

文章编号:1006-9941(2021)03-0192-10

# 不同频率飞秒激光脉冲序列加工炸药过程安全性的数值计算

伍俊英,刘嘉锡,杨利军,李姚江,吴姣姣,陈朗

(北京理工大学 爆炸科学与技术国家重点实验室,北京 100081)

**摘要:** 为了研究飞秒激光加工炸药技术的安全性,建立了飞秒激光脉冲序列加工炸药的计算模型,考虑了炸药在受热条件下的自热反应。采用数值计算的方法对飞秒激光脉冲序列烧蚀炸药(TNT,TATB和HMX)的过程进行了计算,分析了飞秒激光脉冲序列加工炸药过程的安全性。计算结果表明,飞秒激光脉冲序列频率、炸药自热反应放热量和热扩散系数会显著影响加工过程的安全性。在这三种炸药中,HMX自热反应的放热量最大,热扩散系数最小,因此热累积效应最明显,在三种不同频率( $1 \times 10^3$  Hz,  $1 \times 10^5$  Hz和  $2 \times 10^5$  Hz)的飞秒激光脉冲序列作用下均发生了点火;相反,TATB的热累积效应最弱,在三种不同频率的飞秒激光脉冲序列作用下均未发生点火;TNT的热累积效应介于HMX和TATB之间,因此只在频率较高的飞秒激光脉冲序列作用下才发生点火。在实际加工过程中,特别是对自热反应放热量较大和热扩散系数较小的炸药,为保证加工过程的安全性,应尽量选用频率较低的飞秒激光脉冲序列对其进行加工。

**关键词:** 飞秒激光;脉冲序列;激光加工;炸药;数值计算

**中图分类号:** TJ55

**文献标志码:** A

**DOI:**10.11943/CJEM2020183

## 1 引言

具有高精度结构的炸药部件对提升武器的毁伤性能十分重要。由于炸药自身具有一定的危险性,所以对炸药进行高安全、高精度的切削加工一直是一个技术难题。飞秒激光加工炸药技术是利用高功率的飞秒激光,把其聚焦区内的炸药瞬间变成高温高压等离子体来实现对炸药的烧蚀去除。在飞秒激光加工物质的过程中,加工物质形成等离子体的时间尺度远小于飞秒激光能量传递到被加工区域周围的时间尺度,因此被加工区域周围的物质不易受到热传导的作用,这使得飞秒激光与物质作用的过程不同于长脉冲激光(皮秒、纳秒和毫秒激光),从而从根本上消除了长脉冲激光加工过程中存在的热影响和热损伤现象,实现了对材料的“冷加工”<sup>[1-3]</sup>。与传统机械加工炸药技术相比,

这种新型的飞秒激光加工炸药技术能够对炸药进行高安全和高精度的切削加工。

国内外学者对飞秒激光加工炸药进行了很多研究。在实验方面,Roeske等<sup>[4]</sup>采用脉宽为100 fs的飞秒激光对多种炸药进行了切割加工,首次证实了飞秒激光安全切割炸药的可行性。Palmer等<sup>[5]</sup>采用飞秒激光对六硝基芪(HNS)药柱进行了三维精细加工,实验结果表明,飞秒激光的切割速率会显著影响炸药表面的切割质量,切割速率越高,加工表面质量越好。Mcgrane等<sup>[6]</sup>利用飞秒激光在太安(PETN)、黑索今(RDX)和奥克托今(HMX)三种炸药内部加工形成了孔状和线状结构,并采用拉曼光谱技术证实了在加工处没有发生化学反应。上述研究结果从实验角度,定性地证实了飞秒激光安全加工炸药的可行性。在数值计算方面,陈明华等<sup>[7-8]</sup>采用数值模拟的方法研究了单脉冲飞秒激光切割某发射药和Mg/聚四氟乙烯(PTFE)药剂的过程,获得了药剂内部的温度分布以及炸药反应放热对剩余未加工药剂的影响。刘嘉锡等<sup>[9]</sup>采用数值模拟的方法,对单脉冲飞秒激光烧蚀炸药的过程进行了计算,考虑了炸药在高温条件下的自热反应放热,获得了炸药内部温度的变化情况。伍俊英等<sup>[10]</sup>采用

收稿日期:2020-07-10;修回日期:2021-01-19

网络出版日期:2021-01-25

基金项目:爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)开放基金项目(KFJJ20-04M)

作者简介:伍俊英(1976-),女,副教授,博导,主要从事激光与物质相互作用、含能材料热安全性等研究。e-mail:wjy1312@bit.edu.cn

引用本文:伍俊英,刘嘉锡,杨利军,等.不同频率飞秒激光脉冲序列加工炸药过程安全性的数值计算[J].含能材料,2021,29(3):192-201.

WU Jun-ying, LIU Jia-xi, YANG Li-jun, et al. Numerical Calculation of the Safety of Processing Explosives with Femtosecond Laser Sequence with Different Frequencies[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2021, 29(3):192-201.

分子动力学计算方法对飞秒激光烧蚀炸药的过程进行了计算,获得了炸药在不同功率密度的单脉冲飞秒激光作用后的微观解离机理。

在飞秒激光脉冲序列加工炸药的过程中,由于飞秒激光的不断作用,靠近加工处的炸药可能会产生明显的热累积效应,引起自身的自热反应加剧,导致炸药发生熔化或点火,从而造成危险。因此,研究炸药在飞秒激光加工过程中的温度分布,掌握炸药内温度的变化特征,可以为加工过程安全性的研究提供理论指导。为此,本研究提出了一种飞秒激光脉冲序列加工炸药的数值计算模型。采用数值计算的方法,对飞秒激光脉冲序列加工炸药的过程进行计算,讨论了飞秒激光脉冲序列频率对加工结果的影响。选用 TNT, TATB 和 HMX 这三种使用最广泛的炸药作为研究对象,计算了炸药内部温度分布特征,分析了炸药反应热和热扩散系数对加工结果的影响,为在实际加工过程中,选择飞秒激光脉冲序列的频率提供了理论依据。

## 2 数值计算方法

在飞秒激光脉冲序列加工炸药的过程中,当飞秒激光聚焦到炸药表面后,聚焦区域内的炸药温度急剧上升,瞬间完成熔化、气化和解离等复杂的反应,形成高温高压等离子体,等离子体向外喷溅,炸药被烧蚀去除。在飞秒激光加工炸药的过程中,在加工区域周围会产热累积效应区,且随着飞秒激光的不断作用,热累积效应区也随之增大。如果加工区域周围的热量不能及时向炸药内部传导,炸药自身的自热反应可能会加剧,从而释放大量的热量,最终导致炸药点火或燃烧等危险情况的发生。图 1 为飞秒激光脉冲序列加工炸药过程的原理示意图。

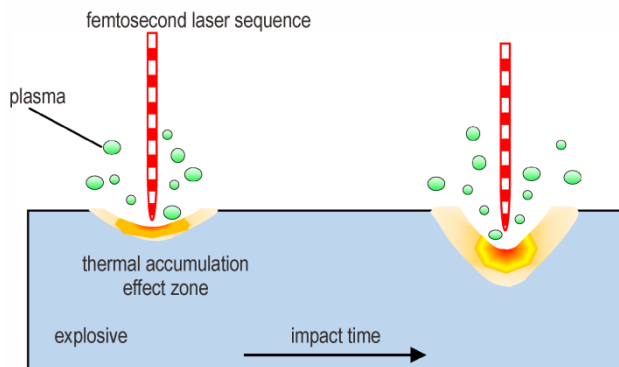


图 1 飞秒激光加工炸药过程的原理示意图

Fig.1 Schematic diagram of the process of femtosecond laser ablation of explosive

飞秒激光加工炸药过程包含了一系列复杂的化学变化,要在计算模型中完整描述较为困难。因此,本研究引入了下列假设:(1)炸药均匀且各向同性;(2)考虑炸药表面的辐射和对流换热,无激光照射的表面为绝热边界;(3)在整个过程中,热物性参数(热传导系数、密度、热容)及化学特征量(活化能、指前因子、反应热)均不随时间和温度变化;(4)不考虑炸药的相变;(5)只考虑炸药在轴向方向的热传导,忽略径向方向的热传导;(6)忽略炸药对激光能量的反射,假定飞秒激光能量全部被炸药吸收;(7)忽略等离子体产物对剩余炸药的热影响;(8)忽略在飞秒激光脉冲序列的作用下,等离子体产物对剩余炸药吸收后续飞秒激光能量的影响。

可以将飞秒激光作用炸药的过程简化为一维非稳态热传导过程,其表达如(1)式所示:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q(x, t) + S(T) \quad (1)$$

式中, $\rho$ 为炸药密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $c$ 为炸药热容, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $T$ 为温度, $\text{K}$ ;  $k_x$ 为炸药热传导系数, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $Q$ 为飞秒激光热源, $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $S$ 为炸药自热反应释放的热量, $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $x$ 为距离炸药表面距离, $\text{m}$ 。

认为飞秒激光在时间上呈高斯分布。采用 Beer-Lambert 定律来描述激光能量在炸药中的吸收规律。在飞秒激光的持续时间  $\tau$  内,飞秒激光能量  $Q$  的表达式为:

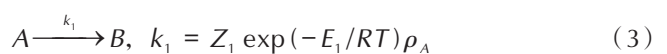
$$Q(x, t) = \exp\left(-\left(\frac{t - \frac{x}{s}}{\tau}\right)^2\right) I_0 \alpha \exp(-\alpha x) \quad (2)$$

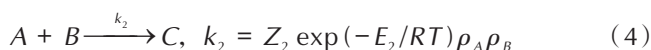
式中, $I_0$ 为飞秒激光初始强度, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ ;  $\alpha$ 为吸收系数, $\text{m}^{-1}$ ;  $\tau$ 为飞秒激光脉宽, $\text{s}$ ;  $s$ 为飞秒激光在炸药中的传播距离, $\text{m}$ 。

炸药在受热过程中,自身的自热反应会加剧,并放出大量的热量,使温度进一步升高。因此,在计算过程中,需要考虑炸药在受热情况下的自热反应。本研究采用多步反应动力学模型来描述炸药的自热反应,每一步分解反应均遵循阿伦尼乌斯定律,将每一步的反应热求和即可得到总的反应热源项  $S$ 。本研究选取了 TNT, TATB 和 HMX 三种目前使用最广泛的炸药进行了计算分析,这三种炸药的多步反应动力学模型分别如下:

### (1) TNT 的多步反应动力学模型

TNT 的多步自热反应可分为三个阶段<sup>[11]</sup>,即:





式中,  $A$  为 TNT;  $B$  为中间产物;  $C$  为最终产物;  $T$  为温度, K;  $k_i$  为分解速率,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $\rho_i$  为密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $Z_i$  为指前因子,  $\text{s}^{-1}$ ;  $E_i$  为活化能,  $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $R$  为气体常数,  $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

对于每一步分解反应, 释放的热量可表示为:

$$S_1 = \rho_A Q_1 Z_1 \exp(-E_1/RT) \quad (6)$$

$$S_2 = \rho_A \rho_B Q_2 Z_2 \exp(-E_2/RT) \quad (7)$$

$$S_3 = \rho_B^2 Q_3 Z_3 \exp(-E_3/RT) \quad (8)$$

式中,  $S_i$  为第  $i$  步反应释放的热量,  $\text{W} \cdot \text{m}^{-3}$ ;  $Q_i$  为反应热,  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。因此 TNT 在受热过程中, 总的反应放热源项为:

$$S_{\text{TNT}} = S_1 + S_2 + S_3 \quad (9)$$

采用四阶龙格-库塔(Runge-Kutta)法对式(6)~(8)进行求解, 得到任意时刻下各组分的质量浓度, 将其值带入方程(9), 则可得到 TNT 的总的反应放热源项  $S_{\text{TNT}}$ 。四阶龙格-库塔公式为:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (K_1 + K_2 + K_3 + K_4) \\ K_1 = f(x_n, y_n) \\ K_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_1) \\ K_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} K_2) \\ K_4 = f(x_n + h, y_n + h K_3) \end{cases} \quad (10)$$

TNT 的多步自热反应动力学参数见表 1。

表 1 TNT 的多步自热反应动力学参数<sup>[11]</sup>

Table 1 Kinetic parameters of multi-step thermal decomposition reaction of TNT

step	$E / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$Z / \text{s}^{-1}$	$Q / \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
1	200	$6.0 \times 10^{14}$	-125.575
2	144.412	$1.957 \times 10^{12}$	3767.267
3	140.226	$2.391 \times 10^{13}$	3592.84

### (2) TATB 的多步反应动力学模型<sup>[12]</sup>

TATB 的多步自热反应可分为三个阶段, 即:



式中,  $A$  为 TATB;  $B$  和  $C$  为中间产物;  $D$  为最终产物;  $k_i$  为分解速率,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

TATB 在受热的过程中, 单位时间内生成的热量为:

$$S_{\text{TATB}} = Q_1 k_1 + Q_2 k_2 + Q_3 k_3 \quad (12)$$

式中,  $Q_i$  为反应热,  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

TATB 的多步自热反应动力学参数如表 2 所示。

表 2 TATB 的多步自热反应动力学参数<sup>[12]</sup>

Table 2 Kinetic parameters of multi-step thermal decomposition reaction of TATB

step	$E / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$Z / \text{s}^{-1}$	$Q / \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
1	252	$7.02 \times 10^{20}$	-210
2	176	$8.75 \times 10^{12}$	-210
3	142	$4.36 \times 10^{11}$	2940

### (3) HMX 的多步反应动力学模型<sup>[13]</sup>

HMX 的多步自热反应可分为四个阶段, 即:



式中,  $A$  为 HMX;  $B$ 、 $C$  和  $D$  为中间产物;  $E$  为最终产物;  $k_i$  为分解速率,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

可以得到 HMX 在受热的过程中, 单位时间内生成的热量为:

$$S_{\text{HMX}} = Q_1 k_1 + Q_2 k_2 + Q_3 k_3 + Q_4 k_4 \quad (14)$$

式中,  $Q_i$  为反应热,  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

HMX 的多步自热反应动力学参数如表 3 所示。

表 3 HMX 的多步自热反应动力学参数<sup>[13]</sup>

Table 3 Kinetic parameters of multi-step thermal decomposition reaction of HMX

step	$E / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$Z / \text{s}^{-1}$	$Q / \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
1	204	$7.99 \times 10^{20}$	-42
2	221	$1.41 \times 10^{21}$	-252
3	186	$2.61 \times 10^{16}$	559
4	143	$1.60 \times 10^{12}$	5620

在计算过程中, 采用有限差分法, 对式(1)进行求解。先假设各热源项均为零, 然后采用中心差分法, 对方程进行离散化处理, 其表达式为:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\alpha_n \Delta t}{\Delta r^2} \left\{ \left[ 1 + \frac{1}{i-1} \right] T_{i+1}^n - 2T_i^n + \left[ 1 - \frac{1}{i-1} \right] T_{i-1}^n \right\} \quad (15)$$

式中,  $\alpha_n$  为热扩散系数, 即:

$$\alpha_n = \frac{\lambda}{\rho c} \quad (16)$$

计算的初始条件为:

$$T(x, 0) = T_f \quad (17)$$

式中,  $T_f$  为环境温度, 为 300 K。

采用牛顿冷却定律<sup>[14-15]</sup>来描述炸药表面与空气的换热, 即计算的边界条件, 如式(18)所示:

$$q = h(T - T_f) \quad (18)$$

式中,  $q$  为热流密度,  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$ ;  $h$  为对流换热系数,  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ 。

由于飞秒激光作用后, 炸药表面的温度很高, 因此在边界条件中还需要考虑炸药表面的辐射换热, 采用斯蒂芬-玻尔兹曼定律来描述辐射散热:

$$E = \sigma(T - T_f)^4 \quad (19)$$

式中,  $\sigma$  为斯蒂芬-玻尔兹曼常数,  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$ 。

在飞秒激光作用后, 激光能量沉积区域内炸药的温度会迅速升高, 温度升高的炸药会发生一系列复杂的分解和复合反应, 进而被烧蚀。炸药被烧蚀的时间约在皮秒量级<sup>[10]</sup>, 远小于下一束飞秒激光入射所需时间(微秒到毫秒量级)。因此, 根据这种时间尺度的差异, 可以将飞秒激光烧蚀炸药过程视为两个独立的过程:

过程一: 飞秒激光烧蚀炸药和热传导过程。炸药在飞秒激光作用下, 炸药表面温度迅速升高, 进而被烧蚀。由于每一束飞秒激光的烧蚀量极小, 直径和深度都在微米量级, 且被烧蚀过程的持续时间极短, 约在皮秒量级<sup>[10]</sup>。因此, 不考虑炸药的微观烧蚀过程, 认为温度达到点火温度的炸药即被烧蚀, 计算方法为删除该部分网格。由于该过程的持续时间极短, 因此不考虑激光能量沉积区以外炸药的自热反应。计算过程如图 2a 所示。

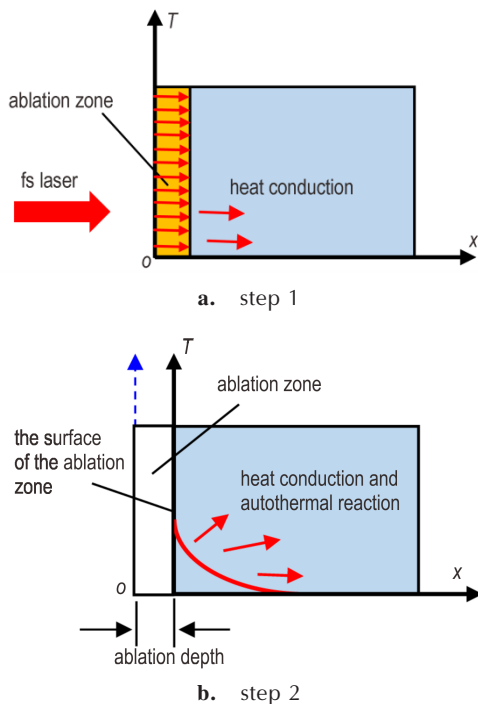


图 2 飞秒激光作用炸药过程的计算示意图

Fig. 2 Schematic diagram of calculation model of the process of femtosecond laser ablation of explosive

过程二: 在飞秒激光作用间隔时间内, 炸药内热量的传导和炸药自热反应过程。在烧蚀过程结束后, 靠近加工位置的炸药可能会有热量的累积, 其温度低于点火温度。该阶段计算的是直至下一束激光入射前, 炸药内热量的传导和炸药的自热反应放热对其温度分布的影响。计算过程如图 2b 所示。

在上述计算模型的基础上, 建立飞秒激光脉冲序列加工炸药的计算模型。将前一束飞秒激光作用后炸药内部的温度分布, 作为后一束飞秒激光入射的初始条件, 以此来模拟计算在飞秒激光脉冲序列作用下, 炸药内部的温度分布及变化规律。

计算选用三种炸药的物性参数见表 4。

计算中, 飞秒激光脉宽为 150 fs, 功率密度为  $1.06 \times 10^{14} \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ , 三种不同的频率分别为  $1 \times 10^3 \text{ Hz}$ ,  $1 \times 10^5 \text{ Hz}$  和  $2 \times 10^5 \text{ Hz}$ 。

表 4 三种炸药的物性参数<sup>[11-13, 16]</sup>

Table 4 Physical properties of TNT, TATB and HMX

explosive	density / $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	thermal capacity / $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	thermal conductance / $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	ignition temperature / K
TNT	1580	1380	0.5	513
TATB	1937	1170	0.544	632
HMX	1905	1050	0.345	573

### 3 结果与讨论

#### 3.1 单脉冲飞秒激光烧蚀炸药的计算结果分析

以 TNT 的加工情况为例进行分析。图 3 是单脉冲飞秒激光作用后不同时刻, TNT 内部的温度曲线。由图 3 可知, 在  $5 \mu\text{s}$  时刻, 烧蚀坑表面的温度为 319 K, 热传导距离为  $3.8 \mu\text{m}$  (由于初始温度为 300 K, 定义温度等于 301 K 位置为热传导位置)。随着时间增加, 在热传导的持续作用下, 烧蚀坑表面的温度逐渐降低, 热传导距离逐渐增加。在  $10 \mu\text{s}$  时刻, 烧蚀坑表面的温度降至 313 K, 热传导距离增至  $5.2 \mu\text{m}$  (图 3a); 在  $1 \text{ ms}$  时刻, 烧蚀坑表面温度降至 301.3 K, 热传导距离增至  $16.8 \mu\text{m}$  (图 3b)。

图 4 是单脉冲飞秒激光作用下, TNT 内不同位置温度随时间的变化曲线。由图 4 可知, 在飞秒激光作用后, TNT 内部各点温度依次开始受到热传导的影响。其中, 距离激光初始作用位置  $1 \mu\text{m}$  处在  $0.02 \text{ ms}$  时刻达到最高温度, 最高温度为 322 K。随后, 由于炸药内热传导持续的作用, 其温度开始降低。距离飞秒

激光初始作用位置的  $5\ \mu\text{m}$  和  $20\ \mu\text{m}$  处, 在温度达到最大值 ( $303.7\ \text{K}$  和  $300.8\ \text{K}$ ) 后, 同样在热传导持续的作用下, 温度逐渐降低。结合图 3 可知, 各点的温度变化过程均是先迅速升高后缓慢下降, 温度下降过程相较于温度上升的过程持续时间更长, 这是由于炸药的热导率相对较低所致。本研究计算处的温度较低<sup>[9]</sup>, 这是由于忽略了等离子体的热作用所致。

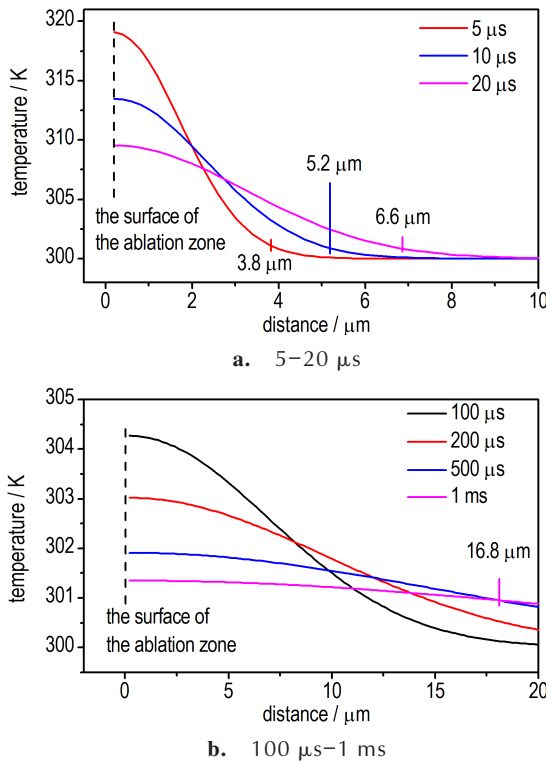


图 3 飞秒激光作用下 TNT 内温度随时间变化曲线图  
Fig.3 Temperature changes over time in TNT under the effect of fs laser

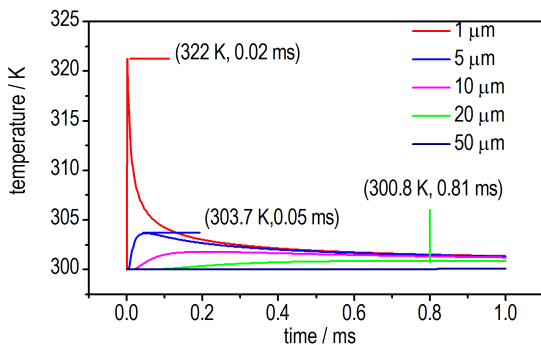


图 4 飞秒激光作用下 TNT 内不同位置温度随时间的变化曲线  
Fig.4 Temperature of different position changes over time in TNT under the effect of fs laser

### 3.2 飞秒激光脉冲序列烧蚀炸药的计算结果分析

图 5 是频率为  $1 \times 10^3\ \text{Hz}$  (脉冲间隔时间为  $1\ \text{ms}$ )

的 30 束飞秒激光脉冲序列作用 TNT 后, 炸药内部不同位置温度随时间的变化曲线。由图 5 可知, 在飞秒激光能量, 炸药自热反应放热和热传导的共同作用下, 炸药内部温度以震荡形式不断上升, 这种震荡现象与 Eaton 等<sup>[17]</sup> 的计算飞秒激光脉冲序列烧蚀硅的结果一致。其中, 在第 4 束飞秒脉冲激光作用后, 距离炸药表面  $1\ \mu\text{m}$  处位置的炸药被烧蚀。随着烧蚀深度不断加深, 飞秒激光对炸药的加工位置逐渐向  $5\ \mu\text{m}$  处靠近, 导致炸药内  $5\ \mu\text{m}$  处的热累积效应逐渐增加, 具体表现为第 19 束飞秒激光对  $5\ \mu\text{m}$  处的热累积效应升温已由第 1 束的  $3.5\ \text{K}$  增至  $10\ \text{K}$ 。在第 20 束飞秒激光作用后, 距离炸药表面  $5\ \mu\text{m}$  处位置的炸药被烧蚀。而距离飞秒激光加工位置越远, 温度升高速率越慢, 受到的热影响也越小, 但随着烧蚀位置在轴向方向的不断深入, 其受到的热影响逐渐增大。由计算结果可知, 30 束飞秒激光作用后, 对 TNT 的烧蚀深度为  $7.66\ \mu\text{m}$ , 平均烧蚀深度为  $0.25\ \mu\text{m}$ , 这与 Michael 等<sup>[16]</sup> 的实验测量结果一致 (飞秒激光功率密度大于  $1 \times 10^{12}\ \text{W} \cdot \text{cm}^{-2}$ , 平均烧蚀深度小于  $1\ \mu\text{m}$ ), 表明本研究的计算模型是相对可靠的。

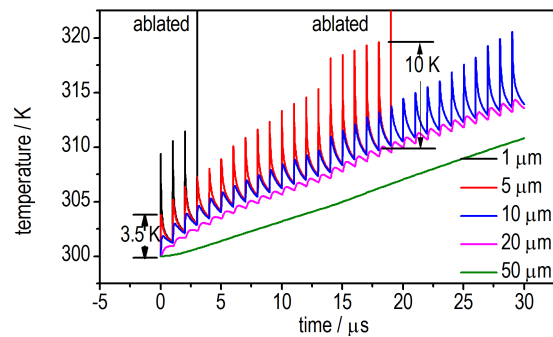


图 5 飞秒激光脉冲序列作用下 TNT 不同位置温度随时间变化曲线  
Fig.5 Temperature of different position changes over time in TNT under the effect of fs laser sequence

图 6 是频率为  $1 \times 10^5\ \text{Hz}$  和  $2 \times 10^5\ \text{Hz}$  的飞秒激光脉冲序列 (间隔时间分别为  $10\ \mu\text{s}$  和  $5\ \mu\text{s}$ ) 作用下, TNT 内部不同位置温度随时间变化曲线。由图 6 可知, 相比于频率为  $1 \times 10^3\ \text{Hz}$  的低频情况, 在频率为  $1 \times 10^5\ \text{Hz}$  和  $2 \times 10^5\ \text{Hz}$  的飞秒激光脉冲序列作用炸药后, 靠近飞秒激光作用位置 ( $1\ \mu\text{m}$ ,  $5\ \mu\text{m}$ ,  $10\ \mu\text{m}$ ,  $20\ \mu\text{m}$ ) 升温速率更高, 且频率为  $2 \times 10^5\ \text{Hz}$  的情况升温速率最高, 这使得烧蚀效率最高。以  $10\ \mu\text{m}$  处为例, 烧蚀所需的脉冲数分别为 23 束 ( $1 \times 10^5\ \text{Hz}$ ) 和 18 束 ( $2 \times 10^5\ \text{Hz}$ ), 而频率为  $1 \times 10^3\ \text{Hz}$  的飞秒激光作用

30束后, 10 μm处还未被烧蚀。结合图3可知, 高频的飞秒激光脉冲序列中激光的间隔时间较短, 热量还未明显向炸药内部传导, 后一束激光便已经作用, 这降低了热量传导的损耗, 增大了炸药升温速率, 从而使热累积效应更明显。而在轴向方向 50 μm位置处的炸药未受到热传导作用, 这是由于总的热传导时间较短, 热量还未传导至该处所致。

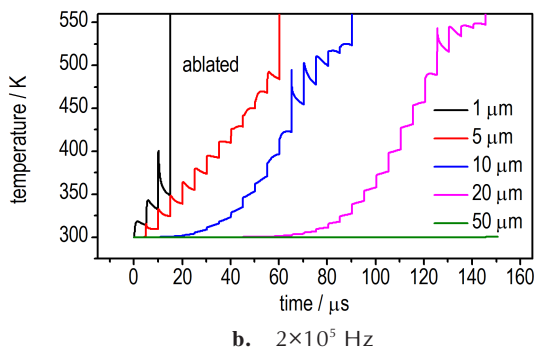
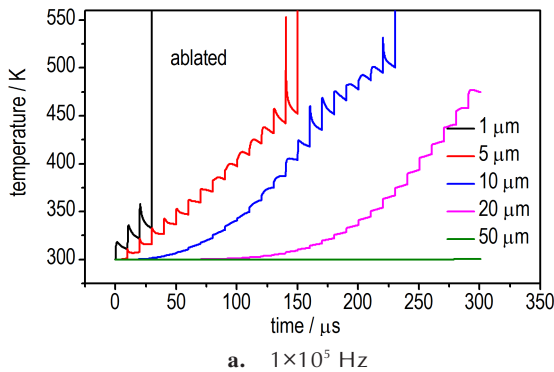


图6 不同频率飞秒激光脉冲序列作用下TNT不同位置温度随时间变化曲线

Fig.6 Temperature of different position changes over time in TNT under the effect of different frequencies fs laser sequence

表5为三种频率的30束飞秒激光脉冲序列作用下, TNT被烧蚀的深度。由表5可知, 增大飞秒脉冲激光的频率, 会增大炸药被烧蚀的深度, 从而提升飞秒激光的烧蚀效率。由图3和图6可知, 这是由于高频飞秒激光脉冲序列可以降低热量传导的损耗, 使热累积效应增大所致。

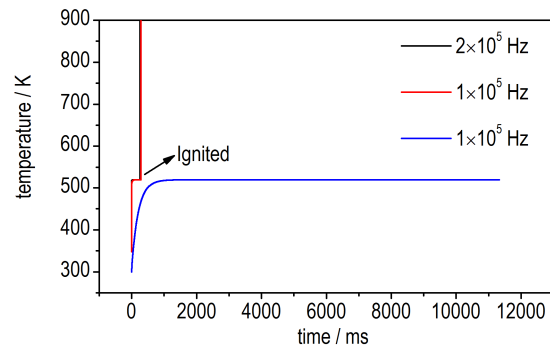
在三种不同频率的飞秒激光脉冲序列长时间的作用下, TNT表面温度随时间的变化曲线如图7所示。由图7a可知, 在本研究的计算时间范围(约11s)内, 相较于频率为 $1 \times 10^3$  Hz的低频情况, 在两种频率较高( $1 \times 10^5$  Hz和 $2 \times 10^5$  Hz)的飞秒激光脉冲序列作用下, TNT均发生了点火反应(炸药表面温度发生了急剧上

升)。同时, 由图7b可知, 频率为 $2 \times 10^5$  Hz的飞秒激光脉冲序列对TNT的点火时间(50768束激光作用后)早于频率为 $1 \times 10^5$  Hz时(28199束)。这表明, 飞秒激光脉冲序列的频率会显著影响飞秒激光对炸药的加工结果。这是由于高频飞秒激光脉冲序列作用炸药后的热累积效应更明显所致。由此可知, 在实际的加工过程中, 为了避免炸药发生明显的自热反应而造成危险, 应该选择频率较低的飞秒激光脉冲序列对其进行加工。

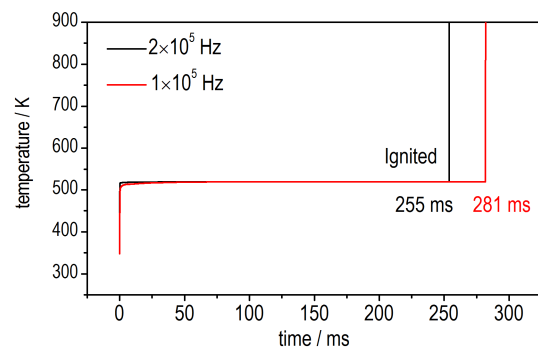
表5 飞秒激光脉冲序列作用下TNT的烧蚀深度

Table 5 The ablation depth of TNT under the effect of fs laser sequence

frequency / Hz	average ablation depth / μm	total ablation depth / μm
$1 \times 10^3$	0.25	7.66
$1 \times 10^5$	0.49	14.8
$2 \times 10^5$	0.73	21.9



a. three different frequencies



b.  $1 \times 10^5$  Hz and  $2 \times 10^5$  Hz

图7 不同频率飞秒激光脉冲序列作用下TNT表面温度随时间变化曲线

Fig.7 Temperature of the surface of TNT changes over time under the effect of different frequencies fs laser sequence

### 3.3 飞秒激光脉冲序列对不同炸药的烧蚀情况

不同炸药具有不同的自热反应放热量(当Q为

正)和热扩散系数。自热反应的放热量会影响炸药在被加工过程中受热时释放的能量大小,而热扩散系数会影响热量在炸药中的传导速率。因此,飞秒激光脉冲序列对不同炸药的加工情况有所不同。以TNT, TATB和HMX三种炸药为例进行计算。炸药的自热反应放热量如表1~表3所示,热扩散系数见表6。由表1~表3和表6可知,在三种炸药中,TATB自热反应的放热量最小,热扩散系数最大;HMX自热反应的放热量最大,热扩散系数最小。

表6 三种炸药的热扩散系数

Table 6 The thermal diffusion coefficient of TNT, TATB and HMX

explosive	thermal diffusion coefficient / $\text{m}^2 \cdot \text{s}$
TNT	$2.29 \times 10^{-7}$
TATB	$2.40 \times 10^{-7}$
HMX	$1.72 \times 10^{-7}$

图8为三种炸药在单脉冲飞秒激光作用后的10  $\mu\text{s}$ 时刻,炸药内部的温度分布图。由图8可知,HMX烧蚀坑表面的温度最高,热传导距离最短,为4.4  $\mu\text{m}$ ,这是由于HMX自热反应的放热量最大,热扩散系数最小所致;相反,TATB烧蚀坑表面的温度最低,热传导距离最大,为5.6  $\mu\text{m}$ ,这是由于TATB自热反应的放热量最小,热扩散系数最大所致。

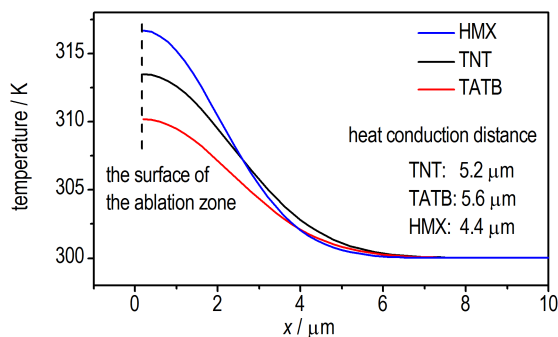
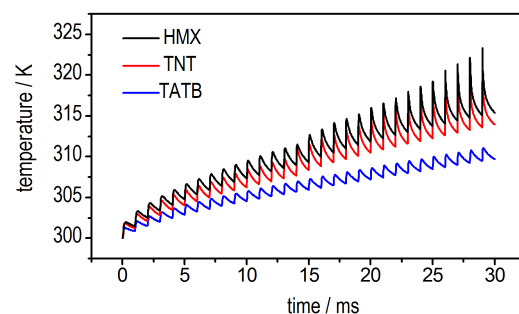


图8 飞秒激光作用下三种炸药内部的温度分布图

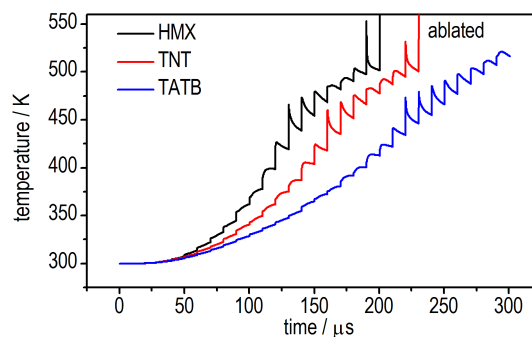
Fig.8 Temperature changes over time in the three explosives under the effect of fs laser

图9是在三种不同频率飞秒激光脉冲序列作用下,三种炸药内部10  $\mu\text{m}$ 处温度随时间的变化曲线。由图9可知,与飞秒激光加工TNT类似,在相同位置,其温度变化趋势基本一致,均随脉冲数的增加而呈震荡升高趋势。其中,在飞秒激光脉冲序列频率一致的情况下,HMX的升温速率最快,热累积效应最明显。这是由于HMX自热反应的放热量最大、热扩散系数

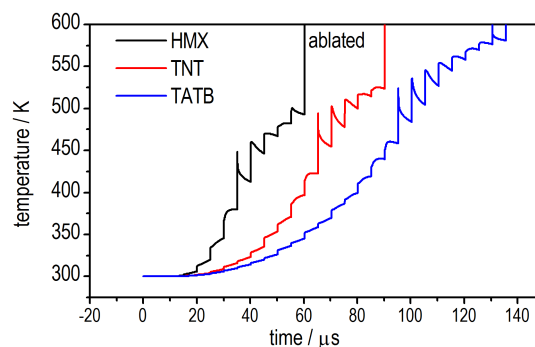
小所致。而TATB的升温速率慢,热累积效应最弱。这是由于TATB自热反应的放热量最小,热扩散系数最大所致。



a.  $1 \times 10^3$  Hz



b.  $1 \times 10^5$  Hz



c.  $2 \times 10^5$  Hz

图9 不同频率飞秒激光脉冲序列作用下三种炸药内部温度随时间变化曲线

Fig.9 Temperature changes over time in the three explosives under the effect of different frequencies fs laser sequence

表7是三种不同频率的30束飞秒激光脉冲序列作用下,三种炸药被烧蚀的深度。由表7可知,三种炸药被烧蚀的深度各不相同,其中,HMX被烧蚀深度最大,而TATB被烧蚀的深度最小。结合图9和表7可知,这同样是由于炸药的自热反应放热量和热扩散系数不同所致。在飞秒激光脉冲序列频率一致的情况

表7 不同频率的飞秒激光脉冲序列对三种炸药的烧蚀深度

Table 7 The ablation depth of TNT, TATB and HMX under the effect of different frequencies fs laser sequence

frequency / Hz	$1 \times 10^3$			$1 \times 10^5$			$2 \times 10^5$		
	TNT	TATB	HMX	TNT	TATB	HMX	TNT	TATB	HMX
explosive									
average ablation depth / $\mu\text{m}$	0.25	0.17	0.26	0.49	0.27	0.59	0.73	0.40	0.74
total ablation depth / $\mu\text{m}$	7.66	5.24	7.95	14.8	8.21	17.9	21.9	12.1	22.2

下,炸药的自热反应放热量越大、热扩散系数越小,炸药内部的热累积效应越明显,被烧蚀深度也越大。

图10是在三种不同频率的飞秒激光脉冲序列长

时间的作用下,三种炸药表面温度随时间的变化曲线。由图10可知,在本研究的计算时间范围(约11 s)内,在三种频率的飞秒激光脉冲序列作用下,HMX均发生了点火。飞秒激光脉冲序列频率为 $2 \times 10^5$  Hz时,点火时间为71 ms(28850束飞秒激光作用后);频率为 $1 \times 10^5$  Hz时,点火时间为157 ms(15805束);频率为 $1 \times 10^3$  Hz时,点火时间为797 ms(797束);这是由于HMX的热累积效应最明显所致。相反,TATB的热累积效应最弱,因此TATB在三种频率的飞秒激光脉冲序列长时间的加工下均未发生点火。TNT在 $2 \times 10^5$  Hz和 $1 \times 10^5$  Hz两种高频飞秒激光脉冲序列作用下发生了点火,点火时间分别为253 ms(50789束)和281 ms(28199束),且点火时间较HMX更晚。但在频率较低的 $1 \times 10^3$  Hz飞秒激光脉冲序列作用下,并未发生点火。这是由于TNT自热反应的放热量和热扩散系数分别介于HMX和TATB的之间所致。由此说明,在飞秒激光脉冲序列频率一致的情况下,炸药自热反应的放热量和热扩散系数的不同,会显著影响飞秒激光脉冲序列对炸药的加工情况。炸药自热反应的放热量越大、热扩散系数越小,会导致炸药的热累积效应更明显,从而更容易发生点火。因此,在实际的加工过程中,特别是加工那些自热反应放热量较大和热扩散系数较小的炸药,为了避免炸药发生明显自热反应造成危险,应选用频率较低的飞秒激光脉冲序列对其进行加工。

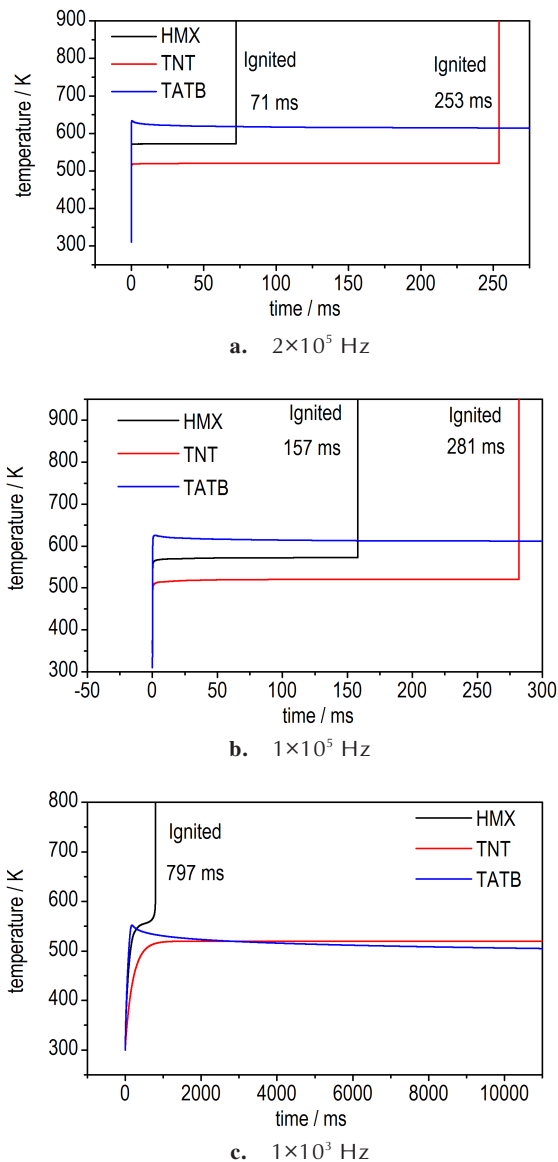


图10 不同频率飞秒激光脉冲序列作用下三种炸药表面温度随时间变化曲线

Fig. 10 Temperature of the three different explosive surfaces changes over time under the effect of different frequencies fs laser sequence

## 4 结论

建立了飞秒激光脉冲序列加工炸药的一维数值计算模型,考虑了炸药在受热条件下的自热反应放热。对飞秒激光脉冲序列加工三种自热反应放热量和热扩散系数不同炸药的过程进行了计算。得到了不同频率的飞秒激光脉冲序列对炸药的加工情况。讨论了自热反应放热量和热扩散系数对加工结果的影响,给出了飞秒激光脉冲序列频率选择的理论依据。主要得到以下结论:



(1)飞秒激光脉冲序列的频率、炸药自热反应的放热量和热扩散系数会影响加工结果。

(2)在本研究的计算时间范围(约11 s)内,HMX在三种频率的飞秒激光脉冲序列作用下均发生了点火,这是由于HMX自热反应的放热量最大,热扩散系数最小,热累积效应最明显所致。相反,TATB在三种频率的飞秒激光脉冲序列下加工下均未发生点火,这是由于TATB的热累积效应最弱所致。而TNT的热累积效应介于HMX和TATB之间,因此TNT只在频率较高的飞秒激光脉冲序列作用下才发生点火。

(3)在实际的飞秒激光脉冲序列加工炸药的过程中,特别是自热反应放热量较大和热扩散系数较小的炸药,为了避免在加工过程中发生危险,应尽量选用频率较低的飞秒激光脉冲序列对其进行加工。

#### 参考文献:

- [1] 杨建军. 飞秒激光超精细“冷”加工技术及其应用(续)[J]. 激光与光电子学进展, 2004, 41(4): 42-52.  
YANG Jian-jun. Femtosecond laser “cold” micro-machining and its advanced applications [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2004, 41(4): 42-52.
- [2] 吴东江, 周思雨, 马广义, 等. 飞秒激光精密减薄石英玻璃凹槽实验[J]. 中国激光, 2015, 42(3): 0303009(1-7).  
WU Dong-jiang, ZHOU Si-yu, MA Guang-yi, et al. Experiment of quartz glass flute precise thinning by femtosecond laser [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2015, 42(3): 0303009(1-7).
- [3] Chin A H, Schoenlein R W, Glover T E, et al. Ultrafast structural dynamics in InSb probed by time-resolved X-ray diffraction [J]. *Physical Review Letters*, 1999, 83: 336-339.
- [4] Roeske F J, Banks R E, Armstrong J P, et al. Laser cutting of pressed explosives [R]. UCRL-JC-128373 Rev 1, 1998.
- [5] Palmer J A, Welle E J. An ultrashort pulse laser lathe for axisymmetric micromachining of explosives [J]. *Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering*, 2007, 6460: 6460151-6460157.
- [6] Mcgrane S D, Grieco A, Ramos K J, et al. Femtosecond micromachining of internal voids in high explosive crystals for studies of hot spot initiation [J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, 105: 0735051-0735057.
- [7] 陈明华, 卢斌, 李东阳, 等. 飞秒激光对Mg/PTFE药剂加工过程安全性分析[J]. 激光与红外, 2007, 37(3): 214-216.  
CHEN Ming-hua, LU Bin, LI Dong-yang, et al. Security analysis on ablation process of pyrotechnics by femtosecond laser [J]. *Laser & Infrared*, 2007, 37(3): 214-216.
- [8] 陈明华, 高敏, 张国安, 等. 飞秒激光对发射药切割过程的热分析[J]. 光电技术应用, 2006, 21(4): 4-6.  
CHEN Ming-hua, GAO Min, ZHANG Guo-an, et al. Thermal analysis on ablation of propellant by femtosecond Laser [J]. *Electro-Optic Technology Application*, 2006, 21(4): 4-6.
- [9] 刘嘉锡, 伍俊英, 杨利军, 等. 单脉冲飞秒激光烧蚀炸药过程的热效应研究[J]. 强激光与粒子束, 2020, 32(7): 071007(1-9).  
LIU Jia-xi, WU Jun-ying, YANG Li-jun, et al. Analysis of thermal effect on explosives of single-pulse femtosecond laser ablation [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2020, 32(7): 071007(1-9).
- [10] WU Jun-ying, YANG Li-jun, LI Yao-jiang, et al. Microscopic Mechanisms of Femtosecond Laser Ablation of HMX from Reactive Molecular Dynamics Simulations [J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 2020, 124, 11681-11693.
- [11] McGuire R R, Tarver C M. Chemical-decomposition models for the thermal explosion of confined HMX, TATB, RDX, and TNT explosives [C]// Proceeding of the 7th international Detonation Symposium, 1981.
- [12] Tarver C M, Koerner J G. Effects of endothermic binders on times to explosion of HMX- and TATB-based plastic bonded explosives [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2007, 26(1): 1-28.
- [13] Tarver C M, Tran T D. Thermal decomposition models for HMX-based plastic bonded explosives [J]. *Combustion & Flame*, 2004, 137: 50-62.
- [14] 郑艳丽, 杜大焦, 束庆邦, 等. 不同气流环境下激光辐照金属材料温升的数值模拟[J]. 强激光与粒子束, 2010, 22(11): 2531-2534.  
ZHENG Yan-li, DU Da-jiao, DONG Qing-bang, et al. Numerical simulation of thermal effect on metal irradiated by high-power laser beam in different airflow [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2010, 22(11): 2531-2534.
- [15] 石卫波, 李四新, 肖雨, 等. 气动加热对高超声速飞行器激光毁伤效应影响[J]. 强激光与粒子束, 2010, 22(6): 1215-1218.  
SHI Wei-bo, LI Si-xin, XIAO Yu, et al. Laser lethality of hypersonic vehicles under aero-heating [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2010, 22(6): 1215-1218.
- [16] Michael D P, C Stuart, P S, Banks, et al. Laser machining of explosives: US 6150630 [P]. 2000-11-21.
- [17] Eaton S M, ZHANG Hai-bin, Herman P R. Heat accumulation effects in femtosecond laser-written waveguides with variable repetition rate [J]. *Optical Express*, 2005, 13(12): 4708-4716.

## Numerical Calculation of the Safety of Processing Explosives with Femtosecond Laser Sequence with Different Frequencies

WU Jun-ying, LIU Jia-xi, YANG Li-jun, LI Yao-jiang, WU Jiao-jiao, CHEN Lang

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** In order to study the safety of processing explosives with femtosecond laser, a calculation model of femtosecond laser sequence machining on explosives was established, which took into account the autothermal reaction of the explosives. The processes of femtosecond laser sequence machining on three different explosives (TNT, TATB and HMX) were calculated. The safety of these processes was analyzed. Results show that the frequencies of the femtosecond laser sequence, the heat release of the autothermal reaction and the thermal diffusion coefficient of explosives will affect processing safety. Among these three explosives, the heat release of the autothermal reaction of HMX is the largest, and its thermal diffusion coefficient is the smallest, so its heat accumulation effect is the most significant. Therefore, HMX is ignited when processing with all the three femtosecond sequences with different frequencies ( $1 \times 10^3$  Hz,  $1 \times 10^5$  Hz and  $2 \times 10^5$  Hz). On the contrary, the heat accumulation effect of TATB is the weakest, so no ignition occurs when processing with the three femtosecond sequence with different frequencies. The heat accumulation effect of TNT is between those of HMX and TATB, so ignition only occurs when using the femtosecond laser sequence with higher frequencies. In the actual machining process, especially for the explosives with greater heat release of the autothermal reaction and smaller thermal diffusion coefficient, femtosecond laser sequence with low frequency should be selected to ensure safety.

**Key words:** femtosecond laser; laser sequence with different frequencies; laser processing; explosive; numerical calculation

**CLC number:** TJ55

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2020183

(责编:王艳秀)