

研究简报

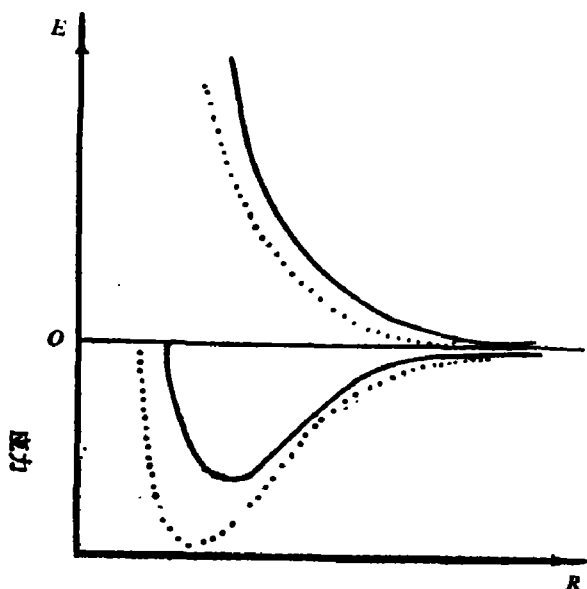
凝聚炸药的压缩爆轰机理

尹仕忠

凝聚炸药分子是一个贮能器，它把还原基与氧化基通过中间骨架原子连接在一个分子中，平时处于稳定状态，受到激发活化时，两种基团发生化合释放能量。

说明了炸药分子的贮能结构，我们就可以讨论炸药的压缩爆轰机理了。

为了说明炸药分子中的化学键可以通过压缩解体，我们先分析下图所示的氢分子的共价键的键能随核间距变化的情况。



1 H_2 分子能量曲线

图中纵坐标表示成键电子的能量轴，横坐标表示氢分子中两原子的核间距。实线表示用变分法求解氢分子的薛定谔方程而得的价电子基态和排斥态轨道能量随核间距变化曲线。虚线表示实验值。

图中 \circ 线表示成键前两个自由氢原子的电子能态相对为零。两个氢原子之所以能键合成氢分子，是由于两个氢原子的核间距减小到一定值时，共用电子对有一个最低的能态，即有一个最稳定状态。

当电子对受到激发活化时，电子对能级升高，键合作用解体，形成自由氢原子。

从图中可以看出要使电子对能级升高到 \circ 线，可以有两途径。一条是加热使电子能级逐步增大，核间距逐步增加，最后分离为两个自由氢原子。显然这就是热活化

分解机理。另一个使电子对能级升高的途径是冲击压缩分子，使核间距从最稳定的核间距基础上有所减小，此时价电子的能级可以迅速升高到零线或零线以上，电子对也同样进入激发活化状态。显然这种活化不是热活化，而是分子受冲击核间距减小而活化的，简称压缩活化。

THEORY OF COMPRESSIONAL DETONATION OF CONDENSED EXPLOSIVES

Yin Shizhane