

强爆轰参数的理论估算

李银成

(应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 用两相的排平物态方程对硝基甲烷的强爆轰参数进行了理论估算, 理论值与拟稳态强爆轰的实验值(爆速、爆压和爆温)符合得很好。这既检验了这种理论估算方法, 也再次检验了爆轰的 ZND 理论和两相的排平物态方程, 也是对实验方法的一种支持。常 k 形物态方程的强爆轰参数理论估算方法也得到了有条件的肯定。

关键词: 爆轰; ZND 理论; 物态方程

中图分类号: O414.12 文献标识码: A

The Calculation of Strong Detonation Parameters

Li Yincheng (Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088)

Abstract The parameters of strong detonation for Nitromethane (NM) were calculated with the two-phase Repellent-Translation Equation of State (two-phase R-T EOS). The results are quite consistent with the data of quasi-steady strong detonation experiment in NM that contain velocities, pressures and temperatures. This not only tested the calculation method, but also the ZND theory of detonation and the two-phase R-T EOS again. Furthermore, the experiment methods were supported. The strong detonation parameter calculation method with the constant- k equation of state was conditionally confirmed.

Key words Detonation, ZND theory, Equation of state

1 引言

爆轰的 ZND 理论给出的 Hugoniot 曲线的上支 ($v \leq v_0$) 是所有稳态爆轰终态点的集合, 其中 CJ 点以上的段又称为强爆轰段, 是受超驱动的稳态爆轰终态点的集合。许多学者对强爆轰进行过实验研究, 但对本研究来说, 可取的实验结果并不多。首先, 大部分实验获得的不是稳态的强爆轰, 例如, 收缩的管子中的炸药里产生的强爆轰是个不断增强的强爆轰; 其次, 有些实验的数据不完全, 例如仅测了爆速, 然后用理论估算方法求出爆压。这是想获得高压加载手段的研究者所关心的, 但在这里是不合用的。

Sellam 等人在硝基甲烷 (NM) 中实现了拟稳态

强爆轰, 并同时测定了爆速、爆压和爆温数据^[1]。ZND 理论导出的 Hugoniot 方程组加上两相的排平 (k, γ) 物态方程, 可以对强爆轰参数进行理论估算。用对两者的结果进行比较的方法, 可以检验这种强爆轰参数的理论估算方法。常 k 形物态方程, 虽然在估算爆速和装药密度关系时给出了完全不符合实验事实的结果^[2], 但是在强爆轰参数的估算中一直得到广泛采用, 获得了某种程度的成功, 本工作也将就此进行讨论。本研究不仅涉及强爆轰实验方法和理论估算方法, 而且也为爆轰的 ZND 理论是成立的, 以及两相的排平物态方程是恰当的爆轰产物物态方程两个论断提供了新的论据。

2 实 验

Sellam 等人的实验装置^[1]采用了 Hamada 等人的实验装置的原理^[3],可以产生拟稳态的强爆轰. 装置主要由两个套在一起的筒组成,内筒中装的是受试炸药硝基甲烷(NM),外筒与内筒间装的是比硝基甲烷爆速高的一种混合炸药,并且通过调整其组分比例可改变其爆速. 外筒与内筒间的炸药引爆后在内筒中引发拟稳态强爆轰. 爆压用拉氏电磁计量法测量. Hugoniot 温度用光学法测量. 他们的实验结果见表 1.

表 1 NM 的强爆轰参数

Table 1 The parameters of strong detonation for NM

P/GPa	D/(km/s)			T/K	
	Exp.	R-T EoS	Const-k EoS	Exp.	R-T EoS
35.0	8.00	7.97	8.49	4475	4667
33.3	7.87	7.84	8.32	4351	4541
32.1	7.73	7.75	8.20	4184	4453
29.0	7.49	7.50	7.89	4023	4236
27.1	7.32	7.35	7.69	3944	4111
23.8	7.05	7.09	7.35		3907
11.5	6.29	6.29	6.29	3400	3400

3 理论估算方法

3.1 两相排平物态方程与强爆轰的爆速和爆压

爆轰产物的两相的强排斥平动物态方程(简称两相的排平物态方程)^[4]对爆轰产物作如下的描述:爆轰产物中的气态产物在高压高温状态下处于类似于液态的状态,即分子间有很强的排斥作用,分子的外部热运动为完全的平动. 爆轰产物中的固态产物只有固体碳,并为其石墨相,为简便起见,认为它是不可压的. 这样,有如下的两相的排平物态方程:

$$p = p_{cg} + \frac{RT}{\mu_g v_g} \quad (1)$$

$$e = x_g e_g + x_{sol} e_{sol} \quad (2)$$

$$v = x_g v_g + x_{sol} v_{sol} \quad (3)$$

其中, p 、 v 、 e 和 T 分别为压力、比体积、比内能和温度; R 为气体常数; 下标 c 为对分子间相互作用的描述; 下标 g 和 sol 分别为气态和固态产物的物理量. 采用简单的估算产物组分的方法^[5]对于 C、H、N、

O 四种元素组成的炸药,则总共有五种组分: H_2O 、 CO_2 、 N_2 、 O_2 和 C,其质量分数可求,并不随状态的变化而改变. 上式中的 x_g 和 x_{sol} 分别为气态产物的总质量分数和固态产物的质量分数; v_g 为气态产物的平均摩尔质量,它也是常数.

引进所有组分的平均比定容热容为常数的假定,则可得到以一条实验等熵线为参考曲线的两相的排平(k, γ)物态方程^[4]:

$$e = e_{sr} + x_g \frac{v_g}{\gamma} (p - p_{sr}) \quad (4)$$

$$p_{sr} = A v^{-k}, \quad v \leq v_t \quad (5)$$

$$e_{sr} = \frac{p_{sr} v}{k-1} - \frac{p_t v_t}{k-1} + x_g \frac{p_t v_{gt}}{\gamma}, \quad v \leq v_t \quad (6)$$

其中, $\gamma = \frac{x_g R}{\mu_g c_v}$, \bar{c}_v 为产物的平均比定容热容,依假定 \bar{c}_v 与 γ 为常数; 下标 sr 为参考等熵线的物理量; A 为等熵线参数; k 为等熵指数; 下标 t 为属于分两段的参考等熵线的衔接点^[4]的量.

众所周知, Hugoniot 曲线的上支,即其 $v \leq v_0$ 的部分,是所有稳态爆轰的终态点的集合. 这里比体积 v_0 是初始装药密度 ρ_0 的倒数. 在 Hugoniot 曲线的上支上,其中 CJ 点以上的段是强爆轰段. 将两相的排平(k, γ)物态方程(4)~(6)代入 Hugoniot 方程的一般表达式^[5],可得^[4]:

$$\frac{A v^{-k+1}}{k-1} + x_g \frac{v_g}{\gamma} (p - A v^{-k}) = Q_q + \frac{p}{2} (v_0 - v) \quad (7)$$

其中 Q_q 是拟爆热^[5]. 化简,最终可得 Hugoniot 方程的 $p \sim v$ 显式关系^[4]:

$$p = \frac{Q_q + A v^{-k} \left(x_g \frac{v_g}{\gamma} - \frac{v}{k-1} \right)}{x_g \frac{v_g}{\gamma} - \frac{1}{2} (v_0 - v)} \quad (8)$$

将由此式求得的 p 代入爆轰 Hugoniot 方程组的另一个方程:

$$D = v_0 \sqrt{\frac{p}{v_0 - v}} \quad (9)$$

就可得到强爆轰的 $D \sim v$ 关系. 这样就确定了强爆轰的爆速、爆压和比体积之间的函数关系.

3.2 两相排平物态方程与强爆轰的爆温

当物态方程是以一条过程曲线为参考曲线时,描述温度变化的一般是一个微分方程,现简单给出其推导过程. 微分(2)式,有

$$de = -x_g p_{cg} dv_g + c_v dT \quad (10)$$

其中,

$$c_v = x_g c_{vg} + x_{sol} c_{vsol}$$

$$c_{vg} = \frac{de_{Tg}}{dT}, \quad c_{vsol} = \frac{de_{Tsol}}{dT}$$

下标 T 为对分子热运动的描述. 微分(3)式, 并注意到固态产物是不可压的, 有

$$dv = x_g dv_g \quad (11)$$

将上述两个微分关系式代入热力学第二定律的微分表达式

$$de = Tds - pdv \quad (12)$$

可得两相的排平(k, γ)物态方程对应的估算温度的微分方程

$$dT = -\frac{RT}{\mu_g c_v v_g} dv + \frac{Tds}{c_v} \quad (13)$$

微分 Hugoniot 方程^[5]可得:

$$de = -\frac{1}{2} pdv + \frac{1}{2} (v_0 - v) dp \quad (14)$$

从数学上讲, 连续光滑曲线都可以微分; 但是, 从物理上讲, 不存在沿 Hugoniot 曲线发生微小变化的过程. 微分表达式(14)的物理意义在于, 由于某些条件的微小变化, 造成两爆轰终态点在 Hugoniot 曲线上的微小差别, 式(14)是表示这微小差别的量 dv 、 dp 与 de 之间存在的关系. 若将式(14)积分, 所得的结果表示无数某些条件的微小变化的累加, 所造成的两终态点在 Hugoniot 曲线上出现的有限差别 Δv 、 Δp 与 Δe 之间的关系. 将(14)式代入(12)式得:

$$Tds = \frac{1}{2} pdv + \frac{1}{2} (v_0 - v) dp \quad (15)$$

合并(13)式和(15)式得沿 Hugoniot 曲线求值的估算温度的微分方程

$$\left(\frac{dT}{dv}\right)_H = -\frac{RT}{\mu_g c_v v_g} + \frac{p}{2c_v} \times \left[1 + (v_0 - v) \frac{1}{p} \left(\frac{dp}{dv}\right)_H\right] \quad (16)$$

由式(8)可求得 dp/dv 的表达式

$$\left(\frac{dT}{dv}\right)_H = \frac{2(\gamma + 1)Av^{-k} - (\gamma + 2)p - 2x_g v_g Akv^{-k-1}}{\gamma v + 2x_g v_g - \gamma v_0} \quad (17)$$

微分方程(16)可以用数值方法求解, 初始条件为当 $v = v_j$ 时, $T = T_j$, 这里 v_j 和 T_j 为 CJ 态的比体积和爆温. 以上推导过程, 参考了 Walsh 等人给出的沿冲击 Hugoniot 曲线估算温度的方法^[6]. 本人对 Hugoniot 曲线求微分与积分的物理意义进行了解释. 温度作为状态的函数, 可以沿任意路径积分求值. 求值的结

果应该是一样的, 但在求强爆轰的爆温时沿 Hugoniot 曲线积分求值更直观些.

有必要重申, 在式(16)中比定容热容 c_v 是温度的函数, 并且它不是平均比定容热容 \bar{c}_v , 而在式(17)中 γ 为常数(与此同时, 平均比定容热容 \bar{c}_v 为常数).

3.3 常 k 形物态方程与强爆轰的爆速和爆压

常 k 形物态方程虽然给出了爆速与装药密度无关这样一个与实验事实完全不符的理论结果^[2], 但是它给出的强爆轰的爆速与爆压公式却是大致符合规律的, 这使它成为对强爆轰参数进行理论估算时通常所用的“物态方程”. 因此, 有必要在此对这种现象加以讨论.

常 k 形物态方程 $e = \frac{pv}{k-1}$ 对应的 Hugoniot 方程

按通常的做法写为^[5]

$$\frac{pv}{k-1} = Q_q + \frac{1}{2} p(v_0 - v) \quad (18)$$

引进参数 $z = \frac{v_0}{v}$, 则由上式可得强爆轰的爆压方程

$$p = \frac{p_j z}{1 + z + k - kz} \quad (19)$$

其中 p_j 为 CJ 爆轰的爆压. 将上式代入式(9), 得到:

$$D = \frac{D_j z}{\sqrt{(1 + z + k - kz)(z - 1)(k + 1)}} \quad (20)$$

其中 D_j 为 CJ 爆轰的爆速. 显然, 式(19)和式(20)对于弱爆轰也是适用的. 因而, 对于定容爆轰, 有 $z = 1$, $D = \infty$, $p = \frac{p_j}{2}$. 这是常 k 形物态方程给出的著名结果.

另一种作法是, 引进参数 $y = \sqrt{1 - (D_j/D)^2}$, 则有

$$D = \frac{D_j}{\sqrt{1 - y^2}} \quad (21)$$

$$p = \frac{p_j}{1 - y} \quad (22)$$

$$v = \frac{v_0(k - y)}{k + 1} \quad (23)$$

由(23)式和 z 的定义式可求得 z 与 y 的换算关系, 进而可以发现这两种方法的结果是一致的.

由于常 k 形物态方程不是从统计力学推导出来的, 它是从实验得到的等熵线数据的拟合式推导出来的, 它不是一个物态方程^[2,5], 故无法将它象排平

物态方程(1)式那样,分成分子间相互作用和分子热运动两部分.因此,无法用常 k 形物态方程估算强爆轰的爆温.

4 计算结果

计算中用到的 NM 参考等熵线参数为:初始装药密度 $\rho_0 = 1.1322 \text{ g/cm}^3$,爆速 $D = 6.2908 \text{ km/s}$,爆压 $p_j = 11.5 \text{ GPa}$ ^[7].众所周知,由这些爆轰参数,不难求得等熵参数 A 、等熵指数 k 、 CJ 态的比体积 v_j 等.采用简单估算爆轰产物组分的方法^[5],得到 $x_g = 0.852$, $x_{\text{sol}} = 0.148$.采用文献[4]中的方法,由 $\gamma_g = 0.29$ 取 $T = 3900 \text{ K}$ 时的气态产物与混合物的平均比定容热容之比,可得到 $\gamma = 0.243$.积分微分方程(16)所用的初始条件为 $v_j = 0.6565 \text{ cm}^3/\text{g}$, $T_j = 3400 \text{ K}$.计算比定容热容 c_v 所用到的各组分的 $c_{vi}(T)$ 按文献[8]的拟合式并经适当换算求值.

计算步骤为:按(8)式用迭代法求得使爆压的理论值等于实验值的比体积 v ,然后由(9)式求出爆速和用(16)式积分得到爆温.计算结果也列在表1之中.由表1中所列的实验数据和计算结果可以看出,用两相的排平物态方程计算得到的强爆轰爆速与实验值相比,平均相对误差只有 0.37%.爆温的理论值与实验值符合得也较好,理论值比实验值平均高约 206 K,这可能与没有考虑固态碳的熔化有关.从表1的数据看,碳的熔化可能发生在 3400 ~ 3944 K.本人曾对碳在高压下的熔点用克拉珀龙公式进行过估算^[9]:

$$\frac{dT_m}{dp} = \frac{T_{m0}(v^\alpha - v^\beta)}{\lambda} \quad (24)$$

其中, T_m 为熔点温度; p 为压强; v^α 和 v^β 分别为液、固两相的比体积; λ 为熔化热;下标 0 为常态.

石墨熔点的较新数据为 $T_{m0} \approx 3550 \text{ K}$ ^[10],而 $\lambda = 3.8331 \text{ kJ/g}$ ^[11],取近似关系式^[12]:

$$v^\alpha - v^\beta = 0.08v^\beta$$

而 $v^\beta = \frac{1}{2.267} \text{ cm}^3/\text{g}$ ^[13].以这些数据和式(24)估计,

在 20 GPa 附近,石墨的熔点为 4200 K,与表1显示的熔点范围相接近.如果注意到 $v^\alpha - v^\beta = 0.08v^\beta$ 是个粗糙的近似式,则可以认定在 3400 ~ 3944 K 石墨发生了熔化.考虑到石墨的熔化,应对爆温进行修正,修正值为 $\Delta T \approx x_{\text{sol}} \frac{\lambda}{c_p} (T = 3700 \text{ K}) = 278 \text{ K}$.由于热力学数据的缺乏,没有考虑熔化热 λ 随熔点升

高的降低,故 ΔT 的估计值偏高.这样, NM 强爆轰爆温的所有理论估算值比实验值平均高 206 K 是合理的.

用一相的排平(k, γ)物态方程所做的相应计算表明,爆速的理论值与两相的几乎完全一样,而爆温的理论值比两相的平均高约 47 K,差别是较显著的.因此,在估算爆温时应该用两相的排平(k, γ)物态方程.

用常 k 形物态方程给出的强爆轰爆速的估算值与实验值相比,平均相对误差为 5.4%,虽然比排平物态方程的误差大一个量级,但是,对于估算来说这样的误差也还是可以接受的.为什么常 k 形物态方程在估算 $D \sim \rho_0$ 关系^[2]与强爆轰参数时会有如此不同的表现呢?其实道理很简单.众所周知,爆轰产物的等熵线(通常用幂式等熵方程即所谓常 k 形物态方程描述之)在 CJ 点和与其对应的同一装药密度的 Hugoniot 曲线二阶相切,由两相的排平(k, γ)物态方程对应的 Hugoniot 方程(7)可以看出,如果因此而可以忽略其左边的第二项,就得到了常 k 形物态方程的 Hugoniot 方程(18).况且它毕竟不是物态方程,无法用它来估算强爆轰的爆温.总之,在这里常 k 形物态方程估算强爆轰的爆速和爆压时所取得的某种程度上的成功,不能改变一个事实:它不是一个物态方程,而只是一个等熵方程.

应该注意到,用排平物态方程估算得到的定容爆轰的爆压是 4.99 GPa,而不是常 k 形物态方程的著名结果— CJ 爆压 11.5 GPa 之半—5.75 GPa.

5 结论与讨论

5.1 强爆轰参数可以用两相排平物态方程很好地加以估算

表1所列的用两相的排平物态方程理论估算的强爆轰的爆速与实验值符合得非常好,用它估算的爆温经合理修正后也与实验值符合得很好,说明用两相排平物态方程可以很好地估算强爆轰参数.这再次表明,两相排平物态方程是恰当的爆轰产物物态方程.

5.2 强爆轰的爆速和爆压也可以用常 k 形物态方程近似换算

理论分析和实验验证表明,用常 k 形物态方程换算强爆轰的爆速和爆压也是可以的,在 100 GPa 的压力以下有可以接受的近似程度.但是,不要因此而以为它是物态方程.

5.3 爆轰的 ZND 理论是成立的

在这里,用两相的排平物态方程与爆轰的 ZND 理论给出的 Hugoniot 方程组相结合的方法估算得到的强爆轰的爆速、爆压和爆温与实验数据相比较,发现符合得很好,这与在文献 [2] 和 [4] 中所用的检验 ZND 理论的方法是类似的,故可以说在这里又对 ZND 理论进行了一次检验,并再次得出结论:又一个实例表明,爆轰的 ZND 理论是成立的,或者说是相当好地近似成立的.

参 考 文 献

- [1] Sellam M , Presles H N , Brochet C. The 8th Symposium (International) on Detonation , 1985. 425
- [2] Li Yincheng (李银成). *Chin. J. High Pressure Physics* (高压物理学报), 1999 , **13** : 247
- [3] Hamada L , Presles H N , Brochet C , *et al. Progress in Astronautics and Aeronautics* , 1985 , **94** : 343
- [4] Li Yincheng (李银成). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2002 , **15** : 438
- [5] Li Yincheng (李银成). *Chin. J. High Pressure Physics* (高压物理学报), 1998 , **12** : 271
- [6] Walsh J M , Christian R H. *Phys. Rev.* , 1955 , **97** : 1544
- [7] Li Yincheng (李银成). *Chin. J. High Pressure Physics* (高压物理学报), 2000 , **14** : 6
- [8] Xu Shugang (徐叔刚) , *et al.* Ed. The Data for Powder Research (火药研究的有关数据) , Beijing (北京) : Defence Industry Press (国防工业出版社) , 1976. 91
- [9] Li Yincheng (李银成). *Chinese Explosion and Shock Waves* (爆炸与冲击) , 1997 , Extra (增刊) : 76
- [10] Weast R C , Lide D R , *et al.* CRC Handbook of Chemistry and Physics , 70th edition , CRC Press , Boca Raton , Florida , 1989. B-12
- [11] Perry R H. *Chemical Engineer's Handbook*. McGraw-Hill Inc , NY , 1950.
- [12] Qian Xuesen (钱学森). *Teaching Materials of Physical Mechanics* (物理力学讲义) , Beijing (北京) : Science Press (科学出版社) , 1962.
- [13] Dean J A (迪安 JA). *Lange's Handbook of Chemistry* (兰氏化学手册) , Beijing (北京) : Science Press (科学出版社) , 1991.