第12卷 第2期
1992年4月
爆炸与冲击
EXPLOSION AND SHOCK WAVES
Vol. 12, No. 2
Apr., 1992

均相炸药冲击起爆的一种机理
——共振起爆

章冠人

(中国工程物理研究院流体物理研究所,成都523信箱, 610003)

摘要 应用点阵力学,导出了在一维链中简单同位素缺陷的平均热骚动速度。其公式中出现共振项,只要缺陷点的质量比周围的轻,其平均热骚动速度总比周围的大,因此只要达到某一值足以挣脱一维链时,就可以引起爆炸。这说明只要在均相炸药内存在轻原子或缺陷点,在冲击波作用下总可以引起爆炸。

关键词 均相炸药 冲击起爆 共振起爆

一、引 言

一般均相炸药均为单质晶体炸药,其冲击起爆机理均认为是热起爆。由于冲击波阵面后温度的均匀升高,引起化学反应,释放更多的能量,因而引起更剧烈的反应,循此继续下去,就引起爆炸。1981年在第七届国际爆轰会议上,F. E. Walker 和 A. M. Karo 用分子动力学的方法计算了 PETN 的冲击起爆认为[1]在冲击波阵面内可以由于存在缺陷和界面使共价键断裂而引起爆炸,但他们所用的方法完全是数值模拟的方法。实际上所有介质,包括晶体炸药在内,都不可能是完全均匀的。晶体内总存在缺陷,如位错、孔隙、裂纹、杂质等。冲击波过后,温度不可能是完全均匀的,仍旧存在热点。这些缺陷处往往是形成热点的中心,由这些热点发展而引起爆炸。不过这些热点是微观的,例如一个同位素原子,杂质或一团其它原子,它们比宏观的空洞要小得多。对同一种均相炸药,这些缺陷统计上是均匀分布的。所以均相炸药的冲击起爆好象是由于整体均匀加热一样,实际上是均匀分布热点的作用。由于这些微观热点的形成是由一个原子或一团原子吸收冲击波的能量形成的。这些缺陷原子或原子团和其它多数原子组成点阵,它们对波动能量的吸收有一定的选择性,例如对某些频率能发生共振,均相炸药的共振起爆从理论上而言是可能的。本文的目的就是要阐明这个问题。

二、形成热点的晶格动力学理论

为了要说明在单质晶体内缺陷处,在冲击波后形成热点,应用解析晶格动力学方法。文献[1]虽然用数值模拟晶格动力学的方法计算了 PETN 的冲击起爆问题,但他们用了大量的计算机时间,也只采用了简化的模型,对热点的形成只能说是定性的,而且并不能说

1990年12月21日收到原稿,1991年10月4日收到修改稿。

明共振起爆的问题。这里限于条件，拟采用解析的方法。当然模型更为简化，只能是一维同位素模型；虽然如此简化，但对共振起爆的可能性是十分易于理解和说明的。假定炸药晶体内点阵上每个质点的质量为 m，其中在某一点上存在一个杂质，其质量为 $m_d=m+\Delta m$，Δm 表示杂质点的质量和正常质点的差。我们要证明在冲击波过后，如 $\Delta m<0$，则杂质点上的温度要比正常点的温度要高。用一维模型如图 1 所示。波矢 $\vec{k}_i$ 沿 x 轴，$\vec{\sigma}_i$ 为纵方向。

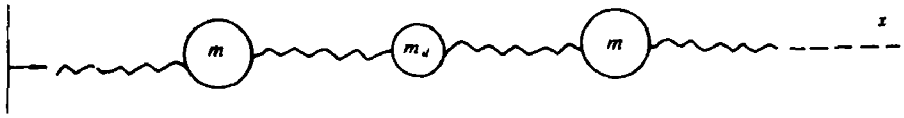

图 1　一维模型示意图

Fig. 1　Schematic digram of one dimensional model

先考虑一定常入射波

$$\vec{S}^i(t)=\vec{e}(\vec{k}_i,\vec{\sigma}_i)\exp\{i[\vec{k}_iR-\omega(\vec{k}_i,\vec{\sigma}_i)t]\} \tag{1}$$

式中 $\vec{S}^i(t)$ 表示点阵质点离开平衡点的距离，其幅值为 1，R 表示平衡点的坐标，$\vec{e}$ 表示波矢为 $\vec{k}_i$，偏振方向为 $\vec{\sigma}_i$ 的单位矢量，ω 为振动频率，t 为时间。在点阵质点为均匀时，这个波是一个定常波动；但当它遇到缺陷时，必定要发生散射，以缺陷点为中心产生一散射波。则这个缺陷点的位移将为两个波动产生位移之和

$$\vec{S}(t)=\vec{S}^i(t)+\vec{S}^s(t) \tag{2}$$

$S(t)$ 必须满足一维晶格运动方程式，令 $\ddot{S}=\dfrac{d^2S}{dt^2}$，得：

$$m_d\ddot{\vec{S}}(t)=\varphi_d\vec{S}(t)+F(t) \tag{3}$$

式中 φ_d 为周围晶格势能对位移的偏导数包括了“－”号，$F(t)$ 为作用在 m_d 质点上的外力。如缺陷点是一杂质，其质量和其它点上的是不同的，它们的偶合势能的偏导数也可能不同，即

$$m_d=m+\Delta m,\qquad \varphi_d=\varphi+\psi \tag{4}$$

ψ 表示其差，为简单起见，设杂质为一种同位素原子，只改变质量，φ 不变，即 $\psi=0$。将式(4)代入式(3)，则得

$$m\ddot{\vec{S}}(t)=\varphi\vec{S}(t)-\Delta m\ddot{\vec{S}}(t)+F(t) \tag{5}$$

由于入射波随时间成 $e^{-i\omega t}$ 而变，如在 m_d 上无外力作用 $F(t)=0$，则式(5)变为

$$[\varphi-m\omega^2+\chi(\omega)]\vec{S}(t)=0 \tag{6}$$

式中

$$\chi=\psi-\Delta m\omega^2=-\Delta m\omega^2 \tag{7}$$

式(6)或可写成

$$[\varphi-m\omega^2+\chi(\omega)][\vec{S}^i(t)+\vec{S}^s(t)]=0 \tag{8}$$

由于 $\vec{S}^i(t)$ 是均匀点阵波动方程之解，它满足

$$(\varphi-m\omega^2)\vec{S}^i(t)=0 \tag{9}$$

因此从式(8)减去式(9)，得

$$[\varphi-m\omega^2+\chi(\omega)]\vec{S}^s(t)=-\chi(\omega)\vec{S}^i(t) \tag{10}$$

如式(9)和式(10)的格林函数分别为 G^0 和 G，则式(10)之解应为

$$\vec{S}^{s} = -G(\omega)\chi(\omega)\vec{S}^{i}(t) \tag{11}$$

G 可以用 G^0 展开到二阶项[1]

$$G = G^0 + G^0\tau G^0 + \cdots \tag{12}$$

式中：

$$\tau = \chi\frac{1}{1 - G^0\chi} \tag{13}$$

将式(12)代入式(11)，并代入式(2)，则杂质点的位移为

$$\vec{S}(t) = \vec{S}^{i}(t) + \vec{S}^{s}(t) = (1 - G^0\tau)\vec{S}^{i}(t) \tag{14}$$

对于杂质点的性质，完全包含在 τ 内，G^0 为均匀点阵运动方程的格林函数，其表示式为[2]

$$G^0(\omega) = G_1^0(\omega^2) + i\mathrm{Sgn}\omega G_2^0(\omega^2) \tag{15}$$

式中

$$G_1^0(\omega^2) = \frac{1}{m}\int_0^\infty \mathrm{d}\lambda' \frac{P}{\lambda' - \omega^2}Z(\lambda')$$

$$G_2^0(\omega^2) = \frac{\pi}{m}Z(\omega^2) \tag{16}$$

$$Z(\omega^2) = \sum_{\sigma}\frac{1}{3}\int\frac{\mathrm{d}k}{V_B}\delta[\Omega^2(\vec{k}\sigma) - \omega^2]$$

式中，$\Omega=\sqrt{\frac{\varphi(k)}{m}}$ 为均匀点阵的本征频率，P 为积分主值，V_B 为晶体布里渊区的体积，$\varphi(k)$ 为势能带"一"号的偏导数的傅氏分解系数。这样杂质晶格点由入射波引起的真实运动速度当 $k=0$ 时为

$$\dot{S}^{i}(t) = \dot{\vec{S}}^{i}(t) + \dot{\vec{S}}^{i*}(t) = -2\omega\sin\omega t \tag{17}$$

式中"＊"表示复共轭，将其平方、并对一周期求平均，得

$$<(\dot{S}^{i})^2> = \int_0^{2\pi/\omega}(2\omega\sin\omega t)^2\mathrm{d}t = 2\omega^2 \tag{18}$$

其散射波引起的真实运动速度为

$$\begin{aligned}\dot{S}^{s}(t) &= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{G^0(\omega)\tau(\omega)\vec{S}^{i}(t) + [G^0(\omega)\tau(\omega)\vec{S}^{i}(t)]^*\}\\ &= -2\omega\frac{\chi}{(1 - G_1^0\chi)^2 + (G_2^0\chi)^2}\{[G_1^0(1 - G_1^0\chi) - (G_2^0)^2\chi]\cdot\\ &\quad\cdot\sin\omega t + \mathrm{Sgn}\omega[G_2^0(1 - G_1^0\chi) + G_1^0G_2^0]\cos\omega t\}\end{aligned} \tag{19}$$

将其平方，并对一周期求平均，得

$$<(\dot{S}^{s})^2> = 2\omega^2\chi^2\left[\frac{1}{(1 - G_1^0\chi)^2 + (G_2^0\chi)^2}\right]^2\cdot[G_1^0(1 - G_1^0\chi) - (G_2^0)^2\chi]^2 \tag{20}$$

所以杂质点的扰动动能为

$$\begin{aligned}\zeta &= \frac{1}{2}m_d<\dot{S}^2> = \frac{1}{2}m_d[<(\dot{\vec{S}}^{i})^2>+<(\dot{\vec{S}}^{s})^2>] = 2\omega^2m_d\\ &\quad + 2\omega^2\chi^2\left[\frac{G_1^0(1 - G_1^0\chi) - (G_2^0)^2\chi}{(1 - G_1^0\chi)^2 + (G_2^0\chi)^2}\right]^2\cdot m_d\end{aligned} \tag{21}$$

冲击波可以认为是各种频率正弦振动的叠加，于是如冲击波波后的能量密度随时间的改

变为 $U(t)$，则分配到每个晶格点的能量密度为 $U(t)/N$，N 为晶格点数密度，用傅氏分解后

$$\frac{U(t)}{N} = \int_0^\infty \frac{U_0}{N} F(\omega)\cos\omega t \mathrm{d}\omega \tag{22}$$

U_0 为幅值能量密度，$F(\omega)$ 为密度谱，则在冲击波后杂质点的动能应为

$$E_m = \int_0^\infty \frac{U_0}{N} F(\omega)\zeta \mathrm{d}\omega = \int_0^\infty \frac{2U_0\omega^2}{N} F(\omega) \cdot \cdot m_t\left[1 + \chi^2\left\{\frac{G_1^0(1 - G_1^0\chi) - (G_2^0)^2\chi}{(1 - G_1^0\chi)^2 + (G_2^0\chi)^2}\right\}^2\right]\mathrm{d}\omega \tag{23}$$

从式(7) $\chi = -\Delta m\omega^2$ 可以看出，当 $\Delta m < 0$ 时，即杂质晶格点的质量 m_t 小于正常格点的质量 m 时，式(23)可以发生共振，即当

$$[1 + G_1^0(\omega_R)\Delta m\omega_R^2] = 0 \tag{24}$$

从上面的推导也可以看出正常晶格点的动能为

$$E_M = \int_0^\infty \frac{2U_0\omega^2}{N} F(\omega) m \mathrm{d}\omega \tag{25}$$

它们的动能傅氏分量之比为

$$\frac{E_m(\omega)}{E_M(\omega)} = \frac{m_t\left\{1 + \Delta m^2\omega^4\left[\frac{G_1^0(1 + G_1^0\Delta m\omega^2) + (G_2^0)^2\Delta m\omega^2}{(1 + G_1^0\Delta m\omega^2)^2 + (G_2^0\Delta m\omega^2)^2}\right]^2\right\}}{m} \tag{26}$$

速度平方平均值的傅氏分量之比为

$$\frac{<\dot{S}^2>_m}{<\dot{S}^2>_M} = 1 + \Delta m^2\omega^4\left[\frac{G_1^0(1 + G_1^0\Delta m\omega^2) + (G_2^0)^2\Delta m\omega^2}{(1 + G_1^0\Delta m\omega^2)^2 + (G_2^0\Delta m\omega^2)^2}\right]^2 \tag{27}$$

在共振频率时傅氏分量之比为

$$\frac{<\dot{S}^2>_m}{<\dot{S}^2>_M} = 1 + \frac{1}{(G_2^0)^2} = 1 + \frac{m^2}{\pi^2 Z^2\omega_R^2} \tag{28}$$

由于平均动能和局部温度成正比，从式(26)可以看出 $E_m(\omega)/E_M(\omega)$ 不一定大于 1，这是因为 Δm 为负时，m 大于 m_t。只有当(26)式的分子大于 m 时，方能大于 1。 这就是说此时缺陷在冲击波过后，其温度比周围的温度大。但是从式(28)可以看出热骚动速度之比则永远大于 1，只要缺陷晶格点的质量 $m_t < m$，而且和 m^2 成正比，而和 $Z^2(\omega_R^2)$ 成反比。我们知道 $z(\omega^2)$ 根据晶格动力学的意义是正常晶格的振动谱分布函数，并且是规一化了的[1]

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega^2 Z(\omega^2) = 1 \tag{29}$$

对各种不同的晶体有不同的振动谱分布函数。因此从式(24)，可以看出适当调整 Δm 和 m 之比，使(28)式能达到一定的比值，此时杂质格点的速度足以挣脱一维链而引起分解。由于冲击波的频谱是一种频率范围很宽的谱，总是能从中找出共振谱线 ω_R 来的，所以用一般强冲击波起爆均相炸药总是可能的。另外，如能测出某种均相炸药的共振谱线，即使只用这种频率的振动，也能使其起爆。以上只是理论推导尚须经实验证实。

三、结　论

本文从理论上探讨了均相晶体炸药的冲击起爆机理。认为均相晶体炸药中的杂质和缺陷是形成热点的根源。但有时候热点的温度并不高，只是当杂质晶格点的质量较轻时，

其平均热运动速度比周围的要大，因而可以挣脱化学键而引起局部分解。本文虽模型简单，但在均质炸药分子链内，轻元素总是存在的，譬如氢原子，在冲击波的作用下，总能找出一个共振频率，使其产生共振，首先将链打断，然后引起分子的解体，本文的简单推导也足以说明这个问题。

参 考 文 献

[1] Walker F E, Karo A M, Hardy J R. Seventh Symposium (International) on Detonation. Naval Surface Weapons Center. White Oak, Maryland; Silver Spring 1982, 777

[2] Leibfried G, Breuer N. Point Defects in Metals 1, Introduction to the Theory. Berlin; Springer-Verlag, 1978

A POSSIBLE MECHANISM OF INITIATION OF DETONATION OF HOMOGENEOUS CONDENSED EXPLOSIVES —— RESONANT INITIATION

Zhang Guanren

(*Southwest Institute of Fluid Physics*, *P. O. Box* 523, *Chengdu*, *Sichuan*, 610003, *China*)

ABSTRACT By the method of lattice dynamics, the average thermal velocity of an isotopic defect in an one dimensional chain is deduced. From its formula, we could see its resonance effect. Its average thermal velocity is always greater than its surroundings so long as its mass is less than that of the later. If it gets to some value that could break up the chain, the detonation is initiated.

KEY WORDS homogeneous explosive, shock initiation, resonant initiation.