

文章编号: 1006-9941(2026)02-0111-11

中等冲击强度载荷下 HMX 晶体预制孔洞塌缩及热点生成机制研究

张可, 谢斐骏, 杨晓媛, 李晶, 马云灿, 马骁

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: “热点”是引发炸药冲击起爆或非冲击点火的关键诱因, 而孔洞塌缩是其主要生成机制之一。鉴于炸药在实际服役中常承受 1~10 GPa 范围的中等冲击强度载荷, 亟需深入理解该强度区间内孔洞缺陷演化与热点生成规律。本文以含直径 300 μm 预制孔洞的奥克托今(HMX)晶体为研究对象, 采用 X-Pinch 与可见光联合成像实验捕捉孔洞塌缩的动态过程, 并结合考虑塑性功向热能转化的力-热耦合数值模拟, 揭示了孔洞塌缩模式与热点生成机制。结果表明, 在 2.5 GPa 冲击下, 孔洞呈现各向同性周向塌缩, 热点发光强度与塌缩程度呈正相关, 升温过程分为两个阶段, 即上游粘塑性变形引起的温度缓升和塌缩闭合时颗粒碰撞导致的温度骤升; 当冲击强度增至 3.5 GPa 时, 孔洞塌缩起始时间提前, 月牙状形变更显著, 力学响应呈现流体化特征, 预示塌缩模式向射流冲击转变。

关键词: 奥克托今(HMX)晶体; 孔洞; 塌缩机制; 热点

中图分类号: TJ55; O369

文献标志码: A

DOI: 10.11943/CJEM2025261

0 引言

含能材料在制备、贮存及使用过程中难免引入孔洞等微观缺陷, 这些缺陷在冲击载荷作用下, 会通过能量局域化形成“热点”, 成为意外点火或爆炸的主要诱因^[1]。因此阐明材料微观缺陷与热点生成之间的物理机制是评估与提升含能材料安全性的核心科学问题之一。

在诸多缺陷类型中, 孔洞塌缩被公认为是热点生成的关键机制^[2]。其经典理论认为, 热点主要源于孔洞塌缩过程中的气体绝热压缩、材料粘塑性耗散热以及高速微射流冲击等多种物理化学效应的耦合^[3-8]。为揭示这一复杂过程, 国内外学者广泛采用实验与模

拟相结合的研究手段。

在含能材料孔洞塌缩的实验研究中, 学者们取得显著进展: Bourne 等^[7]对含预制孔洞的乳化硝酸铵炸药薄片进行飞片冲击试验(冲击强度为 0.26 GPa), 通过高速摄影观察孔洞演化过程证实射流冲击是点火主因。Ramos 等^[9]利用先进光子源 X 射线相衬成像技术观测到冲击强度 2 GPa 下乙酰氨基酚晶体(炸药替代材料)内孔洞塌缩和材料喷射; Sandberg 等^[10]通过直线加速器相干光源实现太安炸药(PETN)晶体中 10 μm 孔洞塌缩动态成像。傅华等^[11]结合显微高速摄影与快响应热电偶测温技术, 建立亚毫米级炸药冲击响应测试方法, 实时观测了高聚物黏结炸药(PBX)中 500 μm 预制孔洞动态塌缩过程。Ma 等^[12-14]研究表明: 炸药模拟物聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)中孔洞在激光驱动百 MPa 以下冲击时压缩波绕行无损伤, 而分离式霍普金森压杆(SHPB)百 MPa 以上冲击则诱发裂纹扩展破坏。Duarte 等^[15]对含 500 μm 预制孔洞的奥克托今(HMX)单晶开展冲击实验(强度约 0.6 GPa), 校准了考虑塑性和热传导的数值模型, 对孔洞塌缩过程中的形貌动态演化及闭合速率进行了研究。Rai 等^[16]开展 1.21, 1.84, 4.10, 16.60 GPa 冲击强度下的实验研究, 利用超高速 X 射线成像捕捉 PMMA 毫米级球形孔洞

收稿日期: 2025-12-14; 修回日期: 2026-02-23

网络出版日期: 2026-02-10

基金项目: 挑战专题资助(TZ2025001); 国家自然科学基金资助(11902306)

作者简介: 张可(2000-), 男, 研究实习员, 主要从事化爆安全性研究。e-mail: zk_901@163.com

通信联系人: 马骁(1990-), 男, 副研究员, 主要从事化爆安全性研究。e-mail: maxiao_nwpu@163.com

杨晓媛(1995-), 女, 助理研究员, 主要从事炸药点火反应研究。e-mail: yangxy9103@163.com

引用本文: 张可, 谢斐骏, 杨晓媛, 等. 中等冲击强度载荷下 HMX 晶体预制孔洞塌缩及热点生成机制研究[J]. 含能材料, 2026, 34(2):111-121.

ZHANG Ke, XIE Fei-jun, YANG Xiao-yuan, et al. Pore Collapse and Hot Spot Formation Mechanisms in HMX Crystals under Moderate Shock Pressure[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2026, 34(2):111-121.

塌缩行为。Escariza等^[17]采用多兆赫兹相衬成像技术,在0.49~16.60 GPa冲击压力下观测PMMA中毫米级预制孔洞塌缩过程,发现低冲击压力下材料强度主导塌缩特征,高载荷下呈现流体动力学响应。Sorensen等^[18]结合相位衬度成像技术(冲击压力1.1, 0.48, 0.54, 0.98 GPa),揭示HMX单晶中500 μm 孔洞兼具射流与粘塑性的复合塌缩特征。综上所述,实验研究在从替代材料到真实炸药、从低速到高速冲击的观测中均取得了关键认识。然而,现有工作较少同时获取孔洞形貌演化与热点发光的全过程时空关联数据,因而对塌缩模式随压力变化的连续演化规律及微观热力耦合机制仍缺乏系统性揭示。

在数值模拟研究方面,学者们通过多种计算方法系统探索了含能材料中孔洞缺陷的冲击响应机制。Bourne等^[19]对多材料在0.3 GPa和3 GPa冲击下的孔洞塌缩进行多物质欧拉流体动力学模拟,证实射流冲击是点火主导机制。Menikoff等^[20]基于完整状态方程模拟含预制圆孔缺陷HMX单晶的冲击响应,表明冲击速度小于 $1 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,冲击耗散不足以直接点燃HMX,塑性功与粘性加热可能是点火的主要能量来源。Barton等^[21]通过有限元法结合分子动力学与实验数据校准HMX晶体的微观模型,表明冲击强度约10 GPa时孔洞附近生成高温剪切带。傅华等^[22]对HMX晶体采用离散元法模拟,证明较低冲击下孔洞边缘剪切变形以粘塑性功主导热点,较高冲击下射流冲击孔洞下壁面导致热点产生。Austin等^[23]利用有限元法耦合力响应与温度场驱动的化学反应模拟HMX晶体孔洞塌缩,发现冲击强度为6.5, 9.4, 10.7 GPa时缺陷附近高温剪切带可能是热点区域。Eason和Sewell^[24]采用分子动力学法分别模拟了含能材料(α -RDX)取向单晶中圆柱形孔洞在9.71, 24.00, 42.48 GPa冲击压力下的塌缩行为。结果表明,不同冲击压力下孔洞塌缩模式不同。Springer等^[25]通过有限元法模拟了冲击压力对HMX中热点形成与生长的影响,发现冲击压力为2.9, 4.5, 8.7 GPa时粘性主导塌缩伴随剪切带,而21 GPa和41 GPa时转为流体动力学主导。Wood等^[26]利用流体动力学和反应分子动力学分析HMX晶体孔洞塌缩热点形成规律。Michael等^[27-28]在惰性和反应性模拟中发现冲击压力10.98 GPa时液态硝基甲烷中热点温度比整体温度高两倍以上。Rai和Udaykumar^[29]采用有限体积法数值模拟冲击作用下HMX中的孔洞塌缩,划分塑性塌缩与流体动力学射流主导区域。周茂^[30]采用格点-弹簧模型模拟含孔洞

HMX晶体,证实孔洞尺寸、位置和形状影响塌缩过程的温升情况。Wang等^[31]建立HMX单晶热-力-化学模型,揭示冲击压力3.4, 8.8, 23.8 GPa下塌缩模式随压力增大从位错滑移演化为流体动力学射流。刘纯等^[32]对PBX中椭圆形孔洞进行有限元模拟,结果表明冲击压力3.6 GPa时孔洞摆放位置对热点温度有较大影响。Ding等^[33]利用基于原子模拟的位错塑性模型对含纳米孔洞的HMX单晶进行研究表明:冲击压力为2.92 GPa与8.81 GPa时粘塑性功是主导机制,而冲击压力为23.5 GPa时主导机制转变为喷射物撞击。周婷婷和楼建锋^[34]采用分子动力学和ReaxFF反应力场模拟含圆柱形孔洞的HMX单晶的动态响应,表明13 GPa冲击下流动原子与下游碰撞导致热点生成。王茂杰等^[35]采用点火增长模型和S-ALE算法对含孔洞Comp.B炸药动态响应进行模拟,发现冲击压力大于20 GPa时微射流冲击导致热点生成,孔洞大小影响热点特性。总体而言,数值模拟极大地深化了对孔洞塌缩物理图像和机制转化的认识,尤其在极端压力条件下的机制区分已较为清晰。然而,现有模型对中等压力区间的预测,仍缺乏与之匹配的高分辨率实验观测进行充分的验证与协同分析,导致对该区间塌缩模式及力-热耦合机制的认识存在不确定性。

综上所述,关于含能材料孔洞塌缩已开展了大量的研究。然而,炸药实际服役常处于中等冲击强度(1~10 GPa)区间,此范围内孔洞塌缩既非纯固体力学行为,亦未完全流体化,其孔洞演化行为与热点生成机制尚不清晰。尽管少数研究^[18, 22, 32]触及该区间,但多聚焦特定压力点或简化材料模型,缺乏对塌缩模式演化规律的系统揭示,尤其缺少高时空分辨实验与力-热耦合模拟的协同验证。针对上述不足,本文以含直径300 μm 预制孔洞的HMX晶体为对象,通过X射线与可见光高速成像实验,并结合力-热耦合数值模拟,创新性地实现了对中等冲击压力下孔洞动态塌缩过程与热点发光时空演化的原位关联捕捉,系统阐述了该压力区间内孔洞塌缩行为与热力耦合机制的演变规律,并通过量化分析机械能向热能的转换过程,为深入理解热点生成机理提供了可靠的实验与理论依据。

1 实验部分

1.1 实验样品

本研究以奥克托今(HMX)晶体为实验材料。大尺

寸 HMX 晶体采用缓慢溶剂蒸发法制备:将 HMX 饱和溶液置于恒温密闭容器中,通过精确控制蒸发速率与温度,在数周时间内使晶体逐渐生长,最终获得结构完整、内部缺陷较少的高质量晶体,其密度约为 $1.89 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。实验样品为 $5 \text{ mm}\times 2 \text{ mm}\times 2 \text{ mm}$ (长 \times 宽 \times 高)的长方体,其中 $5 \text{ mm}\times 2 \text{ mm}$ 的 (011) 晶面作为飞片撞击面,相对面用于制备预制孔洞。样品加工由中国工程物理研究院流体物理研究所加工中心完成,采用飞秒激光加工平台,通过损伤阈值标定确定了优化参数:单脉冲能量为 μJ 量级、峰值功率约 100 MW 、重复频率 200 kHz 。沿冲击方向预制三个直径 $300 \mu\text{m}$ 孔洞,横向间距 1.5 mm (如图 1 所示)。孔洞尺寸设计针对 HMX 晶体中天然存在的微米/亚微米级缺陷(孔洞/晶界等),通过单一缺陷尺度实现对孔洞塌缩机制的量化表征,其方法学依据与美国阿贡实验室在厘米级 HMX 晶体中预制 $500 \mu\text{m}$ 孔洞的研究一致^[15]。孔洞横向间距设计可避免冲击波相互干扰,确保单次实验中完整观测不同压缩状态下孔洞演化过程。

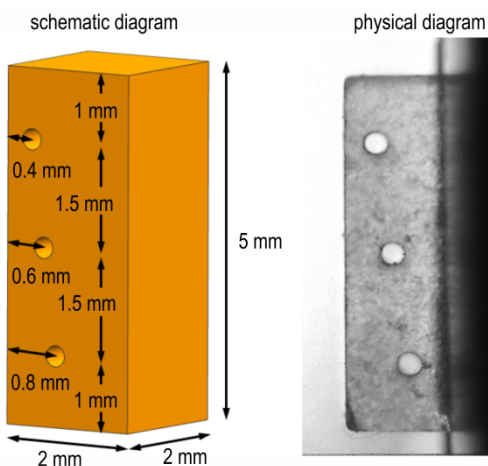


图 1 实验样品
Fig.1 Experimental specimen

1.2 实验装置

针对 $1\sim 10 \text{ GPa}$ 中等冲击下 HMX 晶体光学不透明导致的孔洞塌缩观测难题,本研究提出 X-Pinch 微焦点 X 光单帧成像与可见光分幅成像的联合实验方法。该方法通过 X 光获取塌缩形貌特征,结合分幅成像重建动态过程,以揭示孔洞演化与热点生成机制。

实验在中国工程物理研究院流体物理研究所的一级高压气炮平台上开展。该平台发射管内径为 10 mm ,最大驱动气压为 10 MPa ,可实现最高约 $1 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 的飞片速度。本实验中,采用气炮驱动飞片加载方式,飞片 (2A12 铝, $\Phi 10\times 0.5 \text{ mm}$) 以 $625 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 速度撞击样品,

产生峰值压力约 2.5 GPa 、脉宽约 168 ns 、波速约 $3.5 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ 的冲击波。该峰值压力、脉宽与波速等冲击波参数是基于飞片-样品冲击阻抗匹配原理,利用其 Hugoniot 关系理论计算得出^[36]。该压力点的选择旨在避开 HMX 晶体 $\beta\rightarrow\zeta$ 相变临界压力 ($4.6\sim 4.9 \text{ GPa}$)^[37-38],以避免相变导致的晶体密度和力学性能突变对孔洞塌缩过程的影响,同时考虑高压飞片冲击实验的成本与实现难度,优先确保关键压力点的数据可靠性。该方法具有飞行姿态可控、加载稳定性及测量精度高的优势。

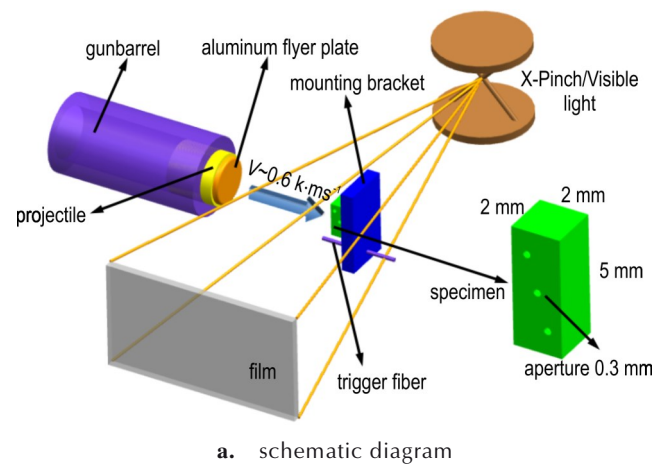


图 2 气炮加载 X-pinch/可见光动态成像实验系统
Fig.2 Gas gun loading X-pinch/visible light dynamic imaging experimental system

1.3 实验步骤

实验按以下时序执行:样品固定于真空靶室支架中心,光源距样品 50 mm ,距成像底片 375 mm ,成像几何放大倍数为 7.5 。触发光纤探针高出样品前表面 2.5 mm ,炮管及靶室全程维持真空环境。飞片射出后首先撞击光纤探针前表面,产生电信号触发 X-Pinch

系统或高速相机; X-Pinch 系统激发出 X 射线, 在底片记录冲击波传播至 HMX 样品时的瞬态形貌; 在严格保持相同加载强度 (弹速 $625 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) 和成像时刻条件下, 高速分幅相机以 $0.1 \mu\text{s}$ 帧间隔连续拍摄, 曝光时间为 60 ns , 捕捉含预制孔洞 HMX 的缺陷演化过程。

1.4 结果与讨论

1.4.1 孔洞塌缩模式

根据前述 X-pinch 成像装置, 首先对 HMX 晶体样品进行静态 X 光成像验证, 结果如图 3 所示。静态图像清晰显示孔洞直径均为 $300 \mu\text{m}$, 孔洞缺陷边缘轮廓分明, 表明成像系统分辨能力良好, 为后续动态冲击加载下孔洞塌缩力学行为的定量观测提供了可靠保障。

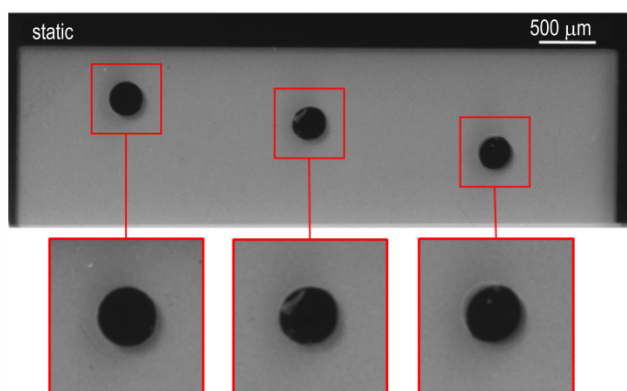


图 3 HMX 晶体静态 X 光图像

Fig.3 Static X-ray image of HMX crystals

在动态冲击实验中, 飞片速度稳定在约 $625 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。当飞片运动至触发光纤位置时, X-Pinch 系统启动放电、箍缩并辐射 X 光, 触发至成像的延迟时间约为 $0.224 \mu\text{s}$; 飞片继续向前飞行撞击 HMX 晶体, 动态加载图像清晰记录了孔洞在冲击波作用下的瞬态塌缩过程, 如图 4 所示。

基于动态加载图像 (图 4) 的观测结果, 距加载面

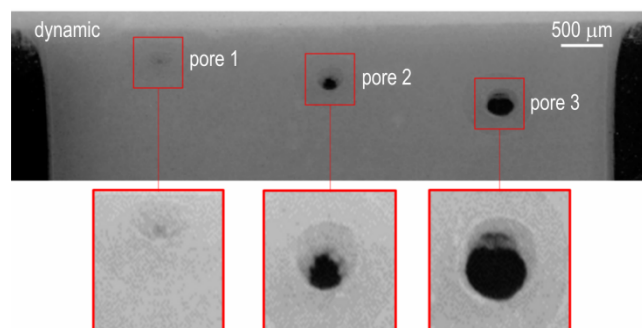


图 4 孔洞塌缩过程的 X 光图像

Fig.4 X-ray image of pore collapse process

由近及远的孔洞依次编号为孔 1 至孔 3。通过测量各孔洞在成像时刻的实际投影面积, 并与初始面积对比, 计算其面积塌缩率, 以定量表征孔洞塌缩程度。结果显示: 孔 1 塌缩率约为 95%, 已基本完成孔洞塌缩; 孔 2 塌缩率约为 60%, 呈现明显的各向同性塑性变形, 形貌近似椭圆状; 孔 3 塌缩率约 25%, 仍保持近似圆形但已发生轻微压缩。塌缩程度的梯度分布主要源于冲击波在传播过程中因几何扩散与材料阻尼导致的压力衰减。值得注意的是, 在该中等强度冲击加载条件下 ($\sim 625 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$), 所有孔洞塌缩模式均呈各向同性塌缩, 即呈径向收缩姿态发生塌缩。塌缩过程中孔洞边缘仍呈圆弧形, 并未观察到孔洞上游对下游产生明显的冲击现象。

1.4.2 热点生成及演化

由于 X 光成像无法直接观察到“热点”的生成和发光过程, 在保持相同加载条件与成像时刻的前提下, 采用可见光超高速分幅相机对 HMX 晶体中孔洞演化及热点自发光行为进行同步观测, 获得了相关物理图像。实验系统配置基本不变, 仅将触发光纤用于触发高速相机而非 X-Pinch 源。

图 5 展示了可见光背照明条件下 HMX 中孔洞缺陷的动态演化过程, 视场聚焦于靠近冲击面的孔 1 和孔 2 以提高形变分辨率。以飞片撞击样品为零时刻: 在 -100 ns 时刻 (撞击前), 孔洞清晰可见, 其周围存

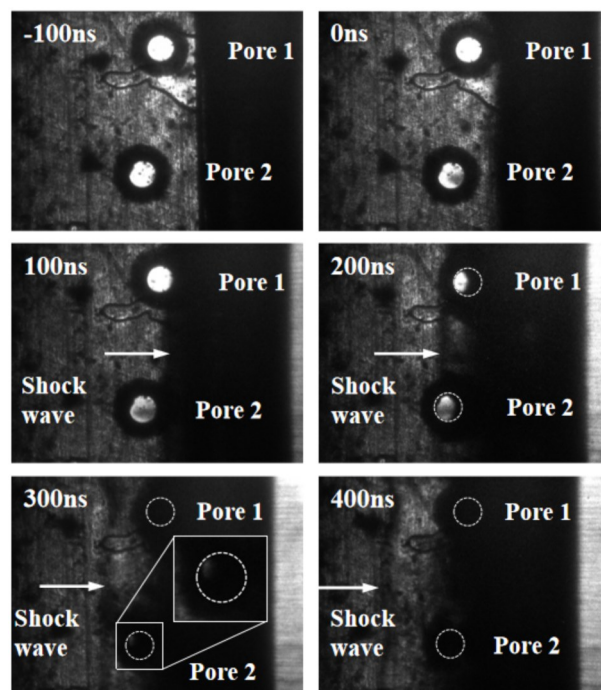


图 5 孔洞塌缩过程的可见光分幅图像 (有背照明)

Fig.5 Framing visible light image of pore collapse (Backlit)

在因加工残余应力集中形成的黑色环状区域;0 ns 时刻,飞片接触样品,激发出平面冲击波并在 HMX 样品中传播;100 ns 时刻,冲击波前沿传播至孔 1 约半深位置并到达孔 2 上游界面;200 ns 时刻,冲击波阵面位于白色箭头所示位置,两孔均呈现椭圆状各向同性塌缩;300 ns 时刻,孔 1 完全闭合,孔 2 仅存微量透光区域;至 400 ns 时刻,两孔均完全塌缩。该过程揭示了 HMX 晶体在冲击加载下孔洞塌缩的时空演化特征。

为排除背照明对 HMX 点火自发光观测的干扰,进一步在无背照明条件下利用高速分幅相机捕获热点点火过程。针对原始自发光图像信噪比较低的问题,采用如下图像增强流程提升可视化效果:首先读取原始图像并提取最大亮度值,以其平方根作为处理阈值;随后施加 7×7 高斯模糊滤波器进行平滑处理,并将低于阈值的像素置零以消除背景噪声;继而提取图像中面积最大及次大的两个有效发光区域轮廓;最后通过凸包(hull)拟合与贝塞尔曲线平滑优化轮廓形态,生成可视化结果。图 6 为静态照明下的样品参考图像,图 7 为无背照明条件下捕获的自发光原始图像及其处理结果。

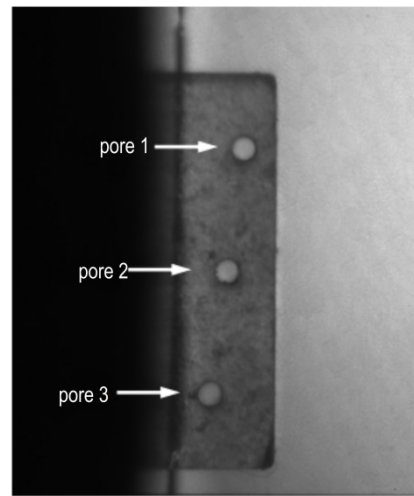


图 6 HMX 样品的静态图像(有背照明)
Fig.6 Static image of HMX specimen (Backlit)

在塌缩过程中,300 ns 时刻,孔 1、孔 2 和孔 3 处均观测到热点自发光现象。结合可见光图像可知,此时孔 1 已完全塌缩,孔 2 仅存微量透光区域,相应地,孔 1 处的发光强度显著高于孔 2,表明热点发光强度与孔洞塌缩程度呈正相关。至 400 ns 和 500 ns 时刻,孔 1 与孔 2 处发光区域面积扩大但强度明显衰减,而距离冲击面最远的孔 3 不再出现可探测的发光信号,这归

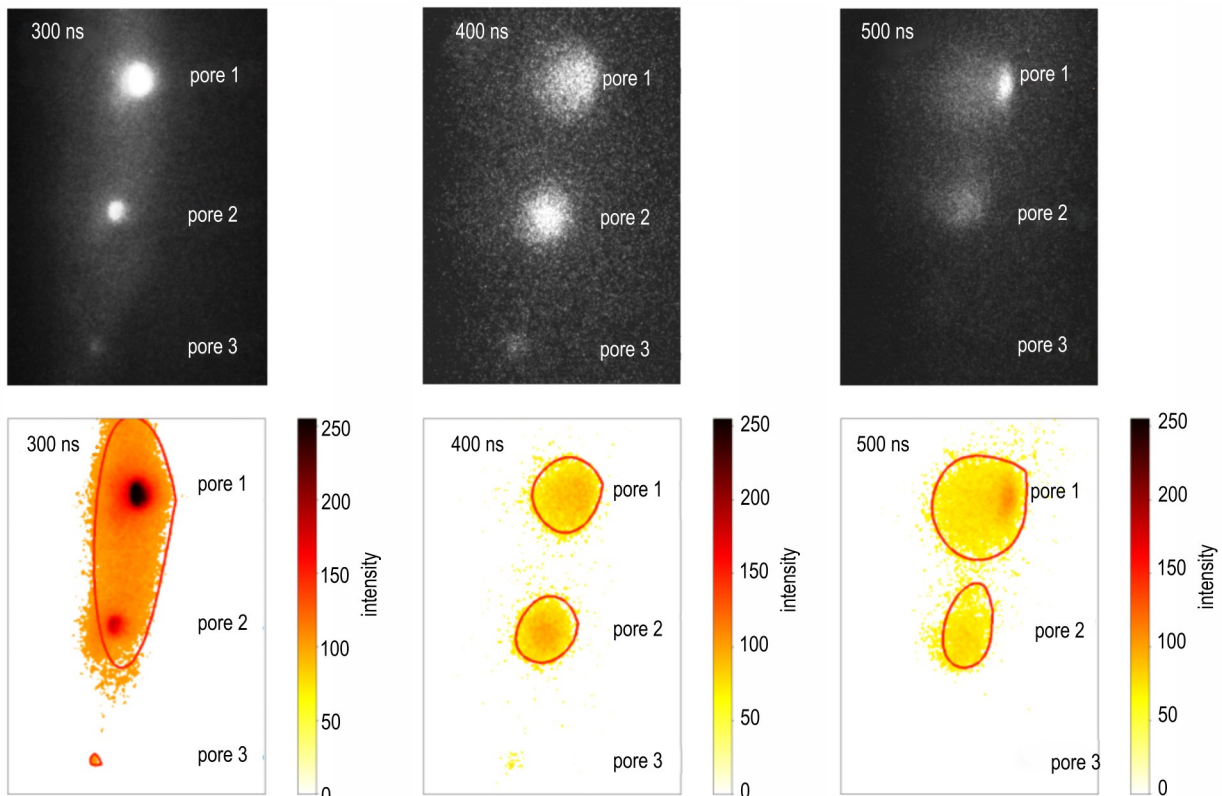


图 7 HMX 样品孔洞处热点自发光图像(无背照明)
Fig.7 Self-emission image of hotspot at pore in HMX specimen (No Backlight)

因于冲击波传播过程中的压力衰减与热能扩散耗散, 导致远端孔洞无法达到热点生成的临界温升条件。

与美国阿贡实验室的相关研究^[15]对比表明, 本研究在 $0.625 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ ($\sim 2.5 \text{ GPa}$) 冲击下观察到的各向同性塌缩, 与其低速度实验 ($0.1 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$) 结果一致, 但显著区别于其高速度模拟 ($1.0 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$) 预测的射流行为。值得指出的是, 与该研究^[15]中实验晶体取向不明确的情况相比, 本研究通过精确控制冲击晶面 (011 晶面), 实现了实验变量的精细化控制与标准化设计, 从而能够更准确地揭示力学载荷作用下的塌缩响应。这一结果填补了中等速度 (中等冲击强度) 区间的实验空白, 提示各向同性塌缩的临界速度 (冲击强度) 可能高于既往认知。此外, 本研究通过同步可见光成像直接捕获到热点发光强度与塌缩程度的正相关性, 提供了塌缩-热耦合机制的实验证据。

2 数值模拟

2.1 数值模拟方法

采用有限元软件 ABAQUS 的温度-位移耦合显式动力学模块开展数值模拟研究。通过施加与实验加载相符合的幅值和脉宽冲击波作为边界条件以省去复杂几何机械结构, 在合理简化条件下分析中等冲击时 HMX 晶体的力-热响应行为。鉴于拉格朗日框架下网格随体变形会导致大变形计算失效, 采用耦合欧拉-拉格朗日方法 (Coupled Euler-Lagrange, CEL) 进行模拟。该方法基于固定背景网格体系, 允许材料在网格内自由变形, 有效解决冲击载荷下大变形计算问题。

采用 CEL 方法构建计算模型如图 8 所示, 其中长方体欧拉域由蓝色材料区 (含 HMX 晶体) 和红色空域构成, HMX 变形及孔洞演化可在全域内进行。冲击波沿 X 正方向 (粉色箭头) 作用于预制孔洞前表面。约束 Z 方向平动自由度 (橙色标记) 防止材料溢出, 初始温度设为 300 K 。网格划分采用进阶算法: 规则立方体区域使用结构化网格, 含孔洞 HMX 区域采用扫掠网格, 网格尺寸为 $10 \mu\text{m}$, 所有单元均为 8 节点热耦合欧

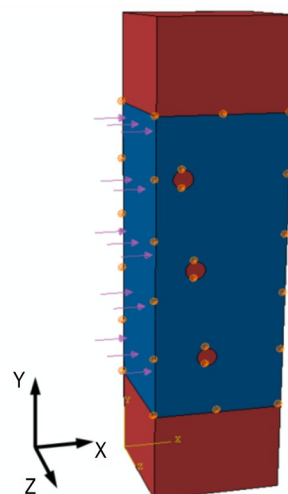


图 8 计算模型示意图

Fig.8 Schematic diagram of computational model

拉六面体减缩积分单元 (EC3D8RT)。加载冲击波为梯形波, 幅值 2.5 GPa , 含 10 ns 上升/下降段及 148 ns 平台段, 与实验中的加载条件相同。

HMX 晶体材料参数见表 1。本文采用弹塑性本构模型描述其力学行为, 对应应力-应变关系如图 9 所示。鉴于强冲击条件下 HMX 力学性能数据缺失, 参照文献 [39] 中的 HMX 基 PBX 炸药破坏应变范围 ($1\% \sim 2\%$), 设定 HMX 晶体破坏应变处于该区间。考虑冲击强化效应, 在冲击加载条件下将极限强度取为 100 MPa 。Menikoff 等^[40]研究表明 HMX 屈服强度可达 200 MPa , 显著高于其名义屈服极限, 这表明本文极限强度取值处于合理强化范围内。

同时, 在 HMX 晶体冲击变形模拟中, 为准确表征力-热耦合响应机制, 通过 ABAQUS 材料属性中的非弹性热份额 η (取 0.9 , 见表 1) 控制塑性功转热比例考虑塑性功向热能的转化过程, 以此模拟孔洞塌缩过程中的粘塑性行为。变形热的计算公式如下式所示:

$$W = \eta \iiint \overline{\sigma} \overline{\varepsilon} dV \quad (1)$$

式中, W 为变形热, $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$; σ 为等效应力, Pa ; ε 为等效塑性应变。此变形热将会导致材料变形区域局部温度的升高, 其温度变化为:

表 1 HMX 的材料参数

Table 1 Comparison of the fitting parameters of the three models

thermal conductivity	density	elastic modulus/ Poisson's ratio	thermal expansion coefficient	specific heat capacity	plastic strain	inelastic heat fraction η
$1.74 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	$1.89 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$	$17500 \text{ MPa}/$ $0.25^{[41]}$	2.4e^{-5}	$1500 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	conventional plasticity	0.9

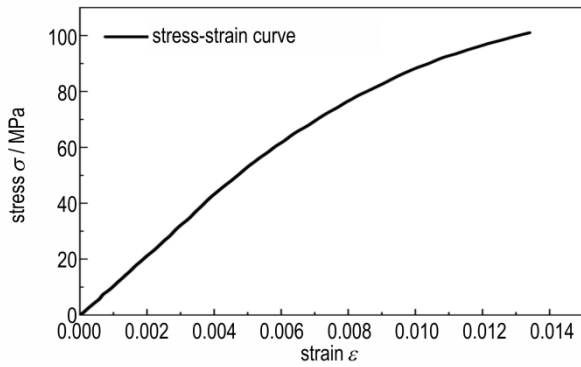


图9 HMX 晶体弹塑性本构

Fig.9 Elastoplastic constitutive model of HMX crystals

$$T = T_0 + \frac{W}{\rho c_p} \quad (2)$$

式中, T 为当前温度, K ; T_0 为材料初始温度, K ; ρ 为材料密度, $kg \cdot m^{-3}$; c_p 为比热, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ 。

2.2 数值模拟结果与讨论

2.2.1 2.5 GPa 冲击强度下力-热响应分析

根据前述数值模拟方法,开展 2.5 GPa 冲击强度下含预制孔洞缺陷 HMX 晶体的力热响应行为分析,通过与实验结果对比验证模型有效性。随后提高冲击强度至 3.5 GPa 分析该体系的力热响应行为,进一步揭示中等冲击强度下孔洞缺陷的塌缩和热点点火机制。

图 10 展示了幅值 2.5 GPa、脉宽 168 ns 冲击波加载下,含预制孔洞 HMX 在变形和孔洞塌缩过程中沿冲击方向的单轴应力云图。应力正值表示拉伸,负值表示压缩。在 100 ns 时刻,冲击波前沿传播到最接近加载面的孔 1 上游表面处。140 ns 时刻,由于孔洞空腔的稀疏作用,孔 1 处的压缩冲击波强度减弱。180 ns 时刻,孔 1 前表面处反射拉伸波增强,压缩冲击波强度进一步减弱,此时孔 1 变形为类似椭圆形,冲击波前沿到达孔 2 处。220 ns 时刻,孔 1 面积大幅减小,孔 2 处反射出拉伸波。260 ns 和 300 ns 时刻,第一个孔洞呈月牙状变形并几乎完全塌缩,第二个孔洞重复该塌缩过程。模拟结果显示孔洞呈各向同性整体塌缩模式,与前述实验的可见光分幅图像(图 5)一致,数值模拟的有效性与其可靠性得到充分验证。

图 11 展示了含预制孔洞缺陷 HMX 晶体变形过程中的温度变化。在冲击波加载的前 150 ns 内,加载面两个角落处因显著变形产生温升,该温升在此后时间段持续存在。观察孔洞区域发现:当靠近加载面的孔 1 开始塌缩时,其上游表面出现温度升高现象;随着塌缩程度加剧,温升幅度增大;孔洞完全塌缩闭合后,闭合位置达到最高温升。300 ns 时刻,孔 1、孔 2 和孔 3 处最高温度依次降低,与图 7 中三孔处的自发光强度规律一致。

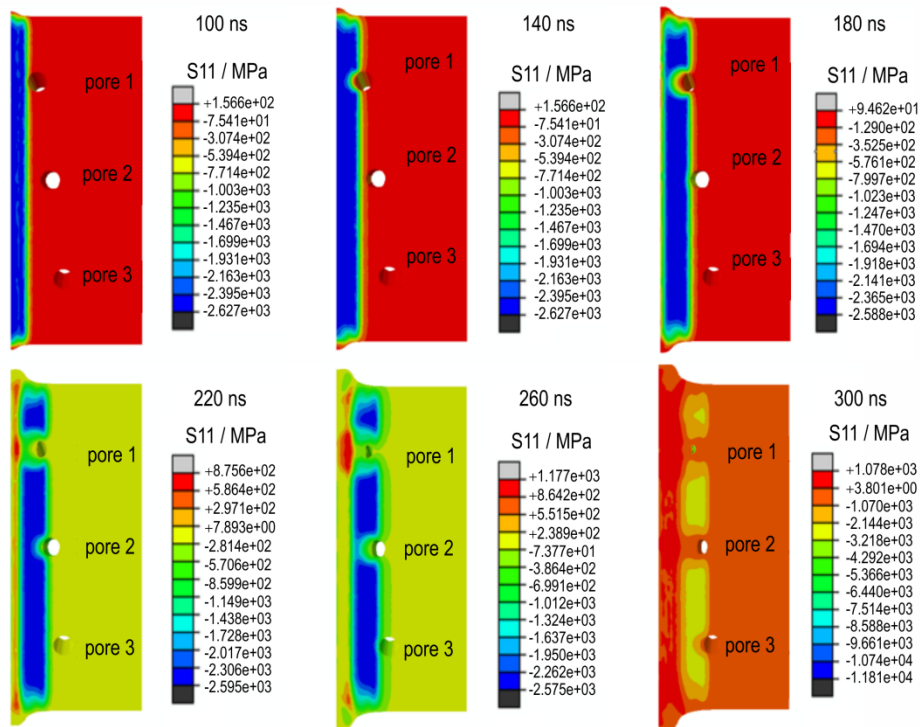


图 10 2.5 GPa 冲击下 HMX 晶体中的单轴应力 S11 云图

Fig.10 Contour plot of uniaxial stress S11 in HMX crystals under 2.5 GPa shock pressure

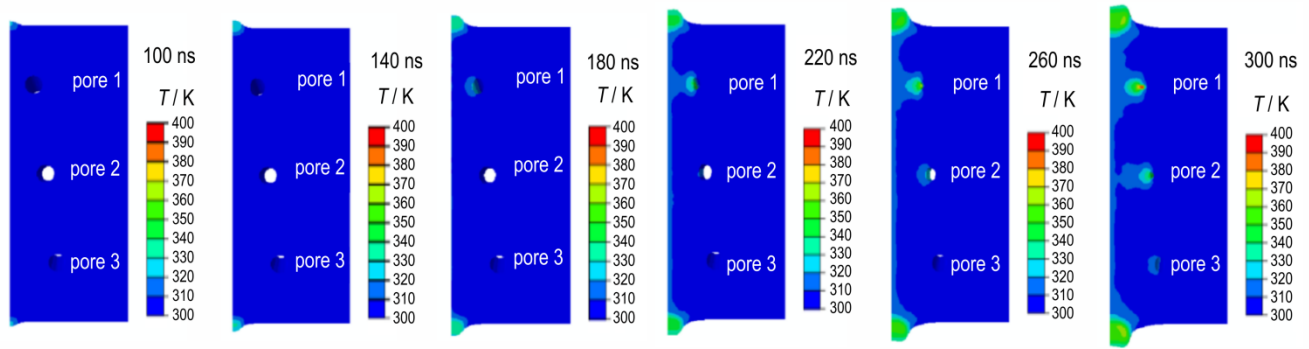


图 11 2.5 GPa 冲击下 HMX 晶体变形及孔洞塌缩过程的温度云图

Fig.11 Temperature contour during deformation & pore collapse in HMX crystals under 2.5 GPa shock pressure

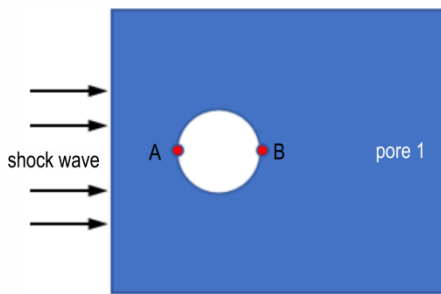
为进一步分析孔洞塌缩过程中温升情况,选取最靠近加载面的孔 1,在其内侧面上下游分别设置监测点 A 和 B,A、B 两点的温度-时间变化曲线如图 12 所示。在 100 ns 前,冲击波尚未到达孔洞区域,孔洞上游 A 点未观测到温度变化。100 ns 后,A 点温度缓慢上升。这是由于在 100~300 ns 孔洞塌缩过程中,上游表面持续变形并向孔洞后表面扩展,使 HMX 材料获得粒子速度和动能,同时塑性变形产生变形热,二者共同导致 A 点温度平缓升高。300 ns 前 B 点温度无明显变化;孔洞完全塌缩闭合后,B 点温度迅速升高并超过 A 点,此温升源于上游高速运动 HMX 材

料冲击下游壁面时动能向热能的转化、下游塑性变形热及摩擦生热共同作用。孔洞塌缩闭合后的温升过程导致高温热点生成,引发热点点火,该模拟结果与图 7 中观测到的孔洞塌缩后自发光现象具有关联性。

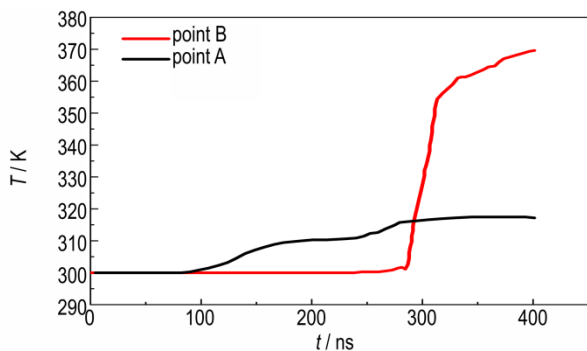
2.2.2 3.5 GPa 冲击强度下力-热响应分析

为更进一步探索加载强度对 HMX 晶体中预制孔洞塌缩方式的影响,保持脉冲宽度不变,将冲击波幅值提升至 3.5 GPa 开展数值模拟研究。3.5 GPa 冲击下 HMX 晶体中的单轴应力 S11 云图如图 13 所示。对比图 10 和图 13 显示,冲击强度分别为 2.5 GPa 和 3.5 GPa 时 HMX 晶体变形及孔洞塌缩过程基本一致,但冲击强度增大时塌缩起始时间提前且同一时刻孔洞剩余面积更小,完全塌缩时间提前约 15%,同时月牙状变形更早出现且形貌更显著,此现象预示在更高冲击强度(如 20 GPa)下可能转变为射流塌缩模式,该模式与 Bourne 等在乳化硝酸铵炸药中观测的结果^[7]一致,表明强冲击作用下 HMX 晶体力学响应趋近流体动力学行为。同时,该变化趋势与 Duarte 等^[15]的模拟结果衔接良好:其低强度(0.1 km·s⁻¹)模拟的各向同性塌缩与本文 2.5 GPa 结果吻合,而本文 3.5 GPa 数据恰位于其未明确的过渡区间(0.5~1.0 km·s⁻¹)。这表明 3.5 GPa 可能接近塌缩模式转变的临界强度,为构建完整的强度-塌缩模式相图提供了关键数据。

强度为 3.5 GPa 冲击下含预制缺陷 HMX 晶体的温度变化云图以及靠近加载面第一个孔洞上下游表面 A 点和 B 点的温度变化曲线分别如图 14 和 15 所示,该结果与在强度为 2.5 GPa 冲击下的结果类似。因此冲击强度为 2.5 GPa 和 3.5 GPa 时,热点生成可以分为两个阶段:孔洞上游塑性变形致温度缓升(温升速率约 1.1×10⁵ K·s⁻¹),上游 HMX 颗粒与下游碰撞动能热转换致温度骤升(温升速率约 1.8×10⁶ K·s⁻¹)。



a. schematic of upstream/downstream surfaces of pore



b. temperature-time curve

图 12 2.5 GPa 冲击强度下孔 1 上下游表面温度变化曲线

Fig. 12 Temperature-time curve of upstream and downstream surfaces of pore 1 under 2.5 GPa shock pressure

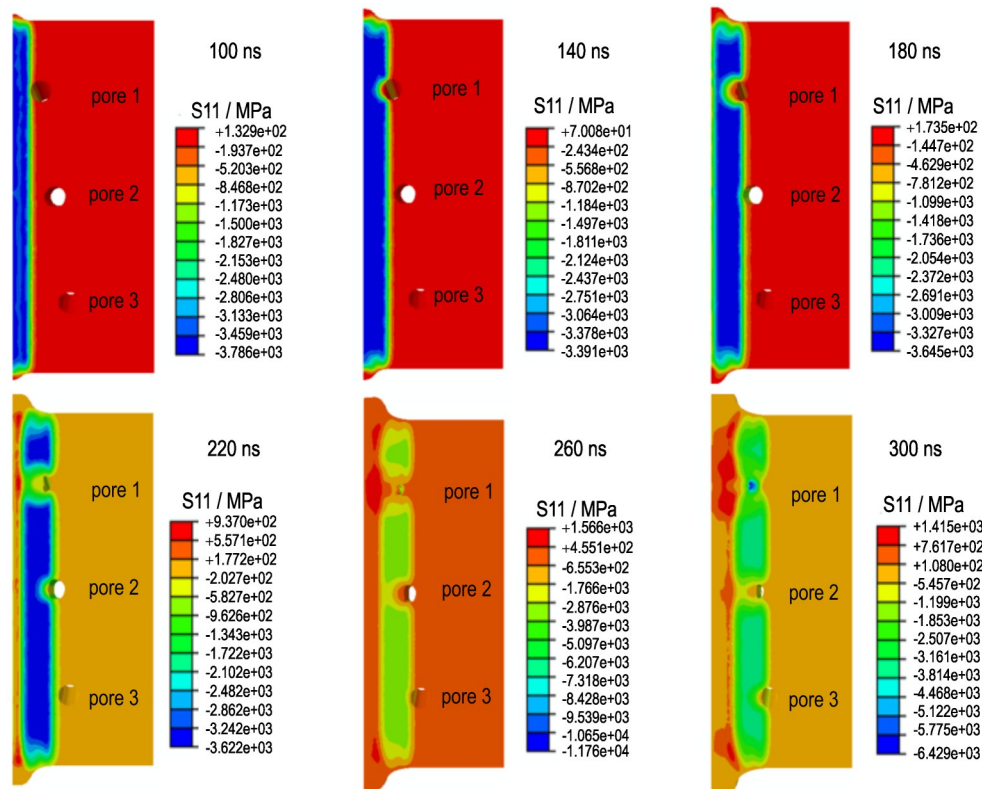


图 13 3.5 GPa 冲击下 HMX 晶体中的单轴应力 S11 云图

Fig.13 Contour plot of uniaxial stress S11 in HMX crystals under 3.5 GPa shock pressure

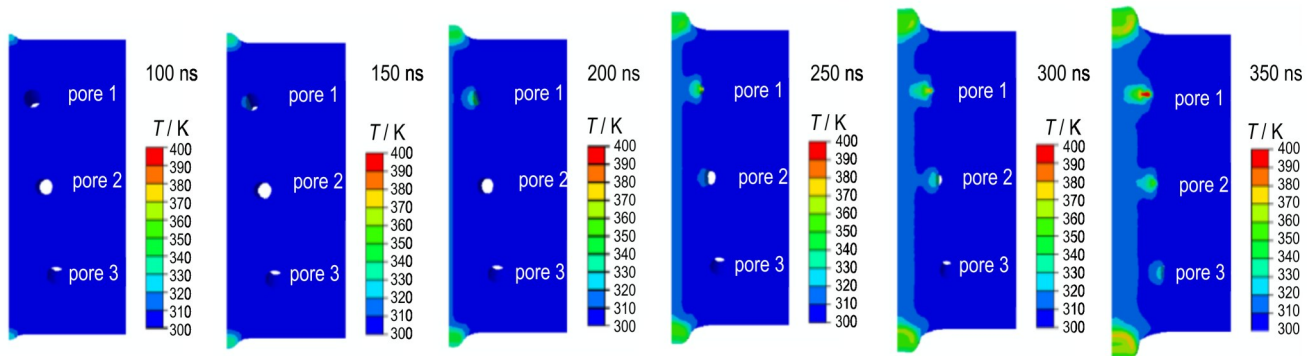


图 14 3.5 GPa 冲击下 HMX 晶体变形及孔洞塌缩过程的温度云图

Fig.14 Temperature contour during deformation & pore collapse in HMX crystals under 3.5 GPa shock pressure

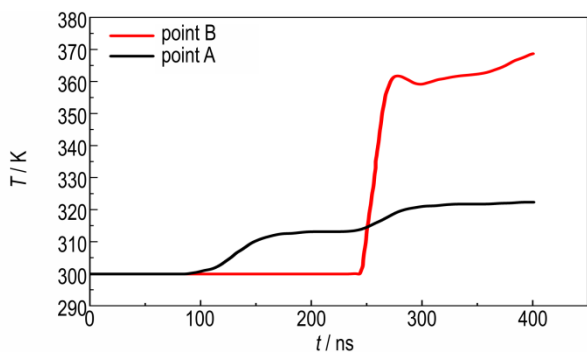


图 15 3.5 GPa 冲击下孔 1 上下游表面温度变化曲线

Fig.15 Temperature-time curve of upstream and downstream surfaces of pore 1 under 3.5 GPa shock pressure

4 结论

本文以含直径 300 μm 预制孔洞的 HMX 晶体为研究对象,通过实验与数值模拟相结合的方法,系统研究中等冲击强度下含孔洞缺陷 HMX 晶体的力-热响应,分析了该条件下孔洞演化与局域温升特征规律,获得的具体结论如下:

(1)孔洞塌缩模式实验表征。采用“炸药晶体微缺陷定制+X-Pinch 微焦点 X 光成像+可见光分幅成像”方法,成功获得 HMX 晶体中 300 μm 孔洞的塌缩

变形和热点生成物理图像。在 2.5 GPa 冲击下, 孔洞演化表现为各向同性塌缩, 热点发光强度与塌缩程度呈显著正相关, 塌缩过程直接影响热点发展。

(2) 热点生成机制解析。建立 GPa 级 HMX 晶体冲击力学模型, 定量揭示热点生成两阶段机制: 孔洞上游塑性变形致温度缓升 (温升速率约 $1.1 \times 10^5 \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}$), 上游 HMX 颗粒与下游碰撞动能热转换致温度骤升 (温升速率约 $1.8 \times 10^6 \text{ K} \cdot \text{s}^{-1}$), 粘塑性功与动能热转换是热点点火的核心因素。

(3) 孔洞塌缩行为存在压力依赖性。对比 2.5 GPa 与 3.5 GPa 冲击工况, HMX 晶体孔洞塌缩模式基本一致, 但 3.5 GPa 工况下完全塌缩时间提前约 15%、相同时间节点孔洞剩余面积减小, 且流体特征月牙状变形形貌更显著。该变化趋势表明, 更高冲击强度下 HMX 晶体孔洞塌缩模式可能转变为射流冲击, 力学响应趋近流体动力学行为。

参考文献:

- [1] 赵东, 屈可朋, 董泽霖. 凝聚相炸药损伤-点火特性的研究进展[J]. 爆破器材, 2024, 53(3): 1-9+16.
ZHAO Dong, QU Ke-peng, DONG Ze-lin. Research progress on damage and ignition characteristics of condensed phase explosives[J]. *Explosive Materials*, 2024, 53(3): 1-9+16.
- [2] DEAR J P, FIELD J E. A study of the collapse of arrays of cavities[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1988, 190: 409-425.
- [3] BOURNE N K, FIELD J E. Cavity collapse in a heterogeneous commercial explosive [C]//Proc. Ninth Symposium (International) on Detonation. Portland, Oregon, 1989.
- [4] BOURNE N K, FIELD J E. Bubble collapse and the initiation of explosion[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, 1991, 435 (1894): 423-435.
- [5] BOURNE N K, FIELD J E. Collapsing cavities in reactive and nonreactive media[C]//19th Intl Congress on High-Speed Photography and Photonics. 1991: SPIE.
- [6] BOURNE N K, FIELD J E. A high-speed photographic study of cavitation damage[J]. *Journal of Applied Physics*, 1995, 78(7): 4423-4427.
- [7] BOURNE N K, FIELD J E. Explosive ignition by the collapse of cavities[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1999, 455(1987): 2411-2426.
- [8] BOURNE N K, FIELD J E. Shock-induced collapse and luminescence by cavities[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1999, 357(1751): 295-311.
- [9] RAMOS K, JENSEN B, IVERSON A, et al. In situ investigation of the dynamic response of energetic materials using IMPULSE at the Advanced Photon Source[C]// Journal of Physics: Conference Series. 2014: IOP Publishing.
- [10] SANDBERG R. First in situ x-ray images of void collapse pave way for better models of explosives[R]. Newsletter of the Materials Physics and Application Division, New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2014.
- [11] 傅华, 李涛, 吴廷烈. 等冲击作用下 PBX 炸药预制孔洞塌缩过程的实验探索[J]. 高压物理学报, 2015, 29(4): 268-272.
FU Hua, LI Tao, WU Ting-lie, et al. Experiment of cavity collapse progress in plastic-bonded explosives under shock loading [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2015, 29 (4) : 268-272.
- [12] MA X, LI X, ZHENG X, et al. Weak shock loadings induce potential hot spots formation around an intergranular pore [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(11): 115102.
- [13] MA X, LI X, ZHENG X, et al. Crack initiation and potential hot-spot formation around a cylindrical defect under dynamic compression[J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(11): 185104.
- [14] MA X, ZHANG K, SHANG H, et al. Measuring crack growth and rise in temperature around a cylindrical defect in explosive simulants under low-pressure and long-pulse loadings [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2020, 45(10): 1654-1661.
- [15] DURATE C A, HAMED A, DRAKE J D, et al. Void collapse in shocked-HMX single crystals: Simulations and experiments[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2020, 45(2): 243-253.
- [16] RAI N K, ESCAURIZA E M, EAKINS D E, et al. Mechanics of shock induced pore collapse in poly (methyl methacrylate) (PMMA): Comparison of simulations and experiments[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2020, 143: 104075.
- [17] ESCAURIZA E M, DURATE J, CHAPMAN D, et al. Collapse dynamics of spherical cavities in a solid under shock loading [J]. *Scientific Reports*, 2020, 10(1): 8455.
- [18] BLUM-SORENSEN C J, DURATE C A, DRAKE J D, et al. Phase contrast X-ray imaging of the collapse of an engineered void in single-crystal HMX [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2022, 47(10): e202100297.
- [19] BOURNE N K, MILNE A M. The temperature of a shock-collapsed cavity[J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2003, 435: 423-435.
- [20] MENIKOFF R. Pore collapse and hot spots in HMX [C]//AIP Conference Proceedings. 2004.
- [21] BEARTON N R, WINTER N W, REAUGH J E. Defect evolution and pore collapse in crystalline energetic materials [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 17(3): 035003.
- [22] 傅华, 赵峰, 谭多望, 等. 冲击作用下 HMX 晶体孔洞塌缩热点生成机制的微观数值模拟[J]. 高压物理学报, 2011, 25(1): 8-14.
FU Hua, ZHAO Feng, TAN Duo-wang, et al. Mesoscale simulation of cavity collapse hot spot mechanism in HMX under shock loading [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2011, 25(1): 8-14.
- [23] AUSTIN R A, BARTON N R, REAUGH J E, et al. Direct numerical simulation of shear localization and decomposition reactions in shock-loaded HMX crystal [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 117(18): 185902.
- [24] EASON R M, SEWELL T D. Molecular dynamics simulations of the collapse of a cylindrical pore in the energetic material α -RDX [J]. *Journal of Dynamic Behavior of Materials*, 2015, 1(4): 423-438.
- [25] SPRINGER H K, BASTEA S, NICHOLS III A L, et al. Modeling the effects of shock pressure and pore morphology on hot spot mechanisms in HMX [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2018, 43(8): 805-817.
- [26] WOOD M A, KITTELL D E, YAEINGTON C D, et al. Multi-scale modeling of shock wave localization in porous energetic material [J]. *Physical Review B*, 2018, 97(1): 014109.
- [27] MICHAEL L, NIKIFORAKIS N. The evolution of the tempera-

- ture field during cavity collapse in liquid nitromethane. Part I: inert case[J]. *Shock Waves*, 2019, 29: 153-172.
- [28] MICHAEL L, NIKIFORAKIS N. The evolution of the temperature field during cavity collapse in liquid nitromethane. Part II: reactive case[J]. *Shock Waves*, 2019, 29: 173-191.
- [29] RAI N, UDAYKUMAR H. Void collapse generated meso-scale energy localization in shocked energetic materials: Non-dimensional parameters, regimes, and criticality of hot-spots[J]. *Physics of Fluids*, 2019, 31(1): 016103.
- [30] 周茂, 非均质炸药压缩破碎与温升点火的细观模拟[D]. 沈阳: 东北大学, 2021.
ZHOU Mao. Meso-simulation of compression breakage and temperature rise ignition of heterogeneous explosives [D]. Shenyang: Northeastern University, 2021.
- [31] WANG X, DUAN Z, BAI Z, et al. Crystal-scale modelling of pore collapse in cyclotetramethylene tetranitramine (HMX) under different shock strengths [J]. *Mechanics of Materials*, 2022, 174: 104457.
- [32] 刘纯, 欧卓成, 段卓平, 等. 动态加载下高聚物粘结炸药中椭圆孔洞坍塌引起的热点温度及其半经验解析表达[J]. 兵工学报, 2022, 43(1): 57-68.
LIU Chun, OU Zhuo-cheng, DUAN Zhuo-pin, et al. Hot spot temperature resulting from elliptical void collapse in PBX under dynamic loading and its semi-empirical analytical expression[J]. *ACTA Armamentarii*, 2022, 43(1): 57-68.
- [33] DING K, WANG X, HUANG F. Shock-induced nanoscale pore collapse and hotspot in cyclotetramethylene tetranitramine (HMX) [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2024, 281: 109644.
- [34] 周婷婷, 楼建锋. 含孔洞炸药晶体 HMX 冲击响应的分子动力学模拟[J]. 含能材料, 2024, 32(1): 65-75.
ZHOU Ting-ting, LOU Jian-feng. Molecular dynamic studies on the shock responses of energetic crystal HMX with cylindrical voids[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2024, 32(1): 65-75.
- [35] 王茂杰, 白桥栋, 韩家祥, 等. Comp.B 炸药孔洞塌缩及热点生成的数值模拟[J]. 爆破器材, 2025, 54(2): 21-28.
WANG Mao-jie, BAI Qiao-dong, Han Jia-xiang, et al. Numerical simulation of pore collapse and hot spot generation in comp.B explosives[J]. *Explosive Materials*, 2025, 54(2): 21-28.
- [36] 赵传荣. 平面冲击波加载及其传播特性研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2016.
ZHAO Chuan-rong. Study on plane shock wave loading and its propagation characteristics[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2016.
- [37] 王鹤. 温度和压力诱导 HMX 晶体结构演化和损伤及其对热传导影响的研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2024.
WANG He. Study of temperature and pressure induced crystal structure evolution and damage of HMX and their effects on heat conduction[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2024.
- [38] 随志磊, 代如成, 王中平, 等. 非静水压下 HMX 炸药晶体的高压相变[J]. 高压物理学报, 2022, 36(3): 18-25.
SUI Zhi-lei, DAI Ru-cheng, WANG Zhong-ping, et al. High pressure phase transition of HMX crystal under non-hydrostatic pressure[J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2022, 36(3): 18-25.
- [39] 李涛, 傅华, 李克武, 等. 单轴压缩下 2 种 PBX 炸药的动态变形损伤及其温升效应[J]. 爆炸与冲击, 2017, 37(1): 120-125.
LI Tao, FU Hua, LI Ke-wu, et al. Deformation with damage and temperature-rise of two types of plastic-bonded explosives under uniaxial compression[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2017, 37(1): 120-125.
- [40] MENIKOFF R DJJ. Analysis of wave profiles for single crystal HMX[R]. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2004.
- [41] 王昕捷. 高能炸药晶体尺度的细观力学-点火反应研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2017.
WANG Xin-jie. Mesoscale mechanical responses and ignition reaction of high explosives at the crystal scale [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2017.

Pore Collapse and Hot Spot Formation Mechanisms in HMX Crystals under Moderate Shock Pressure

ZHANG Ke, XIE Fei-jun, YANG Xiao-yuan, LI Jing, MA Yun-can, MA Xiao

(National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China)

Abstract: Hot spots are critical initiators of both shock-induced detonation and non-shock ignition in explosives, with pore collapse as a primary formation mechanism. Since energetic materials are routinely subjected to complex mechanical loading across a broad intensity range during service, a mechanistic understanding of pore evolution and hot-spot generation under moderate shock pressures (1-10 GPa) is essential for reliable safety assessment. In this study, HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine) crystals containing a 300 μm prefabricated pore were investigated. High-speed imaging combining X-pinch and visible-light diagnostics captured the dynamic pore collapse process, while thermomechanically coupled numerical simulations accounted for the conversion of plastic work into thermal energy. The results reveal distinct pore collapse modes and associated hot-spot formation mechanisms. At 2.5 GPa, the isotropic pore collapse mechanism was observed, with hot spot intensity correlating positively with the extent of pore collapse. The temperature rise occurs in two stages: an initial gradual increase due to upstream viscoplastic deformation, followed by a sharp temperature rise after pore closure, resulting from the thermal conversion of kinetic energy during the impact of high-velocity upstream material on the downstream pore wall. When the shock pressure is increased to 3.5 GPa, pore collapse initiates earlier, the crescent-shaped deformation becomes more pronounced, and the mechanical response exhibits hydrodynamic behavior, indicating a transition toward jetting-type collapse.

Key words: HMX crystals; pore defects; collapse mechanisms; hot-spot

CLC number: TJ55; O369

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2025261

Grant support: Science Challenge Project(No. TZ2025001); National Natural Science Foundation of China (No. 11902306)

(责编: 高毅)