反应向 Gibbs 自由能减小方向进行。对 CHNO 类炸药，爆轰反应后其产物主要包含 11 种气体产物(H_2O、H_2、O_2、NH_3、H、OH、CH_4、N_2、NO、CO、CO_2)和 1 种固体产物(金刚石 C)。BKW 程序在其计算框架下，提供了这些产物的生成热、余容和标准熵温度多项式系数等数据。因此，对 PBX-9502 和 502 胶混合而成的炸药，为采用 BKW 程序开展产物成分分析，也需给出包含 F、Cl 元素的相关产物参数。首先假定含 F、Cl 的气体成分有 F_2、Cl_2、HF、HCl、CH_3F、CH_2F_2、CHF_3、CF_4、CH_3Cl、CH_2Cl_2、$CHCl_3$、CCl_4、CH_2FCl、CHF_2Cl、$CHFCl_2$、CF_3Cl、CF_2Cl_2、$CFCl_3$ 等 18 种，其 298.15K 温度下标准生成热通过查表[13]给出，对文献未提供数据的气体，采用基团贡献法估算其生成热。在不考虑相变情况下，产物标准熵 S^{Θ}可通过对等压热容 C_p^{Θ}积分得到

$$S^{\Theta}(T)-S^{\Theta}(298.15)=\int_{298.15}^{T}C_p^{\Theta}d\ln T \tag{6}$$

在化工热力学中，通常采用光谱数据按统计力学方法计算给出等压热容，在一定温度范围内等压热容可表示成关于温度的多项式，对上述含卤元素产物气体，相关系数可通过查表给出[14]。需要说明的是，文献[14]给出的等压热容温度系数适用范围为 200K-1500K，对 300K-3000K 的爆轰问题来说，其温度适用范围相对有限，对此，我们在 1500K-3000K 的高温段采用线性外插方式确定热容取值。将热容-温度关系代入(6)积分则得到不同温度下气体的标准熵，对所得温度-标准熵数据按(3)式拟合进而得到标准熵多项式相关系数(表 4)，其中 S^{Θ}(298.15)数据来自文献[13]。不同产物气体基于热容积分的标准熵曲线(实线)及其拟合曲线(虚线)对比见图 2 所示，为验证文献[14]数据的合理性，图中针对 CH_4 比较了 BKW 温度多项式系数的熵曲线和基于热容积分的熵曲线，由图可见，二者基本重合。总体看，文献[14]提供的热容数据在相应温度范围内是合理可信的。

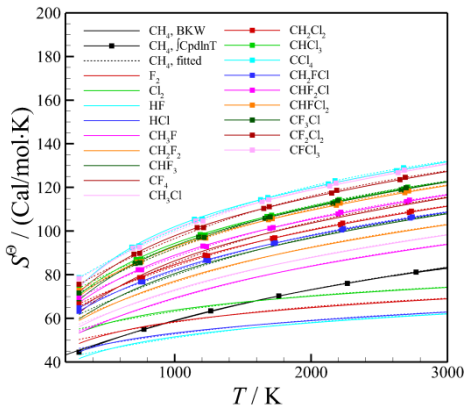


图 2 含卤元素气体产物的标准熵-温度曲线

Fig. 2 Standard entropy versus temperature curves of gases containing halogen elements

表 4 含卤元素产物气体标准熵温度系数

Table 4 Temperature polynomial coefficients of standard entropy for gases containing halogen elements

序号	产物	A_0	A_1	A_2	A_3
		10Cal/mol·K	10^{-2}Cal/mol·K^2	10^{-6}Cal/mol·K^3	10^{-10}Cal/mol·K^4
1	F_2	4.5895947	1.5239084	-3.4420800	3.1408853
2	Cl_2	5.0790072	1.5686744	-3.6042726	3.2983422
3	HF	3.8962741	1.5238711	-3.4419025	3.1407002
4	HCl	4.2698334	1.2655038	-2.7121359	2.4932621
5	CH_3F	4.6586041	2.7088190	-5.0243864	4.2418904
6	CH_2F_2	5.1875699	3.0081808	-5.8546209	5.0746620
7	CHF_3	5.2287419	3.3759011	-6.8787447	6.1374869
8	CF_4	5.4846714	3.7709613	-7.9997584	7.2884863
9	CH_3Cl	4.9465319	2.7946576	-5.2326588	4.5270241
10	CH_2Cl_2	5.7698867	3.2011426	-6.3973312	5.7162252
11	$CHCl_3$	6.3559285	3.6841248	-7.8332402	7.1575375
12	CCl_4	6.6816040	4.2345483	-9.5069737	8.8223510
13	CH_2FCl	5.6210788	3.1086819	-6.1318227	5.4080846
14	CHF_2Cl	5.9817031	3.4759334	-7.1885352	6.4610062
15	$CHFCl_2$	6.2843638	3.5940764	-7.5614754	6.8635546
16	CF_3Cl	6.0755674	3.8975207	-8.4038753	7.7033670
17	CF_2Cl_2	6.4417320	4.0123906	-8.7721643	8.0801168
18	$CFCl_3$	6.6716047	4.1273468	-9.1483692	8.4592548

2.3 产物气体余容

采用 BKW 状态方程计算产物混合气体热力学状态，还需事先确定各产物气体的余容 k。传统做法是针对不同炸药，通过 BKW 程序计算其 CJ 爆速和 CJ 爆压，不断调整产物气体余容取值，使计算结果与实验测试结果满足收敛条件[9,15]。但由于含 F、Cl 元素的炸药相对较少，本文通过对比 3 种不同密度 PBX-9502 炸药的爆轰参数[16]来确定含 F、Cl 元素产物气体余容，其本质上可看作一个使 BKW 计算所得爆轰参数与文献参考数据误差最小的最优化问题。本文采用最速下降法依次修正每种产物的余容，具体来说，首先采用 BKW 程序计算出总误差 E 对初始余容的变化率，根据公式

$$k_i^{n+1} = k_i^n - x_i \frac{dk}{dE} E \tag{7}$$

进行迭代，其中 x_i 为 BKW 计算给出的产物气体摩尔数，作为迭代步长因子用于反映物质占比对余容变化的影响，总误差 E 定义为对 3 种密度 PBX-9502 炸药计算所得 CJ 爆轰参数(爆速、爆压)与参考 CJ 爆轰参数差值的平方和，爆速、爆压单位分别取 cm/μs 和 GPa，此时二者有相同的数量级。迭代中，参考 CHNO 产物气体余容，限定 F、Cl 产物余容在 100~2000 之间取值。产物余容取值大小会影响平衡状态下产物成分的摩尔数，而对摩尔数很小的产物成分，余容取值对爆轰参数影响也相对较小。计算时，依次固定收敛后占比较多的气体余容，逐渐减少未知余容。经多轮迭代，得到各种含 F、Cl 元素产物气体的余容，见表 5。在该套余容取值下，BKW 程序对不同密度 PBX-9502 爆轰参数与文献结果偏差在 0.22%以内(表 6)。

表 5 含 F、Cl 元素主要产物气体余容

Table 5 Covolumes of gases containing halogen elements

序号	产物气体	余容	序号	产物气体	余容

1	F_2	243.31	10	CH_2Cl_2	346.62
2	Cl_2	301.69	11	$CHCl_3$	410.37
3	HF	283.89	12	CCl_4	443.86
4	HCl	254.42	13	CH_2FCl	545.36
5	CH_3F	506.25	14	CHF_2Cl	694.77
6	CH_2F_2	602.89	15	$CHFCl_2$	693.11
7	CHF_3	839.15	16	CF_3Cl	830.56
8	CF_4	952.70	17	CF_2Cl_2	763.72
9	CH_3Cl	351.62	18	$CFCl_3$	853.15

表 6 不同密度 PBX9502 爆轰参数的 BKW 计算结果与文献数据对比

Table 6 Comparison of BKW calculation results and literature data for detonation parameters of PBX9502 with different densities

ρ / (g/cm³)	D_{CJ} / (km/s)			p_{CJ} / GPa		
	文献[16]	BKW	相对误差 %	文献[16]	BKW	相对误差 %
1.8686	7.706	7.6921	-0.18	27.36	27.3573	-0.01
1.8940	7.782	7.7750	-0.09	28.22	28.1577	-0.22
1.9152	7.838	7.8453	0.09	28.90	28.8470	-0.18

为检验表 5 中气体余容结果，进一步采用 BKW 程序计算了 TNT 和某 TATB 基炸药(其黏结剂中 $C_2H_2F_2$ 和 C_2F_3Cl 的比例与 Kel-F 800 有所不同)的 CJ 爆轰参数，其爆速和爆压与文献结果基本一致(表 7)，表明本文所确定的含卤元素气体余容具有一定的合理性，可用于以氟橡胶为黏结剂的炸药爆轰性能评估。

表 7 爆轰参数的 BKW 计算结果与文献数据对比

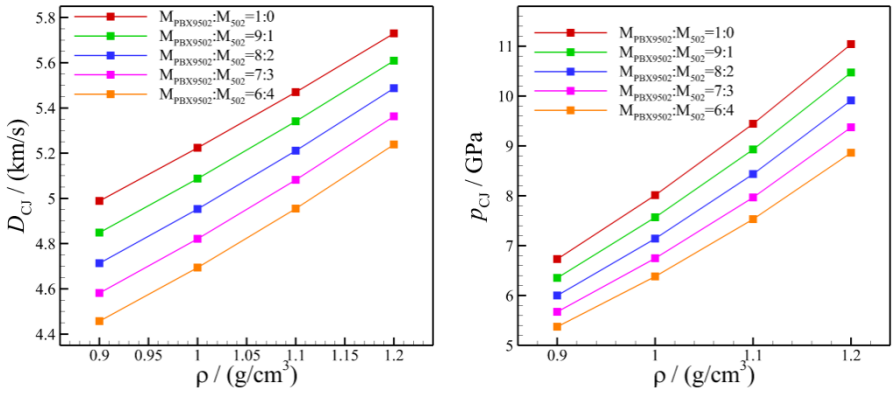
Table 7 Comparison of BKW calculation results and literature data for detonation parameters of TATB-based explosive and TNT

炸药	密度 / (g/cm3)	D_{CJ} / (km/s)			p_{CJ} / GPa		
		文献	BKW	相对误差 %	文献	BKW	相对误差 %
TNT	1.63	6.928[10]	6.8591	-0.99	19.1[10]	19.3562	1.34
TATB 基炸药	1.888	7.673[17]	7.7482	0.98	28.0[17]	28.0563	0.20

2.4 PBX-9502 与 502 胶混合炸药的 CJ 爆轰参数

采用表 1 芳烃类炸药 BKW 状态方程模型参数、表 2 混合炸药等效分子式和生成热、表 4 标准熵温度系数和表 5 产物气体余容，基于 BKW 程序对不同配比、不同密度的 PBX-9502 和 502 胶混合炸药进行计算，得到了相应的 CJ 爆速和 CJ 爆压，见图 3 所示。由图可见，随装药密度增加，502 胶占比减少，混合炸药 CJ 爆速和 CJ 爆压都相应增加。不同 502 胶占比下，爆速随密度的变化率基本相同，而爆压随密度的变化率随 502 胶占比增加而略有增加，总体上其爆速、爆压远低于常规装药密度下的爆速和爆压。

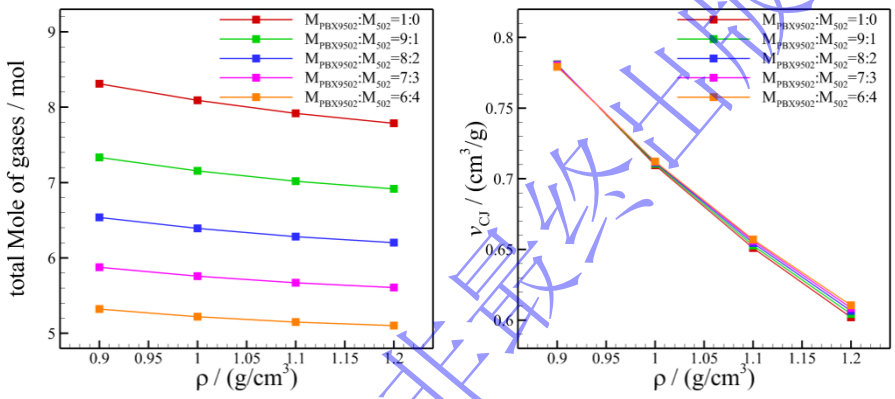
实际上，对相同的炸药密度，随着 502 胶占比增加，其负氧程度增大(表 2)，产物中固态 C 产额增加，而气体产额显著减少(图 4a)，从而导致产物的爆压下降，由 CJ 爆轰关系，其爆速也相应下降。另一方面，尽管密度增加导致气体产物总摩尔数下降，但也会使 CJ 比容下降(图 4b)，总体效果上看，由比容减小导致的压力增加占主导地位，在抵消气体摩尔数减少效应基础上仍使得 CJ 压力增大。



(a) CJ detonation velocity (b) CJ pressure

图 3 密度对不同配比 PBX9502 和 502 胶混合炸药的 CJ 爆速和爆压的影响

Fig. 3 The effect of density on the CJ detonation velocity and pressure of PBX9502 and 502 adhesive mixed explosives with different ratios



a) total Mole of gases b) CJ specific volume

图 4 密度对不同配比 PBX-9502 和 502 胶混合炸药 CJ 状态气体产物摩尔数和比容的影响

Fig. 4 The effect of density on the molar number and specific volume of gas products in the CJ state of PBX-9502 and 502 gel mixed explosives with different ratios

2.5 特定配比混合炸药产物 JWL 状态方程

为方便使用通用爆轰流体动力学计算软件对低密度 PBX-9502 和 502 胶混合炸药的爆轰性能进行定量评估，还需要确定其 JWL 状态方程参数。JWL 状态方程等熵参考线为

$$p = Ae^{-R_1 v_r} + Be^{-R_2 v_r} + Cv_r^{-(\omega+1)} \tag{8}$$

其中 v_r=v/v_0，A、B、C、R_1、R_2、ω为模型参数。实际上，若将 BKW 程序计算所得过 CJ 点的 p-v 等熵线按公式(8)采用非线性最小二乘法进行拟合即可得到相关参数。表 8 为 PBX-9502 与 502 胶按 7:3 比例混合、密度在 0.9~1.2 g/cm^3 范围内的炸药相关拟合结果，相应的理论等熵线与 JWL 拟合等熵线对比见图 5 所示，二者在较大相对比容范围内符合较好。其他配比和密度下的产物 JWL 状态方程参数确定方法是完全相同的，这里不再赘述。

表 8 典型低密度炸药产物 JWL 状态方程参数

Table 8 Parameters of JWL equation of state for product of typical low-density explosive

ρ g/cm^3	A GPa	B GPa	C GPa	R_1	R_2	ω
0.9	1828.260	54.243	2.414	14.24586	6.00797	0.91511
1.0	1859.854	55.895	2.785	12.86775	5.43208	0.91533
1.1	1919.808	60.710	3.172	11.82496	5.03780	0.91973
1.2	1947.197	65.817	3.571	10.92865	4.71671	0.92696

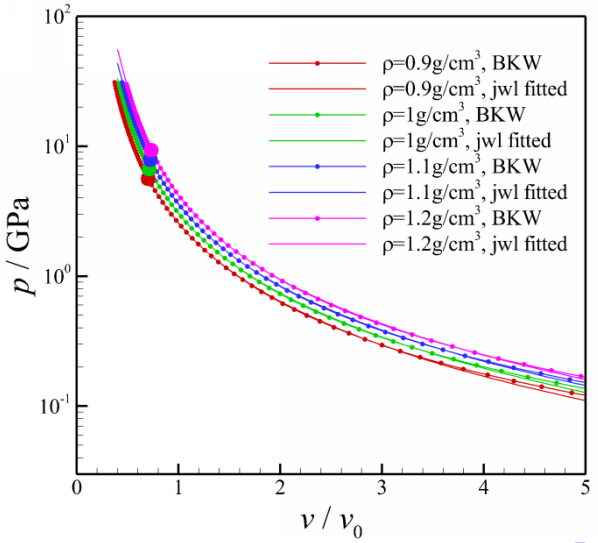


图 5 BKW 计算所得 CJ 等熵线及 JWL 拟合等熵线

Fig. 5 CJ isentropic lines calculated by BKW and fitted with JWL equation

3 结 论

本研究工作对经典 BKW 状态方程程序进行了框架改进与功能扩展，为含胶低密度炸药的爆轰性能与产物状态方程量化提供了新的方法工具。主要创新点体现在以下方面：（1）推导出含 F、Cl 小分子气体的标准熵温度关联方程，建立覆盖爆轰反应温度区间的热力学参数计算模型。针对高温区间的热力学行为，提出基于文献数据的线性外推修正策略，初步实现宽域温度条件下产物熵值计算；（2）基于 PBX-9502 炸药在三种典型密度下的爆轰实验数据，构建新型余容计算模型。该模型通过多维参数拟合技术，有效解决了含卤素气体产物的余容参数标定难题，为复杂组分炸药的产物状态方程量化提供模型支撑；（3）改进后的 BKW 程序成功应用于 PBX-9502/502 胶粘剂混合体系（4 种低密度配方）的爆轰特性预测。通过系统计算获得 CJ 爆速、爆压等关键参数，实现含黏结剂混合炸药的 JWL 状态方程参数量化。所建立的预测模型可扩展至含多元组分炸药的爆轰特性分析和工程补药爆轰性能的快速估算。

参考文献

[1] C. L. Mader. Fortran BKW: A code for computing the detonation properties of explosives: LA-3704 [R]. LANL, 1967.

[2] F. H. Ree. A statistical mechanical theory of chemically reacting multiphase mixtures: Application to the detonation properties of PETN [J]. J. Chem. Phys.1984, 83(3): 1251-1263.

[3] L. E. Fried. CHEETAH: A fast thermochemical code for detonation: UCRL-ID-115752 [R]. LLNL, 1993.

[4] M. Vaullerin, A. Espagnacq. Reparametrization of the BKW equation of state for the Triazoles and comparison of the detonation properties of HMX, TNMA and NTO by means of Ab-Initio and semiempirical calculations [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 199, 823: 73-76.

[5] Dongwei Li, Lin Zhou, Xiangrong Zhang. Partial reparametrization of the BKW equation of state for DNAN-based melt-cast explosives [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics,2017, 42: 499-505.

[6] 赵艳红, 张巨木, 张其黎等. HMX 炸药爆轰产物物态方程研究[J]. 计算物理, 2017, 34(2): 155-159.
ZHAO H Y, ZHANG J M, ZHANG Q L, et al. Equation of state of detonation products for HMX explosive. Computational Physics, 2017, 34(2): 155-159.

[7] M. Vaullerin, A. Espagnacq. Reparametrization of the BKW equation of state for the Triazoles and comparison of the detonation properties of HMX, TNMA and NTO by means of ab-Initio and semiempirical calculations [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 1998, 23: 73-76.

[8] N. V. Kozyrev, Reparametrization of the BKW equation of state for CHNO explosives which release no condensed carbon upon detonation [J]. Cent. Eur. J. Energ. Mater. 2015, 12, 651–70.

[9] M. Suceska, H. Y. S. Chan, B. Stimac, et al. BKW EOS: History of modifications and further improvement of accuracy with temperature-dependent covolumes of polar molecules [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2023, 48: e202100278.

[10] 董海山. 炸药及相关物性能[M]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2005.

[11] 黄整, 陈波, 刘福生. TATB 生成焓的量子力学计算[J]. 原子与分子物理学报, 2004, 21(3): 499-504.
HUANG Z, CHEN B, LIU F S. Quantum mechanical calculation of the enthalpy of formation for TATB [J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2004, 21(3): 499-504.

[12] D. W. 范克雷维伦. 聚合物的性质,性质的估算及其与化学结构的关系[M]. 许元泽, 赵锡禄, 吴大成, 译. 北京: 科学出版社, 1981.

[13] 刘天和. NBS 化学热力学性质表,SI 的单位表示的无机物质和 C1 与 C2 有机物质选择值[M]. 北京: 中国标准出版社, 1998.

[14] 马沛生, 高铭书, 江碧云等. 新近理想气体热容数据与温度的关联[M]. 化工学报, 1979, 2: 109-132.

[15] C. L. Mader. Detonation properties of condensed explosives computed using the Becker-Kistiakowsky-Wilson equation of state: LA-2900 [R]. Los Alamos, LASL, 1963.

[16] R. Menikoff. SURFplus model calibration for PBX 9502: LA-UR-17-31015 [R]. Los Alamos, LANL, 2017.

[17] Heng Yu, Xin Yu, Kuibang Huang, et al. Numerical study of density effect on JB-9014 equation of state of detonation product. 46th International Annual Conference of Fraunholfer, ICT, 2015.

Detonation Performance and Equation of State of Low Density Explosive Mixed by PBX-9502 Powder and 502 Glue

LIU Kun[1], TANG Jiupeng[1, 2], WANG Qiang[1]

(*1. Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, Sichuan, China;*
2. State Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Mianyang 621999, Sichuan, China)

Abstract: This study focuses on the detonation performance and equation of state (EoS) of a low-density composite explosive mixed in a certain proportion of PBX-9502 powder and 502 glue. The theoretical analysis method was used based on the BKW program. The main work includes calculating the heat of formation of Kel-F (PBX-9502 binder) and ethyl cyanoacrylate (main component of 502 glue) using the group contribution method, determining the standard entropy temperature coefficient and excess volume of 18 product gases containing F and Cl elements, Within the BKW program framework, the CJ detonation velocity and pressure were determined for five mixing ratios and four density states. The corresponding JWL EoS parameters are fitted based on the calculated CJ isentropic line. The results show that the detonation velocity and pressure are positively correlated with initial density, but negatively correlated with the content of 502 glue. The relevant results provide a theoretical basis for the selection of 502 glue ratio and mixed charge density in practical applications. The obtained JWL EoS parameters can also be used by general detonation calculation software to evaluate the detonation performance of devices. The relevant method can also be directly extended to the study of detonation parameters of other formulated explosives (sulfur, aluminum), which has important engineering application value.

Keywords: composite explosive; BKW; detonation parameter; JWL state equation