

讲 座

## 炸药起爆机理的研究

章冠人

(西南流体物理研究所)

### 一、引 言

火药的发明起源于我国的汉代,距今已有千余年的历史,炸药的发明也有百余年了。科学家们系统地研究炸药起爆,如从Chapman和Jouguet时代算起已经有九十年了,但时至今日,对炸药的起爆过程,仍了解得不够。如能深刻地了解炸药的起爆机理,可以帮助我们正确地理解炸药起爆的各种条件,避免各种可能发生的事故,从而正确地应用炸药在矿山、工业、航天和军事等方面,因此研究炸药的起爆过程具有十分重要和现实的意义。

### 二、起爆炸药的一般方法和起爆机理

一般炸药如TNT、RDX、HMX等高级炸药和硝铵等工业炸药的起爆方法一般应用:(1)导爆索或柔爆索;(2)火雷管;(3)热丝电雷管;(4)火花隙电雷管;(5)爆炸丝电雷管;(6)刀片雷管和(7)激光雷管等。这些方法归纳起来有两种作用:一为热作用;另一为冲击波作用。

热作用的起爆机理一般称为热爆炸理论。热爆炸理论主要依据为放热化学反应。炸药通常在室温下是稳定的,其热分解只是微量而不易觉察的,这是由于适当的热传递使微量分解产生的热量全部传递给周围的环境,最后使其内部的温度和环境温度一样,但是,如将炸药加热到一定的温度,其热分解作用随温度的加高而变快,所释放的能量不能全部传递出来,而是积累在炸药的内部,这样就导致内部温度的自身加热,热分解自动加速,反应由缓慢而加剧到“爆炸”的程度,这就是热爆炸。

创导热爆炸理论的应首推苏联学者Semenov<sup>[1]</sup>,他在1928年提出了热爆炸理论,并假定热损失可用Newton冷却公式表示,即 $K_S(T - T_0)$ 。炸药的热分解遵守Arrhenius定律,即反应速率正比于 $e^{-E/RT}$ (其中 $K$ 为热传导率, $S$ 为炸药面积, $T$ 为炸药温度, $T_0$ 为周围温度, $E$ 为炸药的活化能, $R$ 为气体常数)。当热损失和所放热量相等时,炸药不会升温,若热损失比所放热量少时,则炸药将不断升温而可能起爆,因之Semenov首先提出了临界状态的概念,即温度超过这个临界温度,炸药起爆,反之不会起爆。Semenov的热爆炸理论是一个最原始简单的关于炸药起爆机制的理论,但它说明了许多现象,为现代热爆炸理论的研究奠定了基础。

热爆炸理论虽可以解释许多起爆现象,但对有的起爆现象还不能圆满地解释,例如用冲击的方法也能使炸药起爆,而起爆的起始点可能不在和炸药冲击的交界面上,而是在炸药内部距其交界面一定的距离处,这种现象是热爆炸理论所无法说明的。五十年代,英国学者Bowden和Yaffe<sup>[2]</sup>等人首先引用和阐述了“热点”的概念。他们认为某些炸药以各种形式受到冲击后(如撞击、光辐射、中子照射和冲击波等),冲击波到达密度间断处就可以突然形成局部高温区域,称为“热点”或“温峰”。六十年代美国学者Campbell等人<sup>[3]</sup>通过实验观察创造了冲击起爆的理论。他们认为在炸药经冲击波作用后,形成了热点,此时加热是不均匀的,在某些局部地方,可以形成比周围高得

多的温度，即所谓热点。形成热点的途径有：(1) 炸药内含有空洞或气泡受到冲击波的压缩；(2) 炸药内颗粒之间受冲击波作用发生了摩擦；(3) 空洞或气泡压缩后，表面能转化为热能；(4) 炸药晶体内存在位错和缺陷，在受冲击波作用下放出位错带有的能量转变为热能。

Campbell 等人在1961年用透明的硝基甲烷炸药，人为地加入一个气泡，然后加以冲击，观察到爆轰确是从该处开始，这个实验奠定了不均匀炸药冲击起爆的理论根据。其它热点形成机制，则尚未见到实验证明。冲击起爆机理，一旦热点形成，以后的过程就完全和热起爆的过程相同。由热点的温度和热传导来决定热点的发展，因此冲击起爆机理除形成热点的过程外，实质上还是热起爆机理。

Cheung<sup>[3]</sup> 对于不均匀炸药的冲击引爆给出了一个引爆判据，即有名的  $p\tau = \text{常数}$  的关系（式中  $p$  为入射压力， $\tau$  为起爆的延迟时间），对一种炸药有一个固定的常数。当  $p\tau$  低于此值时不能引爆炸药。Walker 和 Wasley<sup>[4]</sup> 利用能量守恒定律对这个关系作了进一步的解释，提出了引爆临界能量的概念，认为  $p\tau$  关系是引爆临界能量的关系。我们知道炸药的引爆要输入一定能量，当输入能量大于此临界能量时方能起爆。

从上面两种引爆炸药机制的讨论可以看出，无论热起爆还是冲击起爆均离不开输入一定的能量，因而起爆临界能量的概念是有其基础的，得到了普遍的公认，但输入这些能量是否一定全部以热能的形式使分子分解，还是有其它形式，则一时尚难于定论。

### 三、研究炸药起爆的实验方法

研究炸药起爆的实验方法很多，通常用下列几种方法

(1) 对炸药的热爆炸机理一般用实验方法测定爆点温度。所谓爆点温度，就是指在一定试验条件下加热炸药到爆炸所需的最低温度。实验装置称为爆点测定装置，如图1所示。

(2) 对炸药的冲击起爆机理，在实验室内一般用两种方法进行实验，一种称为隔板实验，如图2所

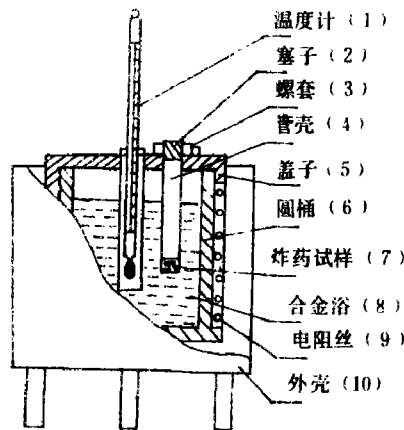


图1 测量爆点温度的装置

Fig.1 Set-up for the measurement of the ignition temperature

- (1) Thermometer, (2) Plug, (3) Screw-cap, (4) Case, (5) Cover, (6) Cylinder, (7) Test explosive, (8) Alloy bath, (9) Resistance, (10) Outside Case

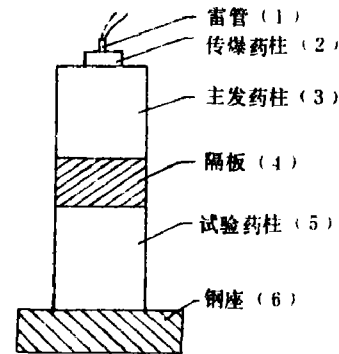


图2 隔板试验装置

Fig.2 Gap test set-up

- (1) Detonator, (2) Booster, (3) Donor explosive, (4) Plate, (5) Test charge, (6) Steel base

示。在主发药和被试验炸药之间加不同的惰性材料, 获得不同幅值的平面冲击波来起爆试验炸药。冲击波幅值和时间宽度的改变可以通过改变惰性材料不同的冲击阻抗, 和改变厚度来得到; 另一种方法是撞击试验, 利用飞片来撞击被试验的炸药, 可以改变飞片的速度来调整冲击波幅值, 改变飞片的厚度获得不同的脉冲宽度。飞片可以用炸药、气体炮和电爆炸箔等方法来推动, 如图3所示。测量试验炸药的起爆延迟时间或延迟距离等参量。

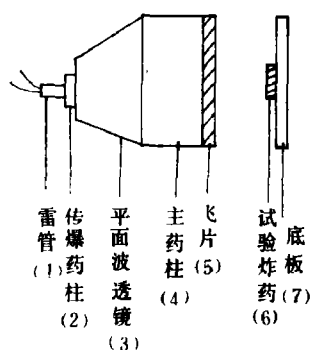


图3a 炸药驱动飞片

Fig.3a Flying plate driven by explosive  
(1) Detonator, (2) Booster,  
(3) Plane-wave generator, (4) Donor explosive, (5) Flyer, (6) Test charge, (7) Base

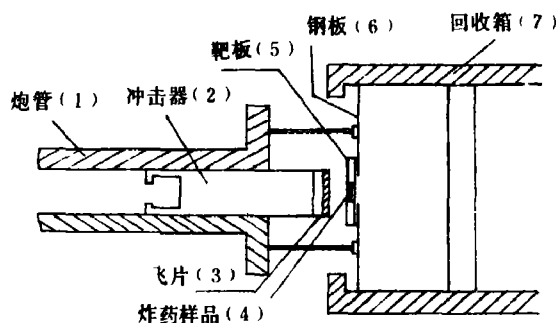


图3b 气体炮

Fig.3b Gas gun system  
(1) Barrel (2) Impacter  
(3) Flyer (4) Test charge  
(5) Target (6) Steel plate  
(7) Recovery box

测试技术: 一般除用狭缝转镜相机、分幅相机照相外, 还应用石英晶体压力计、锰铜压力计、电磁法、激光测速仪和频谱测温仪等。

#### 四、炸药起爆和爆轰波结构

了解炸药的起爆过程需对爆轰波的结构进行研究。我们知道爆轰波的结构提供了一个从未反应区过渡到完全反应区(爆轰产物)的空间和时间结构。如能测出此间各部份的化学成份或物理参量, 就可以推测出释能分解过程, 也就可以知道起爆过程, 但对于大多数高级炸药来说, 这个空间结构尺寸太小了, 约在0.1~1mm的数量级, 用现代的仪器尚无法分辨出其各部分的参量, 因而只能唯象地给出爆轰波结构的模型。Zeldovich, Von Newmann和Doering等人最先提出称为ZND的爆轰波结构模型, 他们分别在1940年提出了这个一维模型。认为爆轰是在一段有限时间和空间内似稳的渐变过程, 在未反应炸药和完全反应产物之间存在一过渡区, 在该区内压力、密度连续地发生变化。这个模型虽从爆轰波阵面C-J点之后的速度、压力、温度和密度等得到了实验的证实, 但在过渡区内的结构仍是不清楚的。按照ZND模型, 爆轰波阵面上压力有一个 Von Newmann峰(相当于图4a的S点), 在峰后沿Rayleigh线连续过渡到C-J点。这种一层层平衡的连续层状结构, 各层有其分解能, 但Von Newmann峰上的能量应特别多, 不可能完全由峰上的炸药发生反应供给, 应存在一个输能机制, 但ZND模型没有这个输能机制。另外按照ZND模型, C-J点是Rayleigh线上嫡值最大的一点, 因此不可能沿此线达到弱爆轰状态, 但在实际情况中却有稳定的弱爆轰存在。基于这些疑问, ZND模型的过渡区的结构可以说仍旧是不清楚的。若要搞清该区

的结构, 必须发展微秒量级的化学和热力学以及亚纳秒量级的测量仪器、亚毫米量级分辨率的探头, 这些工作虽然部份正在进行, 且获得很大的进展, 但距解决问题还十分遥远。

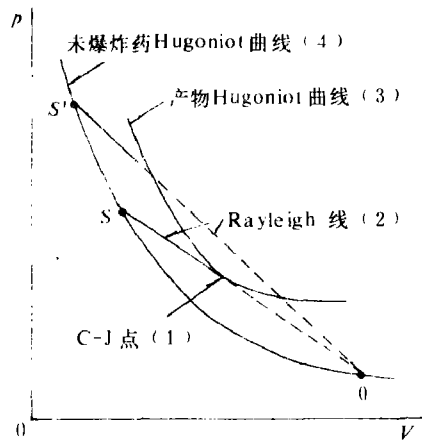


图4a 炸药的Hugoniot曲线

Fig. 4a Hugoniot curves of explosive

(1) C-J point, (2) Rayleigh line, (3) Hugoniot curves of product, (4) Hugoniot curves of unexplosion explosive

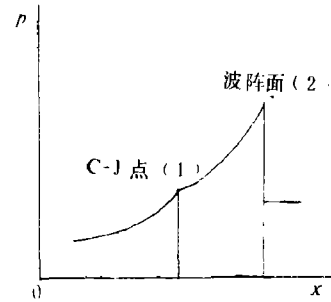


图4b 爆轰波阵面

Fig. 4b Profile of detonation front

(1) C-J point  
(2) Wave front

七十年代以来, 由于不平衡热力学的进展, 1982年Tarver<sup>[6]</sup>应用非平衡的概念扩充了ZND模型。提出的一维非平衡ZND模型, 如图5所示。气体爆轰波的结构分为四层。

(1) 一非常薄的冲击波阵面, 在此阵面内, 混合气体受到压缩和往前推动。

(2) 一比较厚的松弛层, 在此层内气体分子先吸收第一转动能量, 然后吸收振动能量。气体分子在放热分解反应之前, 先变为振动激发状态。

(3) 一比较薄的一层, 在其内迅速传播和发生分枝链式反应, 释放化学能, 使气体分子变为高度振动激发状态。

(4) 又一层比较厚的松弛层, 在其内气体产物发生膨胀和弛豫, 变为热平衡状态(即C-J状态)。

非平衡的ZND模型, 由于反应产物振动能量很大, 且其弛豫速度和压力成比例, 如在波阵面后有一压力扰动波经过这些高度振动激发的分子时, 将吸收它们的能量, 压力扰动就得到了放大。因为波阵面相对于波后扰动是亚声速的, 这些扰动将不断追赶上波阵面而被加强, 所以用这种模型可以说明波阵面能量来源的问题。对于弱爆轰的问题, 类似地也可以认为是存在横向扰动, 带走了部分能量的结果。

在液体和固体炸药中, 情况要复杂得多。非平衡ZND模型和气体情况一样, 也分为四层, 如图6所示。大部分化学能的释放是在邻近波阵面附近的一薄层内, 那里进行着链式放热反应。稍远离波阵面后面的反应区, 主要是振动激发状态产物的松弛反应。但是在这种高压, 高密度的凝聚炸药中, 发生化学反应是非常复杂的, 因为在这种高密度介质中, 平移、旋转和振动能级只要几个皮秒

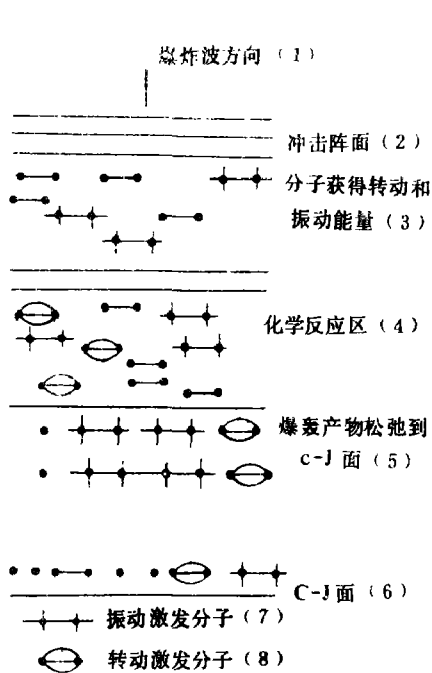


图 5 非平衡 ZND 模型

Fig. 5 The Nonequilibrium ZND model  
 (1) Direction of detonation wave, (2) Shock front, (3) Vibrational and rotational excited molecule, (4) Chemical reaction zone, (5) Relaxation zone, (6) C-J front, (7) Vibrational excited molecule, (8) Rotational excited molecule

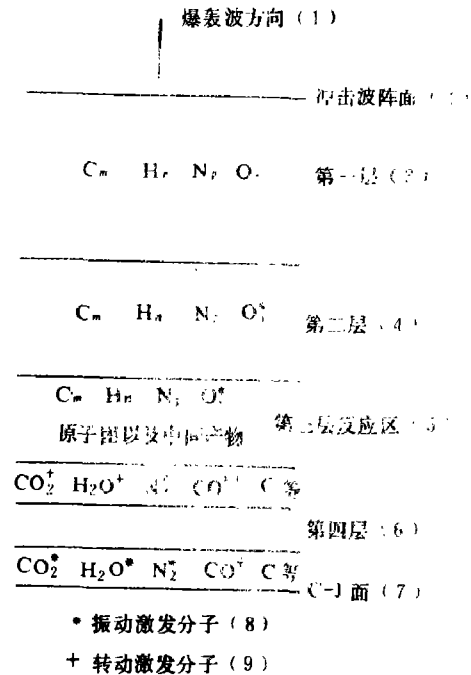


图 6 凝聚炸药的非平衡 ZND 模型

Fig. 6 The nonequilibrium ZND model  
 (1) Direction of detonation, (2) Shock front, (3) 1st layer, (4) 2nd layer, (5) 3rd layer reaction zone, (6) 4th layer, (7) C-J front, (8) Vibrational excited molecule, (9) Rotational excited molecule

就可以达到平衡。换言之，凝聚炸药的松弛区比气体的狭窄得多，故难于用实验测量。

从1980年开始，美国利弗莫尔实验室的科学家们结合实验和计算机模拟研究了凝聚炸药的爆轰波反应区结构等问题。他们改进了实验技术，并用带反应的流体力学程序模拟了这些实验，例如测量了 Von Nowmann 峰、反应区长度以及产物的膨胀等等。应用的炸药为 HMX、TATB、PETN 和 TNT 为基的混合炸药；应用了超薄的埋藏在炸药内的压力计和粒子速度计，达到纳秒级的时间分辨率；应用了激光速度干涉仪，测量了自由面速度；应用透明介质测量了交界面的粒子速度；应用了可见光和红外辐射计测量了温度；又应用了二级气炮压缩爆轰的固体炸药，其压力远超过了正常 C-J 点的压力。

每种实验由于探头等的加入，总要干扰爆轰波的反应区以及爆轰产物的膨胀，所以每次实验必须应用 ZND 模型的反应流体模型的程序来模拟。这些模型能十分准确地预估出这些干扰对反应速率和状态方程的影响。先用一维的实验数据将这些程序校准，然后应用在二维和三维爆轰波的程序中，来计算二维和三维的爆轰波，其中包括临界直径问题、绕角问题、球面聚心和散心爆轰波问题。波的相互作用和飞片加速等。因而他们现在已能预估在大部分情况下固体炸药的事故、生存能力和其他一些性质。他们的工作仍在继续进行着，以后他们的模型将进一步考虑固体炸药一些微观性质。

## 五、炸药的微观过程控制了炸药的起爆和爆轰

为了说明微观的机械过程和热力学过程对凝聚炸药起爆和爆轰的作用，举例来研究高温高压在分子和分子之间对化学反应速率的影响。我们知道现在已经能应用分子间势来计算复杂混合分子产物的平衡状态方程。分子间势包括偶极子势和不对称斥力势等。这是一方面，但最基本的问题（也是知道得最少的），为高温，高压怎样影响分子的化学反应的。一般化学反应可以大致地划分为两类：一类为迁移控制型的（即自由基链式反应），另一类为能量控制型的（即分解反应）。何种过程限制了它们的反应速度？前者决定于一个原子或分子找到其对手的时间；后者决定于先获得能量，再反应失去更多能量的时间。这些均决定于介质的结构，尤其是在极端条件下的物质结构，怎样使未反应的分子过渡到产物状态。目前在一般状态下，已有一些方法开始研究这种物理化学的微观过程，如分子动力学方法，从头开始（ab initio）计算方法等。问题是怎样把高温、高压和高密度的条件加入进去。美国利弗莫尔实验室的Tarver等人在这方面已做了许多工作，对简单的反应（如双原子的分解等）已经能够进行结构计算了，他们现在致力于发展更复杂系统的计算方法<sup>[7]</sup>。

## 六、起爆的数值模拟研究

炸药起爆的数值模拟研究是研究炸药起爆过程的另一方面，就是采用数值计算方法，提出合适的模型，在大型计算机上模拟求解带化学反应动力学的流体力学方程组，以正确反映炸药起爆过程。

流体力学方程组，即质量守恒、动量守恒和能量守恒，再加上状态方程。化学反应动力学一般给出化学反应率方程（也称起爆函数）。化学反应率方程由于炸药反应速率很快（微秒级）以及高温、高压等原因，致使测量困难，加之反应机理不清楚，要给出正确的方程式还是十分困难的。一般都是事先给出一种唯象的热力学量函数，然后再根据实验结果确定其中的参数。采用这样的反应率函数作出来的数值计算结果，一般能反映起爆过程中的某些特性，在一定程度上还能与实验结果定量地符合，但由于炸药化学反应复杂，现在的实验测量手段有限，因此简单的反应函数，还是不能真实地反应炸药起爆过程的全部内容，总会存在这样和那样的缺点，所以起爆函数形式繁多。下面举几种起爆函数说明这个问题。

(1) Arrhenius 反应率，其形式为

$$\frac{d\lambda}{dt} = \lambda Z \exp(-E/RT)$$

式中 $\lambda$ 表示未反应炸药的质量百分数； $Z$ 为指数前常数； $E$ 和 $R$ 在本文第二节中作了说明。这个方程完全决定于温度，现在一般认为这个反应率方程不适用于不均匀的固体炸药，因为有时冲击波只使炸药升温几十度，但也能使炸药起爆，如按此式计算则完全可忽略。为了避免这个缺点，有人就应用双Arrhenius反应率，把反应分为二个阶段：第一阶段表示诱发；第二阶段描述放热。这种两步模型，看来适用于计算成份比较简单的气体爆轰。

(2) Forest Fire 反应率，形式为

$$\frac{d\lambda}{dt} = \lambda \exp\left(\sum_{i=0}^N a_i p^i\right)$$

式中 $\lambda$ 为未反应炸药的质量百分数， $p$ 为压力， $a_i$ 为常数， $N$ 等于14或15，式中右边为一长的多项式。状态方程用未反应炸药和产物均匀混合，压力处于平衡的假定，此式无物理意义，靠实验数据拟合而成，又因为此式项数较多，所以和实验符合的程度较好，不仅在爆轰波阵面上，在波后也符合得较好。美国的Mader用它计算了大量的问题，都得到了较满意的结果，但由于它缺乏明确的物理意义，故只是用实验来检验其它实验。

(3) Cochran 反应率函数, 其形式为

$$\frac{dF}{dt} = (1 - F) [w_1 p^n + w_2 pF]$$

式中  $F$  是反应产物的质量百分数,  $w_1$ 、 $w_2$  和  $n$  为常数, 由实验确定。上式用了两项, 第一项表示起爆的成核过程, 第二项表示起爆的成长过程。他们用这种反应率函数计算了 PBX - 9104 和 RX - 03 - BB, 结果很好。同样 Lee - Tarver 在 1980 年也提出了一个与此相类似的两项组成的反应率函数, 虽然计算结果和实验也十分相符, 但它们的缺点基本上和 Forest Fire 的相同。

此外还有许多苏联学者如 Дремин<sup>[8]</sup> 和 Баталова<sup>[9]</sup> 等人均提出了各种不同形式的反应速率函数, 实验和计算均能得到不同程度的符合, 但这些反应速率函数获得的方法基本上是相同的, 即以一种实验来检验另一种实验, 虽缺少明显的物理意义, 但对具体问题却解决得十分圆满。如以缩小比例尺寸的模拟试验或条件简化的单项试验来获得速率方程, 然后用它预估真实模型或条件复杂的总合试验, 或其他问题, 这种速率方程就起到了这样的作用, 但它们对微观的起爆机理的认识可以说毫无帮助。因此现阶段炸药起爆模拟的研究, 只能说刚起步于实用阶段, 要达到理性阶段恐还要走一段距离。

## 七、结 论

炸药起爆机理的研究问题具有十分重要和现实的意义, 现阶段的研究工作局限在宏观的和唯象的方面。许多研究工作虽能解决许多实际问题, 但对炸药反应过程的真正机制尚不十分清楚, 尤其在定量方面。这些问题的解决看来要依靠分子动力学。最后, 如能对炸药起爆机制了解得很清楚, 其用途是十分显然的, 即对分解速率的控制, 那时, 新的可控制分解速率的炸药将不断设计出来, 人类利用炸药就将以一种崭新的面目出现。

## 参 考 文 献

- [1] 谢苗诺夫, Н. Н. (黄继雅译), 论化学动力学和反应能力的几个问题, 科学出版社 (1962)。
- [2] Bowden, P. P., Yaffe, A. D., Initiation and growth of explosion in liquids and solids, Cambridge University Press (1952)。
- [3] Campbell, A. W., et al., *Phys of Fluids*, **4** (4) (1961), 498。
- [4] Cheung, H. et al., UCRL-76578 (1975)。
- [5] Walker, F. E., Wasley, R. J., *Combustion and Flame* **15** (1970), 233。
- [6] Tarver, C. M., *Combustion and Flame*, **46** (1982), 111, 135, 157。
- [7] The Detonation of High Explosives Energy and Technology Review, Jan-Feb (1988), 1。
- [8] Капель, Г. И., Дремин, А. Н., *ФГВ*, **13** (1) (1977), 85。
- [9] Баталова, М. В., Бахрах, С. М., Зубарев, В. Н., *ФГВ*, **16** (2) (1980), 105。

## STUDIES ON THE MECHANISM OF THE INITIATION OF DETONATION

Zhang Guanren

(Southwest Institute of Fluid Physics)