

文章编号: 1006-9941(2013)05-0604-05

## VLWR 程序计算 CHNO 炸药爆轰性能碳相态的选择

魏贤凤<sup>1,3</sup>, 龙新平<sup>2</sup>, 韩勇<sup>3</sup>

(1. 北京理工大学机电工程学院, 北京 100081; 2. 中国工程物理研究院, 四川 绵阳 621900; 3. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900)

**摘要:** 用 VLWR 程序预测不同种类炸药爆轰性能参数时用石墨、金刚石和类液态碳三套固态碳参数。用最小自由能原理确定爆轰产物平衡态组份。通过加入固态碳的相态的选择, 修改了原 VLWR 程序中固态碳的自由能计算。用修改后的 VLWR 程序计算了石墨、金刚石和类液态碳的 Gibbs 自由能。根据最小自由能原理, 从三种碳相中确定了炸药爆轰产物 C<sub>j</sub> 点碳最有可能的相态, 计算了炸药的爆轰参数。用有碳相选择的 VLWR 程序计算了黑索今(RDX)、奥克托今(HMX)和太安(PETN)等 12 种 CHNO 炸药的爆轰参数。结果表明: 计算结果与实验值吻合较好。

**关键词:** 爆炸力学 状态方程; 爆轰参数; 爆轰产物**中图分类号:** TJ55; O381**文献标识码:** A**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.05.009

### 1 引言

为了更安全地使用炸药以及研制新型炸药, 需要采用状态方程准确地预测炸药的爆轰性能参数。目前, 常用的爆轰产物状态方程有 BKW (Becker-Kistiakowsky-Wilson)、VLW (Virial-Wu)、LJD (Lenard-Jones-Devonshire) 及 WCA (Weeks-Chandler-Andersen) 等, 并已发展出相应的计算方法和程序。1985 年, 我国学者吴雄等<sup>[1]</sup> 应用相似理论提出了以 Lennard-Jones 12-6 势函数为基础的 VLW 爆轰产物状态方程, 并编制了 FORTRAN VLW 程序, 祝明水等<sup>[2]</sup> 利用 VB6.0, 开发了 VLW 的可视化软件, 方便了 VLW 程序的使用。龙新平等<sup>[3]</sup> 对 VLW 状态方程进行了改进, 拓展了其适用范围, 可以计算密度低至  $10^{-3} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  的燃料空气炸药, 也可计算密度大于  $2.0 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  的高密度炸药, 并且计算结果与实验结果吻合很好, 经龙新平等改进后的 VLW 程序称为 VLWR 程序。韩勇<sup>[4]</sup> 用 VLWR 程序计算了不同反应度的含铝炸药的爆轰参数, 计算结果与实验值相同。覃文志等<sup>[5]</sup> 用 VLWR 程

序对金属配合物类炸药高氯酸[四氨·双(5-硝基四唑)]合钴(BNCP)和高氯酸·四氨·双叠氮基合钴(DACP)的爆轰性能进行了计算, 计算结果理想。

在炸药爆轰性能参数计算中, 爆轰产物中固态碳相态的选择对计算结果影响很大。Thiel 和 Ree<sup>[6-7]</sup> 在 CHEQ 程序中考虑了石墨-金刚石-液碳三相组成。李德华<sup>[8]</sup> 对 WCA 程序进行了改进, 将石墨-金刚石-类石墨液碳-类金刚石液碳同时运用到炸药爆轰产物研究中。而 VLWR 状态方程目前仍然分别采用石墨、金刚石和类液态碳三套参数。对一种未知爆压和爆速的新炸药或混合炸药, 需要分别采用石墨、金刚石和类液态碳三组参数计算, 将三组结果与实验结果比较, 确定这种炸药计算时采用哪一组参数较为合适。VLWR 计算结果与实验结果对比发现<sup>[3]</sup>, 对于梯恩梯(TNT), 产物碳用石墨参数比较合适; 对于 RDX、特屈儿(TETRYL)和 TATB 等炸药, 产物碳用金刚石参数比较合适; 对 TNT、RDX 和 RX39AB 三种炸药, 采用类液态碳参数计算时, 计算结果与实验结果差别较大。

本研究在原 VLWR 程序中加入了产物中固态碳可能相态的选择, 根据 Gibbs 自由能最小原理, 通过程序计算出相应相态的碳的 Gibbs 自由能, 从石墨、金刚石和类液态碳三种相态中确定出炸药爆轰产物 C<sub>j</sub> 点碳的最有可能的相, 进一步计算出 RDX、HMX、PETN 等 12 种炸药爆轰 C<sub>j</sub> 点的爆轰参数, 无需采用三套参数分别计算。

**收稿日期:** 2012-10-27; **修回日期:** 2013-05-21**基金项目:** 国家自然科学基金委与中国工程物理研究院联合基金重点项目 NSFA 基金(批准号: 10676120)**作者简介:** 魏贤凤(1984-), 女, 博士在读, 主要从事军事化学与烟火技术研究。e-mail: unoqwei@126.com**通讯联系人:** 韩勇(1976-), 男, 副研究员, 主要从事爆轰波物理与冲击波物理相关研究。e-mail: sky\_2007\_2008@126.com

## 2 计算方法

VLW 状态方程从维里方程<sup>[1]</sup>出发,利用系统最小自由能原理来确定爆轰产物处于化学平衡态时的组成。VLWR 程序首先给定一组初始压强  $p$ , 温度  $T$ , 通过迭代确定出气态爆轰产物的体积  $V$ , 然后计算此时单组份气态产物  $n_i$  的 Gibbs 自由能; 对于产物中的固态碳的 Gibbs 自由能, 针对不同种类炸药分别采用石墨、金刚石和类液态碳的 Cowan (Cowan-Fickett) 状态方程参数。

对于爆轰产物中的固体碳, 其 Gibbs 自由能的计算采用 Cowan 状态方程。Cowan 状态方程的具体形式为<sup>[9]</sup>:

$$p = p_1(V_s) + a(V_s)T_v + b(V_s)T_v^2 \quad (1)$$

$$p_1(V_s) = A_s + \frac{B_s}{V_s} + \frac{C_s}{V_s^2} + \frac{D_s}{V_s^3} + \frac{E_s}{V_s^4} \quad (2)$$

$$a(V_s) = A_1 + \frac{A_2}{V_s} \quad (3)$$

$$b(V_s) = C_1 + C_2 V_s + C_3 V_s^2 \quad (4)$$

式中,  $V_s = \frac{\rho_0}{\rho}$ ;  $T_v = \frac{T}{R}$ ;  $A_s, B_s, C_s, D_s, E_s, A_1, A_2, C_1, C_2, C_3, R$  均为常数。表 1 给出了不同相态产物碳的 Cowan 状态方程参数<sup>[2]</sup>。

表 1 不同相态碳的 Cowan 状态方程参数

Table 1 Parameters of Cowan equation state for different carbon phase

parameter	graphite	diamond	liquid like carbon
$A_s$	0.8309358	-0.8925648	0.3893430
$B_s$	-1.3938180	0.701102	-0.8032880
$C_s$	0.6725697	-0.3516268	0.4195450
$D_s$	-0.1135373	0.0639260	-0.0747715
$E_s$	0.00649156	0.00151900	0.00463421
$A_1$	-0.2267053	-0.3401114	-0.1521190
$A_2$	0.12051657	0.12051657	0.12051657
$C_1$	0.008316	0.008316	0.008316
$C_2$	-0.17559	-0.17559	-0.17559
$C_3$	0.15531	0.15531	0.15531

研究将对 VLWR 中固态碳 Gibbs 自由能计算部分进行修改。根据最小自由能原理, 修改后, 程序中分别计算石墨、金刚石和类液态碳的三组自由能的值, 从中选择自由能最小值的相, 作为炸药爆炸 CJ 点碳的最可能相态。修改后程序框图如图 1 所示。

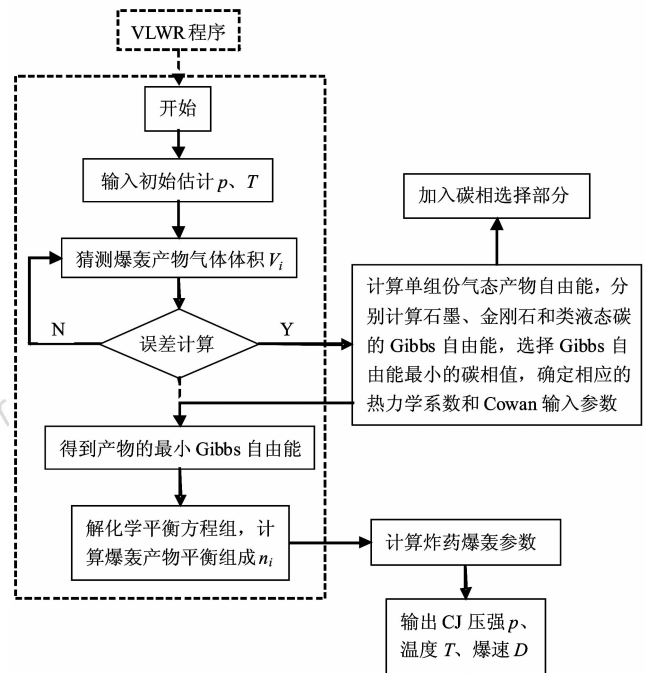


图 1 VLWR 程序流程图

Fig. 1 Flow chart of VLWR program

## 3 结果与讨论

对几种单质炸药和混合炸药进行了爆轰参数计算, 比较了实验值<sup>[3]</sup>、BKW 计算值及 VLW 计算值, 结果见表 2 和表 3。表中给出了经改进后 VLWR 程序计算得到的 CJ 点碳的相态, CJ 爆压、爆速与爆温。

对 RDX、HMX 和 TATB 等单质炸药及高密度混合炸药 B 炸药 (Comp. B)、Pentolite 和 RX39AB, 本研究计算结果显示金刚石为 CJ 点碳的自由能最小的相。这样的选择结果与碳的相图<sup>[10]</sup> (图 2) 相符合。图 2 中, B-S 线是 Berman-Simon 线, O 点为三相点,  $T=4710$  K。

由图 2 和表 2 可知, 这几种炸药爆炸时 CJ 点的爆温和爆压正处于碳的金刚石稳定相区。对于这几种炸药, 爆压、爆速的计算结果与单独采用金刚石参数计算时得到的结果基本一致, 计算结果与实验值符合较好 (表 2)。与 BKW (石墨) 和 VLW (石墨) 的计算结果相比较, 除 RDX 炸药外, 本研究的 VLWR 计算结果更接近实验值。其中 HMX 爆速的计算值相对实验值误差仅为 0.02%, 爆压的计算值相对实验值误差仅为 0.10%。Comp. B 的计算值相对实验值误差为 3.3% (爆速) 和 5.4% (爆压); Pentolite 的计算值相对实验值误差为 0.12% (爆速); RX39AB 的计算值相对实验值误差为 1.15% (爆速) 和 2.06% (爆压), 计算结果较为理想。

表 2 几种炸药爆轰参数计算值与实验值的比较

Table 2 Comparasion of calculated with experimental detonation parameters

explosive	detonation parameters	experiment	calculation					calculation
			BKW <sup>[2]</sup> (graphite)	VLW <sup>[2]</sup> (graphite)	VLWR (graphite)	VLWR (diamond)	VLWR (liquid)	
RDX	$D/m \cdot s^{-1}$	8754	8754	8820	8807	8777	8325	8785
$\rho = 1.80 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_3H_6N_6O_6$ )	$p/\text{GPa}$	34.7	34.7	37.10	35.79	34.78	33.22	34.56
	$T/\text{K}$		2587	4941	4941	4934	4146	4938
	$D/m \cdot s^{-1}$	9100	9159	9078	9088	9078	8609	9106
$\rho = 1.90 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_4H_8N_8O_8$ )	$p/\text{GPa}$	39.3	39.5	44.47	41.47	39.69	36.21	39.35
	$T/\text{K}$		2364	4911	4880	4885	4036	4875
	$D/m \cdot s^{-1}$	8300	8421	8522	8456	8439	8297	8446
$\rho = 1.77 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_5H_8N_4O_{12}$ )	$p/\text{GPa}$	33.5	31.8	33.71	32.60	32.47	33.48	32.37
	$T/\text{K}$		2833	5121	5124	5129	4798	5127
	$D/m \cdot s^{-1}$	7860	7874	8076	8032	7877	7549	7868
$\rho = 1.895 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_6H_6N_6O_6$ )	$p/\text{GPa}$		29.7	27.70	27.26	24.9	34.50	24.52
	$T/\text{K}$		2128	3795	3795	3767	2958	3766
	$D/m \cdot s^{-1}$	7560	7629	7713	7651	7526	7014	7535
$\rho = 1.70 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_7H_7N_5O_3$ )	$p/\text{GPa}$		25.1	24.72	24.26	22.11	26.23	22.06
	$T/\text{K}$		2917	4610	4620	4596	3461	4594
	$D/m \cdot s^{-1}$	8030	8084	8110	8371	8256	7711	8264
Comp. B (RDX/TNT 64/36)	$p/\text{GPa}$	29.4	28.4	27.81	29.39	27.71	30.66	27.79
	$T/\text{K}$		2763	4645	4652	4640	3600	4635
	$D/m \cdot s^{-1}$	7465	7470	7627	7561	7456	6921	7451
Pentolite (PETN/TNT 50/50)	$p/\text{GPa}$		24.7	23.69	23.26	22.45	25.36	22.36
	$T/\text{K}$		3390	4599	4607	4591	3596	4588
	$D/m \cdot s^{-1}$	9208	9002		9098	9102	8674	9112
RX39AB (CL20/Estan 96/4)	$p/\text{GPa}$	43.0	39.19		46.64	43.89	38.08	43.52
	$T/\text{K}$		2627		5331	5294	4388	5299

Note:  $D$  is detonation velocity,  $p$  is detonation pressure,  $T$  is detonation temperature.

表 3 低密度炸药爆轰参数计算值与实验值的比较

Table 3 Comparasion of calculated and experimental detonation parameters of low-density explosives

explosive	detonation parameters	experimental	calculated			calculated
			VLWR (graphite)	VLWR (diamond)	VLWR (liquid)	
NM <sup>[2]</sup> $\rho = 1.128 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ( $C_1H_3N_1O_2$ )	$D/m \cdot s^{-1}$	6290	6159	6160	6442	6145
	$p/\text{GPa}$	14.1	11.50	11.86	11.48	11.48
	$T/\text{K}$	3800	3900	3915	3715	3898
TNT/RDX 40/60 $\rho = 1.02 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$D/m \cdot s^{-1}$		5931	5982	6205	5936
	$p/\text{GPa}$		9.75	10.12	12.32	9.53
	$T/\text{K}$		4291	4273	4344	4288
TNT/RDX 50/50 $\rho = 1.01 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$D/m \cdot s^{-1}$		5771	5806	6229	5781
	$p/\text{GPa}$		9.20	9.55	12.63	9.22
	$T/\text{K}$		4099	4076	4170	4099
TNT/RDX 60/40 $\rho = 1.06 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$D/m \cdot s^{-1}$		5764	5765	6051	5764
	$p/\text{GPa}$		9.42	9.65	14.69	9.31
	$T/\text{K}$		4139	4107	4005	4130

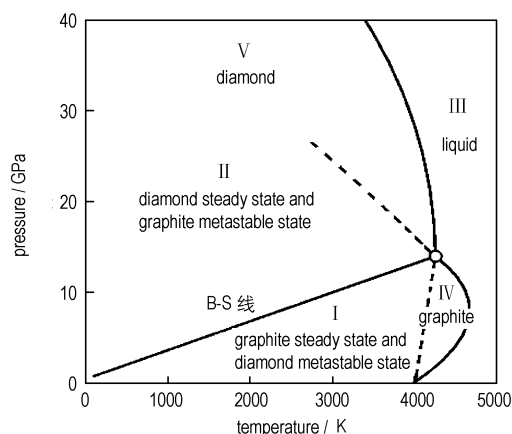


图 2 碳的相图

Fig. 2 Carbon phase diagram

对低密度炸药硝基甲烷(NM)和低密度混合炸药 TNT/RDX(将 TNT 和 RDX 粉末直接按质量比 4 : 6, 5 : 5 和 6 : 4 分别混合),本研究计算得出石墨为 CJ 点碳的自由能最小的相,结果见表 3。这样的选择结果同样与碳的相图相符合,从图 2 上看,NM 等炸药的爆温和爆压正处于碳的石墨相区。对 NM 炸药,本研究计算结果更接近实验值。

从表 2、3 的计算结果可以看出,本研究所用 VLWR 程序在 CJ 点碳的相态选择上是合理的。但当单独采用类液态碳参数进行计算时,计算结果与实验值偏差较大。从碳的相图上看,大多数炸药的爆温和爆压达不到液态碳相区,而是落在石墨相区或金刚石相区,所以 VLWR 计算时不宜采用液碳参数。

#### 4 结 论

根据最小自由能原理,在原 VLWR 程序的基础上加入了对爆轰产物中固态碳的可能相态的选择。用修改后的 VLWR 程序对 RDX、HMX 和 PETN 等 12 种 CHNO 类炸药进行了爆轰参数预测,结果显示:加入碳相选择程序后,VLWR 程序选择的 CJ 点的碳的相态是合理的,这一点可以从碳的相图进行解释,并且 CJ 点爆压、爆速的预测与实验值符合很好。对于一种炸药,用修改后 VLWR 进行爆轰参数预测,无需分别进行石墨、金刚石和类液态碳三套参数的计算,就能判断出适合这种炸药的固态碳的一套参数。

#### 参考文献:

- [1] 吴雄, 龙新平, 何碧, 等. VLW 爆轰产物状态方程[J]. 中国科学, 2008, 38(12): 1129-1132.  
WU Xiong, LONG Xin-ping, HE Bi, et al. VLW equation of state for detonation products [J]. *Science in China*, 2008, 38(12): 1129-1132.
- [2] 祝明水, 何碧, 蒋小华, 等. Fortran VLW 代码的可视化软件[J]. 含能材料, 2007, 15(2): 185-187.  
ZHU Ming-shui, HE Bi, JIANG Xiao-hua, et al. Detonation performance calculation of explosives with visualized fortran VLW code [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2007, 15(2): 185-187.
- [3] 龙新平. VLW 爆轰产物状态方程及纳米级铝粉含铝炸药爆轰特性研究[D]. 北京: 北京理工大学, 1999.  
LONG Xin-ping. Research on VLW EOS and the detonation properties of nano-power aluminized explosives [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 1999.
- [4] 韩勇. 含铝炸药非理想爆轰行为的研究[D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2002.  
HAN Yong. Research on the nonideal detonation properties of aluminized explosives [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2002.
- [5] 覃文志, 龙新平, 蒋小华, 等. 金属配合物类炸药的爆轰性能计算及数值模拟[J]. 含能材料, 2011, 19(5): 540-543.  
QIN Wen-zhi, LONG Xin-ping, JIANG Xiao-hua, et al. Calculation of detonation parameters of metal compounds explosives [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2011, 19(5): 540-543.
- [6] Thiel M V, Ree F H. Nonequilibrium effects of slow diffusion controlled reactions on the properties of explosives [C]// Ninth Symposium (International) on Detonation. Portland (USA): Oregon, 1991: 743-750.
- [7] Thiel M V, Ree F H. Multiphase carbon and its properties in complex mixtures [J]. *High Temperature-High Pressure*, 1992, 24: 195-208.
- [8] 李德华, 程新路, 杨向东, 等. PETN、RDX 和 HMX 炸药爆轰参数的数值模拟[J]. 爆炸与冲击, 2005, 25(4): 325-329.  
LI De-hua, CHENG Xin-lu, YANG Xiang-dong, et al. Numerical simulation of detonation parameters for PETN, RDX and HMA explosives [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2005, 25(4): 325-329.
- [9] Mader C A. Numerical Modeling of Detonation [M]. Berkeley, California: University of California Press, 1979.
- [10] Bundy F P. Pressure-temperature phase diagram of elemental carbon [J]. *Physica A*, 1989, 156(1): 169-178.
- [11] 孙业斌, 惠君明, 曹欣茂. 军用混合炸药[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1995.  
SUN Ye-bin, HUI Jun-ming, CAO Xin-mao. Military Mixture Explosive [M]. Beijing: Ordnance Industry Press, 1995.

## Selection of Carbon Phase in Calculation of Detonation Performance by VLWR Program for CHNO Explosives

WEI Xian-feng<sup>1,3</sup>, LONG Xin-ping<sup>2</sup>, HAN Yong<sup>3</sup>

(1. School of Mechano-Electronic Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 10081, China; 2. China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China; 3. Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China)

**Abstract:** The detonation performance parameters of different types of explosives were predicted with VLWR (Virial-Wu-R) code, and three sets of solid carbon parameters, including graphite parameters, diamond parameters and liquid carbon parameters were used. The component of equilibrium state for detonation products was determined based on the minimum Gibbs free-energy principle. The free-energy calculation of solid carbon in original VLWR program was modified by selecting the solid carbon phase in the calculation process. The Gibbs free-energy of graphite, diamond and liquid carbon were calculated by revised VLWR program. The most likely phase of carbon at C-J point for the detonation products was determined from three kinds of carbon phases, then the detonation parameters of explosive were calculated based on the minimum Gibbs free-energy principle. The detonation parameters of dozen CHNO explosives, including RDX, HMX, PETN etc were calculated with carbon phase selection. Results show that the calculated results were in good agreement with the experimental ones.

**Key words:** explosion mechanics; equation of state; detonation parameters; detonation products

**CLC number:** TJ55; O381

**Document code:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.05.009