

## 凝聚相爆轰理论的进展\*

北京工业学院 丁 懋

近十年来,在凝聚相炸药爆轰学的研究方面,举行了一系列专题学术讨论会<sup>[1-8]</sup>,出版了一些专著<sup>[9,10]</sup>;在各种有关学术刊物中发表了大量论文。我国不久前创刊的《爆炸与冲击》杂志迄今已发表有关爆轰及其计算和实验技术的论文约20篇。

当前爆轰研究的重点是安全问题。这既是武器研究的需要,也是民用爆破和各种爆炸技术的需要。由热和机械刺激引起炸药的化学反应和爆炸,炸药中冲击波到爆轰的转变,炸药爆燃到爆轰的转变,这三方面的研究占了相当大的比重。

实验测试技术和数值模拟技术的发展以及两者的结合,是当前爆轰研究的特点。爆轰是一个高速过程,要求有极高时间分辨率的测试手段。近年报道的新的实验手段有:每秒10万幅的X光闪光摄影<sup>[11]</sup>,温升响应的上升时间可达0.2微秒的热电偶测温技术<sup>[12]</sup>,快速激光 Raman光谱测量技术<sup>[13]</sup>,时间分辨红外辐射计<sup>[14]</sup>等。而最为广泛应用的是各种质点速度和压力的 Lagrange 量计<sup>[15]</sup>,由此有可能得到每一瞬间各流体动力学参量的分布和空间各点参量随时间的变化。这是研究非定常爆轰所不可缺少的实验手段,为数值计算模拟技术提供必要的数据。《爆轰的数值模拟》一书<sup>[16]</sup>系统地总结了这方面的进展。由于大容量超高速电子计算机的发展,许多以前认为不可能实现的复杂计算,例如爆轰波相互作用的三维计算等,现在已经做了<sup>[16]</sup>,而且计算结果可以用电影放映,再现各种细节。

尽管在爆轰实验技术上有了较大的进步,爆轰的数值模拟上有了飞速的发展,在凝聚相爆轰理论方面仍不能说已经取得重大的突破。这是因为炸药爆轰这一能量高速释放过程是化学反应与流体动力学过程的非线性相互作用的过程。对于这样一个复杂过程的理论探索还仅仅开始。

CJ 理论是爆轰的最简单模型,把爆轰波看成一个强间断面,对于许多工程实际问题得到成功的应用。

分别由 Я. Б. Зельдович, J. von Neumann 和 W. Doering 于40年代初互相独立地提出的 ZND 模型,认为爆轰波是一冲击波和随之而来的反应区的组合。冲击波使炸药压缩而加热,开始发生快速的化学反应。随着反应的进行,压力逐渐下降。到反应完了时的状态即为 CJ 态。在 ZND 定常爆轰模型中,反应区中的流动是定常的,冲击波和反应区一同以恒定的爆速在炸药中传播。在反应区终态与后边界之间是一非定常的产物流动区,其整个波形单值

\* 本文内容曾在1981年12月举行的第2届全国爆炸力学学术会议上报告,发表时作了增删。

地决定于后边界的条件。

在一维的反应流模型中，忽略输运过程。假使只考虑单一不可逆放热反应，可用下式表示化学反应对流动的影响<sup>[17]</sup>：

$$\frac{dp}{dt} = c^2 \frac{d\rho}{dt} + \rho c^2 \sigma r$$

其中

$$c^2 = v^2 \left[ p + \left( \frac{\partial E}{\partial v} \right)_{p, \lambda} \right] / \left( \frac{\partial E}{\partial p} \right)_{v, \lambda}$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho c^2} \left( \frac{\partial p}{\partial \lambda} \right)_{E, v}$$

$$E = E(p, \rho, \lambda), \quad r = r(p, \rho, \lambda) = d\lambda/dt$$

$p$  是压力， $\rho$  是密度， $v$  是比容， $c$  是声速， $E$  是内能， $\lambda$  是反应进展度， $\sigma$  称为热性系数， $\sigma r$  表示化学反应能转化为热能和动能的速率。

如果爆轰中有一个可逆反应，那么既要考虑正反应，也要考虑逆反应，此时就有两个 CJ 点  $CJ_0$  和  $CJ_1$ ，分别为平衡的和冻结的 CJ 点。对于凝聚炸药，平衡声速和冻结声速之差可达 1—2%。

如果有两个不可逆反应同时发生，此时

$$c \cdot r = \sigma_1 r_1 + \sigma_2 r_2$$

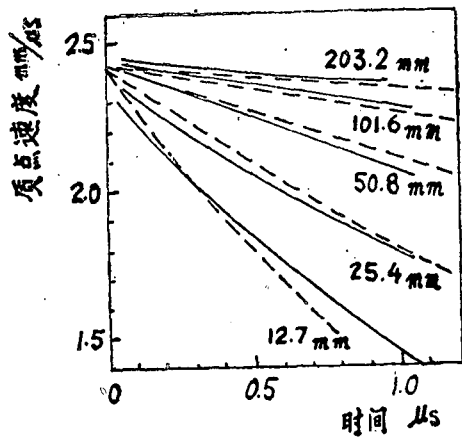
如果其中有一个反应是吸热反应，例如塑料粘结炸药，炸药不可逆放热反应，而粘结剂不可逆分解时吸收热量，那么就可以得到本征值爆轰。它的反应终止的状态不在雨贡尼奥线的强支，而在其弱支。此时将有多个可能的定常解。

对于 CJ 模型的普适性在 60 年代就有争论。1975 年 Mader 和 Craig<sup>[18]</sup> 引用了 1965 年得到的未发表的实验数据：用四个长度的 PBX-9404 药柱与不同材料的板作用，炸药药柱长度愈长，相应的爆轰压  $p_{CJ}$  增大。他们提出了有效 CJ 压强  $p_{ECJ}$  的概念，认为  $p_{ECJ}$  随爆轰走距而连续增长。Mader 提出了碳沉积机理<sup>[19]</sup>，Bdzil 和 Davis 提出了时间相关的二反应爆轰模型<sup>[20]</sup>，以解释此种现象。由于此实验是以硝酸钡和 TNT 的混合物引发药柱的爆轰，必须离开起爆面一定距离才能达到定常爆轰。 $p_{ECJ}$  实际不同于真实的爆轰压。如何合理地解释自由表面速度得到的爆轰压，也值得研究。Веретенников 用电磁法测定了药柱内不同长度的质点速度，得到与上述相反的结果<sup>[21]</sup>。

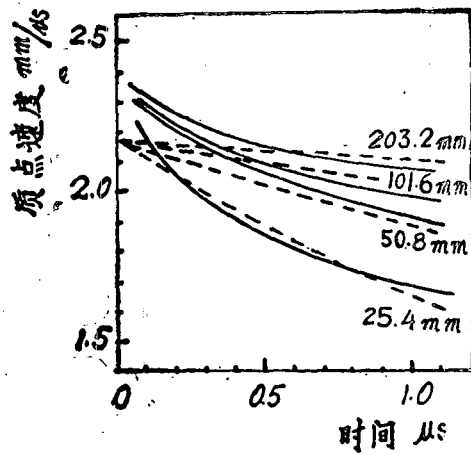
Davis 在 1976 年发表了用电磁法测定的 PBX-9404, Comp. B 和 PBX-9502 (TATB 的塑料粘结炸药) 不同药柱长度的质点速度<sup>[22]</sup>。

从图 1(b)(c)，von Neumann 峰清晰可见，在 PBX-9502 尤为明显。两者在反应区末端的压强随装药长度而改变。但在 PBX-9404 则看不出有 von Neumann 峰的存在，反应区的瞬态高压的作用可以忽略。用  $p_{CJ} = 35.6 \text{ GPa}$  按 CJ 模型进行计算得到的值与实验测定值的误差在 2% 以内。而 Comp. B 和 PBX-9502 在反应过后的区域内，用直线模拟还是可行的。

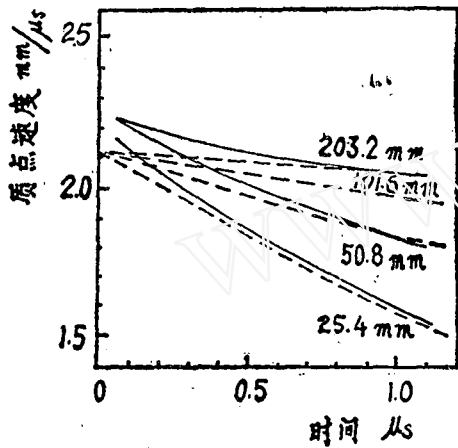
Hayes 和 Tarver 应用分辨率为毫微秒 (ns) 的粒子速度计得到的结果<sup>[23]</sup> 可见图 2。超细 TATB 的上升时间为 70 ns，然后能量迅速释放，质点速度迅速下降，然后较平滑地下降。而 PBX-9404 上升时间就在仪器响应范围内。ZND 模型对于纯 TATB 不再适用，应加以修



(a)



(b)



(c)

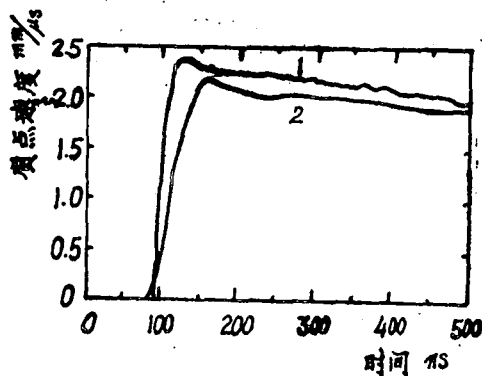


图2 实验的质点速度随时间的变化图  
1 PBX-9404 2 超细TATB

图1 平面爆轰系统中质点速度的电磁法实验结果。曲线上的数字为药柱长度。虚线为用CJ模型的计算结果

- (a) PBX-9404 计算用  $p_{CJ} = 35.6 \text{ GPa}$
- (b) Comp. B 计算用  $p_{CJ} = 27.4 \text{ GPa}$
- (c) PBX-9502 计算用  $p_{CJ} = 29.3 \text{ GPa}$

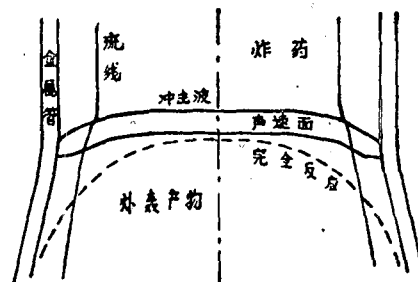
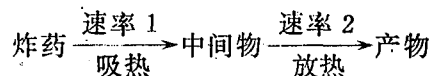


图3 在金属管中的爆轰反应区的剖面图。只在声速面以上的反应放出的能量才能用以驱动爆轰

正。作者提出：或者有一个粘性耗散过程与放热反应相耦合，或者是一个二步串联反应，先是一吸热反应，随之是支持爆轰过程的放热反应，



反应区的情况与药柱的熄爆半径密切联系。Campbell和Engelke对爆速与药柱直径的关系做了大量的实验研究<sup>[24]</sup>。不同直径的药柱对应于不同的爆速。同一炸药的最大爆速与熄爆半径的爆速差都在爆速的15%以内。Comp. B和PBX-9502的熄爆半径分别为PBX-9404熄爆半径的3.63和7.63倍。

Bdzil研究了稳态二维爆轰<sup>[25]</sup>，在金属管中爆轰反应区的剖面如图3所示。可以得到冲击波形状的方程，将此理论与实验测定的爆速、爆轰波阵面形状和熄爆半径相对照，如果取反应的速率方程为

$$r = k(p/p^*)^n(1 - \lambda)$$

其中 $p^*$ ,  $k$ ,  $n$ 为常量。可以得到理论计算值与实验结果很好符合。

直到现在，大量的研究工作都是基于对爆轰的流体力学参数（爆速 $D$ 、质点速度 $u$ 和压力 $p$ ）的测量，用假设的化学反应速率方程，应用数值模拟计算，得到实际过程的近似模型。对于炸药爆轰反应区中的实际化学过程还很少了解。

冲击波压缩究竟怎样引起炸药的分解？过去的观念都认为这是一个热过程，冲击压缩使炸药加热而引起化学反应。Дремина及其同事发现冲击波中的分解与通常的热分解有很大不同，研究了冲击波阵面中的分解动力学<sup>[26]</sup>。最近Walker, Karo和Hardy根据许多实验事实并进行了分子动力学的计算，提出了一个新的模型，他们称之为微观自由基冲击起爆模型<sup>[27]</sup>，向传统的流体动力学模型或ZND模型挑战。

微观自由基模型的主要论点如下：

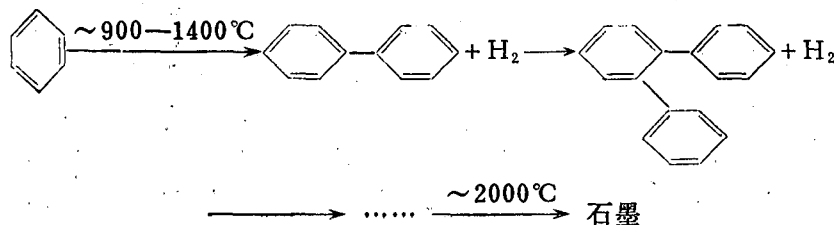
1. 冲击波阵面不存在热平衡，也不是一个强间断面或突跃，不存在 von Neumann 尖峰，压力和温度连续地上升到极大值。

2. 冲击波能量驻留在极窄的冲击波阵面中，一般为5—15 Å。在中等强度的冲击波的作用下，就有可能发生相当多键的力学断裂，使化学反应开始。自由原子和自由基的链式反应起重要作用。冲击波与炸药的结晶缺陷、不规则及界面的相互作用，使炸药分子在靠近冲击波阵面的非平衡区中破裂，而不是由于压缩加热等热过程。

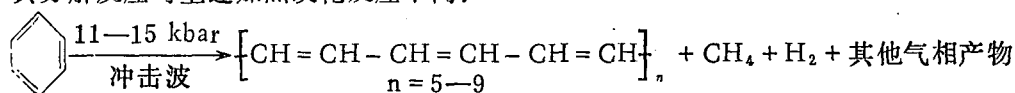
3. 炸药的爆轰速度主要受冲击波障和能量释放率的限制，反应动力学能够改变爆速。在流体动力学模型中爆速只决定于炸药的密度和反应热，与反应动力学无关。

冲击波化学为这个微观模型提供了例证<sup>[28,29]</sup>。

芳香族化合物如苯在一般的加热条件下，反应进行如下：



但是在冲击波作用条件下，情况完全不同。即使在较弱的冲击波作用下，也能发生苯环的裂解；其分解反应与上述加热炭化反应不同：



又实验表明，苯在静压达 40 kbar 和 600°C 高温下并不发生化学反应，因此不能用温度和压力的影响来解释苯在冲击波作用下的分解。

脂肪族化合物在冲击波下作用的表现与芳香族有很大不同。在 11—15 千巴冲击波作用的同样条件下，脂肪族化合物毫不分解；但加热到 400—600°C 时已烷已分解为各种气态产物。

冲击波的加载过程发生在击波阵面极窄的区域内 ( $10^{-12}$ — $10^{-9}$  秒)。芳香族的振动弛豫时间约在  $10^{-10}$  秒量级，比一定强度的击波上升时间为长，故击波能够引起芳香族化合物的不平衡破坏；而脂肪族化合物的振动弛豫时间约在  $10^{-13}$  秒量级，即使在冲击波作用的情况，仍能达到平衡。对于弱冲击波，平衡温度低，因此不发生分解反应。

除了以上冲击波化学的例证外，对于炸药也有实验支持这个模型，例如在硝基甲烷中加入少量的催化剂能使其爆轰半径缩小约一半。

一般说来，如果冲击波阵面的应力梯度足够大，分子的振动活化可能发生在达到内平衡之前。对于某些分子结构，振动能可以集中在分子中的某一部位。如果积聚在某一键的能量足够大，可以在此振动能再分配之前，就发生键的断裂。Клименко和Дремин认为：由于这种效应，在波阵面内的分子分解速度可以比阵面后的分解速度大 2—5 个量级<sup>[30]</sup>。对于能起自催化作用的物质如炸药，这种效应对它在冲击压缩时的分解行为能起重要作用。加入少量催化剂，如易于产生自由基的物质，也有类似的效果。

凝聚相爆轰模型的研究，当前正在进入一个新阶段。宏观的流体动力学模型看来并不能反映凝聚相爆轰的细节。必须进入微观。分子动力学的研究正在开展。必须研究爆轰波阵面中和阵面后的化学反应。新的实验手段如微微秒量级的激光光谱技术，对于研究炸药的高速分解反应提供了可能性。

在爆轰产物的状态方程方面，近十年也有一些进展。

长期以来最广泛应用于预报炸药爆轰性质的是 BKW 方程，已经编成 Fortran-BKW；RUBY和 TIGER 等程序。Fickett 在 Lennard-Jones 和 Devonshire 胞格模型的基础上编制了计算爆轰产物的程序。Jacobs 应用 LJD 方程和 Monte Carlo 方法提出了高密度爆轰产物的半经验状态方程，Cowperthwaite 和 Zwisler 发展为 JCZ 方程，并编制了 JCZ-TIGER 程序。BKW 是经验的气态方程，LJD 是固态方程，JCZ 则是气相和固相状态方程的半经验的组合。Finger 等<sup>[31]</sup>对各种不同元素组成的炸药测量了爆速、爆轰压和等熵膨胀线，有的还测量了温度和产物组成，并和 BKW，JCZ3 计算的爆轰参数作了对比。他们发现，如果产物组成中有 HF 和 CF<sub>4</sub>，H<sub>2</sub>O 或 CO 和 CO<sub>2</sub> 占主要，这些方程的计算值和实测值有显著差别。他们认为不仅需要在 BKW 和 JCZ3 方程中调整 H<sub>2</sub>O，CO<sub>2</sub> 和含氟分子的状态方程参量，而且必须改变状态方程本身。

F. H. Ree 和他的同事们对于爆轰产物的状态方程进行了研究<sup>[32]</sup>。他们使用 Mansoori-Canfield-Ross (MCR) 纯物质状态方程，分子间的相互作用势采用  $6-\exp$  势 ( $\alpha = 13$ )。可靠

的爆轰产物状态方程模型必须给出其中每一组分的冲击压缩特性,以及这复杂混合物的热力学性质。他们实验研究了单一组分如CO,CH<sub>4</sub>的冲击绝热线<sup>[33]</sup>,以确定各组分的势参数。冲击绝热实验与爆轰条件接近,这样确定的势参数在爆轰产物状态方程中使用更为可靠。然后采用 van der Waals 单一流体混合物模型,把 MCR 状态方程推广到混合物,得到爆轰产物的状态方程。

Ree 把爆轰产物的组分分为三类,第一类是非极性分子如O<sub>2</sub>,N<sub>2</sub>,CH<sub>4</sub>,CO,CO<sub>2</sub>等。在确定这类分子的势参数时,采用对比态法。从液态氩的冲击波数据定出的势参数,计算得到这些分子的势参数。第二类是极性分子如H<sub>2</sub>O,NH<sub>3</sub>,HF。确定这类分子的势参数时,必须计入温度的影响,作一简单的修正。对于极性分子,对比态法是不适用的。第三类是必须考虑多体相互作用的分子。在爆轰产物中只有H<sub>2</sub>属此类,多体力减弱了分子间的位势,需要调整 $\alpha$ 值。

此外,在爆轰产物中还有固体碳生成。在 BKW 和 JCZ3 计算中都假定固体碳以石墨或非晶体碳出现。Ree 认为这假设与实验结果不符,只有假设石墨与金刚石处于平衡中同时存在,才与高压实验相符。

用上述方法对三种简单炸药——液态 NO, RX-23-AB (HNC<sub>3</sub> 70 mol %, NH<sub>2</sub>-NH<sub>2</sub> 5.9 mol %, H<sub>2</sub>O 24.1 mol %) 和六硝基苯进行了计算,三者的爆轰产物分别为 N<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O+N<sub>2</sub> 和 N<sub>2</sub>+CO<sub>2</sub>+CO+C。计算得到的爆轰参数  $D_{C1}, p_{C1}$  都优于用 BKW 和 JCZ3 的结果,更接近实验值。

这些研究表明,从分子间相互作用势出发,采用可靠的统计模型和混合模型,有可能不依靠爆轰数据,得到气态爆轰产物的状态方程,从而预报炸药的爆轰性能。

## 参 考 文 献

- 1 6th Symp. (Int.) on Detonation, Coronado(1976).
- 2 中国力学学会第一届全国爆炸力学学术会议,黄山(1977).
- 3 Symp. on High Dynamic Pressure, Paris(1978).
- 4 5 Всесоюзный симпозиум по горению и взрыву, Черногоровка(1978).
- 5 中国力学学会第一次爆轰学术讨论会,兰州(1979).
- 6 6 Всесоюзный симпозиум по горению и взрыву, Черногоровка(1980).
- 7 7th Int. Symp. on Detonation, Annapolis(1981).
- 8 中国力学学会第二届全国爆炸力学学术会议,扬州(1981).
- 9 Fickett, W., Davis, W. C., Detonation, Univ. of California Press(1979).
- 10 Mader, C. L., Numerical Modeling of Detonations, Univ. of California Press(1979).
- 11 Trimble, J. J., Aseltine, C. L., Preprint, 7th Symp. (Int.) on Detonation(1981):537.
- 12 Bloomquist, D. D., Sheffield, S. A., *ibid*:829.
- 13 Delpuech, A., Cherville, J., Michaud, C., *ibid*:36.
- 14 Von Holle, W. G., Tarver, C. M., *ibid*:818.
- 15 Cowperthwaite, M., Rosenberg, J. T., *ibid*:835.
- 16 Mader, C. L., *ibid*:335; Mader, C. L., Kershner, J. D., LA-8989(1981).
- 17 see 9, Chap. 4:76—102.
- 18 Mader, C. L., Craig, B. G., LA-5865(1975).
- 19 —, Actes Symp. Int. H. D. P., Paris(1978):213—224.
- 20 Bdzil, J. B., Davis, W. C., LA-5926-MS(1975).

- 21 Беретеников, В. А., Детонация, химич. физ. процессов горения и взрыва, Черногловка (1980).
- 22 Davis, W. C., Proc. 6th Symp.(Int.)on Detonation, ONR, ACR-221 (1976):637.
- 23 Hayes, B., Tarver, C. M., Preprint, 7th Symp. (Int.)on Detonation(1981):799.
- 24 Campbell, A. W., Ray Engelke, Proc. 6th Symp. (Int.)on Detonation(1976):642.
- 25 Bdzil, J. B., J. Fluid Mech., 208(1981):195—226
- 26 Бабарэ, Л. В., Дремин, А. Н., Клименко, В. Ю., Тезисы докл. 5 Всес. симп по ме- ханохимии и механоэмиссии твердых тел(1975):74.
- 27 Walker, F. E., Karo, A. M., Hardy, J. R., Preprint 7th Symp. (Int.)on Detonation (1981):716.
- 28 Dremín, A. N., Babarc, L. V., Shock Waves in Condensed Matter-1981, AIP Conf. Proc. №78(1982):27.
- 29 Dodson, B. W., Graham, R. A, *ibid*:42.
- 30 Клименко, В. Ю., Дремин, А. Н., Детонация, химическая физика процессов горения и взрыва, Черногловка(1980):69.
- 31 Finger, M., Lee, E., Helm, F. H., Hayes, B., Hornig, H., Mc Guire, R., Kahara, M., Guidry, M., Proc. 6th Symp. (Int.)on Deton. (1976):710.
- 32 Ree, F. H., Preprint, 7th Symp.(Int.)on Deton. (1981):846.
- 33 Nellis, W. J., Ree, F. H., Van Thiel, M., Nellis, A. C., UCRL-35627(1981).

## RECENT ADVANCES IN THE THEORY OF CONDENSED PHASE DETONATION

Ding Jing

(Beijing Institute of Technology)

### 《力学进展》1983年第13卷更正

期	页	行	误	正	期	页	行	误	正
1	封1	11	水平台	深水平台	3	344	17	长轴	长轴
1	76	倒1	Sinic	Sinica)	3	352	倒2	暗带	暗带
2	封1	倒11	兰腊宝	兰腊保	3	353	17	脱色公式	脱色配方
2	202	倒4	a-cuv	au-cuv	3	354	7	实践上	实际上
2	235	2	兰腊宝	兰腊保	3	356	倒5	$\alpha=223^\circ$	$\alpha=22.3^\circ$
3	311	2	中国学科学	中国科学	3	357	倒5	$\alpha=223^\circ$	$\alpha=22.3^\circ$
3	312	倒1.2	应数学	应用数学	3	360	2	用普遍的	用普通的