

文章编号:1006-9941(2021)12-1152-08

# PBX-9502的热循环不可逆变形机理数值模拟分析

王艺,黄西成

(中国工程物理研究院总体工程研究所,四川绵阳621999)

**摘要:** 针对三氨基三硝基苯(TATB)基高聚物黏结炸药PBX-9502的热循环致不可逆变形机理问题,在考虑TATB晶粒的各向异性、黏结剂以及晶粒/黏结剂界面局域热力学性能的差异性基础上,采用三相微结构模型和扩展有限元法(XFEM),建立了计算模型,并对不可逆变形现象进行了数值模拟与分析。结果表明:由于PBX-9502中TATB晶粒的严重各向异性,以及TATB晶粒与黏结剂热力学性能的差异,在热循环加载过程中,PBX-9502试件内部产生了变形不协调与应力集中,致使黏结剂破坏和晶粒/黏结剂的界面脱黏等内部损伤,进而导致PBX-9502试件的热循环不可逆变形,计算结束时,PBX-9502试件的轴向应变达到了0.2%。

**关键词:** 高聚物黏结炸药(PBX);微结构模型;热循环加载;不可逆变形

**中图分类号:** TJ55; O34

**文献标志码:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2020091

## 1 引言

高聚物黏结炸药(Polymer Bonded Explosive, PBX),在细观上可以看作由形状不规则、位置分布随机、尺寸满足一定级配关系的颗粒性主体炸药,高聚物黏结剂,以及炸药颗粒/黏结剂界面组成的多相非均质材料或混合物<sup>[1-2]</sup>,属高填充复合材料(highly-filled polymer composites)<sup>[3]</sup>。本研究选取PBX-9502作为研究对象,其含有质量分数95%的三氨基三硝基苯(TATB)晶粒和5%的黏结剂<sup>[4]</sup>。

在实际使用过程中,由于昼夜、季节的变化,PBX材料会经受一系列的热循环加载,产生不可逆的体积增长,这种不可逆的体积增长现象被称作热棘轮增长<sup>[5]</sup>。在热作用下,炸药热胀冷缩产生宏观上的尺寸变化和各向异性体积膨胀,产生的药壳间隙则使得武

器战斗部装药在振动、冲击、热加载环境中容易与壳体发生摩擦、碰撞,影响系统的安全使用<sup>[6]</sup>。国内外学者对PBX材料的热棘轮增长现象开展了相关研究,发现热循环加载后PBX炸药感度增加<sup>[7-9]</sup>,其主要原因是热膨胀过程中产生了新的孔隙或已有的孔隙发生变化<sup>[10]</sup>,例如Willey等<sup>[11]</sup>发现 $\Phi 10 \times 0.8$  mm的PBX-9502圆柱体经过热循环后空腔数量和尺寸增加,孔隙体积分数从1.6%增长至2.5%。

Thompson等<sup>[12-13]</sup>通过实验探索PBX-9502在热加载过程中出现的不可逆体积增长现象,发现其体积增长的幅度会随着周期的增加而逐渐减小,在发生体积增长的样品中,其拉伸断裂应力和弹性模量均较低,包含了更细的孔隙,孔隙的分布也更广,并且Mcgrane等<sup>[14]</sup>发现PBX-9502在不可逆变形过程中产生的孔隙主要是晶间裂纹。Schwarz等<sup>[15]</sup>猜测在PBX-9502中,不可逆变形主要是TATB晶粒的各向异性所致,但是学术界对于影响PBX-9502不可逆变形和孔隙变化的主要因素还缺乏清晰的认识,对机理的研究仍显薄弱。目前,在数值计算中很少考虑到材料的热学性能和TATB晶粒的各向异性,缺乏明确的模型来预测PBX-9502中的热棘轮增长现象。

认识和模拟多晶TATB基复合材料的热膨胀是高能炸药力热模型研究中的一个重要方面,这种模拟可用于指导设计和操作决策制定,尤其是在武器系统部

收稿日期:2020-04-15;修回日期:2020-05-18

网络出版日期:2021-05-12

基金项目:国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院NSAF联合基金资助(U183010034);国家重点研发计划(2016YFB0201004);科学挑战专题资助(TZ2018002)

作者简介:王艺(1995-),男,硕士研究生,从事冲击动力学、计算动力学等研究。e-mail: 852212919@qq.com

通信联系人:黄西成(1966-),男,博士,研究员,从事冲击动力学、爆炸力学、计算动力学等研究。e-mail: huangxc@caep.cn

引用本文:王艺,黄西成. PBX-9502的热循环不可逆变形机理数值模拟分析[J]. 含能材料, 2021, 29(12):1152-1159.

WANG Yi, HUANG Xi-cheng. Numerical Simulation Analysis of Irreversible Deformation Mechanism Caused by Thermal Cycling of PBX-9502[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2021, 29(12):1152-1159.

件的安全性和完整性方面。几十年来, TATB 复合材料在热膨胀方面的若干问题, 一直是研究的重点和难点<sup>[16-17]</sup>。因此, 开展 PBX-9502 在热循环载荷下的不可逆变形机理研究, 有助于深入认识 TATB 基炸药的环境适应性, 进而提高系统的安全性和可靠性。

本研究针对 PBX-9502 的不可逆变形试验, 根据材料中 TATB 晶粒的随机分布特征, 建立三相微结构模型, 分别采用各向异性热弹性、热弹塑性、双线性本构描述 TATB 晶粒变形、黏结剂损伤以及晶粒/黏结剂界面的破坏, 利用扩展有限元 (XFEM) 法计算裂纹扩展。通过分析 PBX-9502 在热循环加载过程中的黏结剂损伤和晶粒/黏结剂界面的破坏等对不可逆变形的影响, 研究 PBX-9502 不可逆变形的微观机理。

## 2 数值模拟

### 2.1 热棘轮增长实验的分析

Thompson 等<sup>[12]</sup>对 PBX-9502 的热棘轮增长现象开展了相关测量, 试件为  $\Phi 5 \times 5$  mm 的 PBX-9502 圆柱体, 在两个极端温度  $-43$  °C 和  $113$  °C 之间以交替加热和冷却的方式进行循环加载, 每次循环的初始点和终点温度为室温 ( $23$  °C), 即一次热循环的加载历程为: 从  $23$  °C 开始, 先冷却到  $-43$  °C, 再加热到  $113$  °C, 最后重新回到  $23$  °C, 温升/降率为  $1$  °C $\cdot$ min<sup>-1</sup>。图 1 为该试验测得的前 10 个热循环过程中, 每一次循环加载后的不可逆应变  $\varepsilon$  随循环次数  $n$  增加而变化的历程。

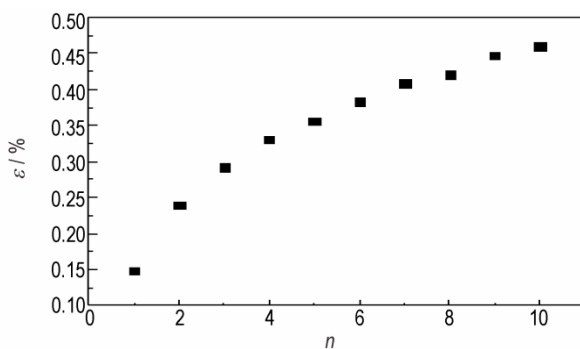


图 1 PBX-9502 试件在  $-43$  °C 至  $113$  °C 之间热棘轮增长<sup>[12]</sup>

Fig.1 Dimensional changes and irreversible growth of PBX-9502 specimens under cyclic heating / cooling between  $-43$  °C and  $113$  °C<sup>[12]</sup>

从图 1 中的试验数据可知: 不可逆应变  $\varepsilon$  与循环次数或周期  $n$  的关系近似于对数曲线:

$$\varepsilon = 0.1343 \ln n + 0.146 \quad (1)$$

随着循环次数  $n$  的增加, 不可逆应变的增长趋于平缓。

### 2.2 PBX-9502 微观建模

研究 PBX-9502 炸药的热棘轮增长现象, 采用微结构表征技术并与其宏观力学性能相关联是一种非常有效的, 也是非常重要的研究手段<sup>[18-20]</sup>。然而, PBX-9502 的微结构建模仍是一个挑战<sup>[21]</sup>, 这种挑战在于如何精确表征晶粒级配, 相材料性能等微结构特征。本研究利用 Voronoi 多边形颗粒建立材料的微结构模型<sup>[2]</sup>, 同时考虑了 PBX-9502 中各向异性 TATB 晶粒、黏结剂以及晶粒/黏结剂界面的热力学性能。

#### 2.2.1 PBX-9502 微结构建模

PBX-9502 材料的主要成分为 TATB 晶粒和黏结剂, 在微观尺度上, 可将之看作三相非均质复合材料: TATB 晶粒、黏结剂、晶粒/黏结剂界面, 如图 2 所示<sup>[22]</sup>。

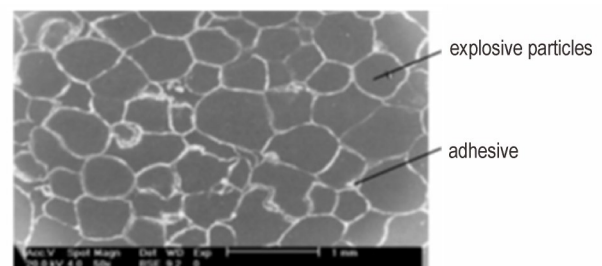


图 2 PBX 的 SEM 图像<sup>[22]</sup>

Fig.2 SEM photograph of PBX<sup>[22]</sup>

根据材料的微结构特点, 在蒙特卡洛方法中引入级配的概念, 与 Voronoi 方法结合来生成多边形颗粒, 建立高颗粒体积分数的 PBX-9502 微结构模型<sup>[2]</sup>。

由蒙特卡洛级配思想<sup>[23]</sup>生成给定级配的随机圆, 然后以圆心作为 Voronoi 多边形的中心点生成 Voronoi 多边形, 接着对 Voronoi 多边形进行收缩, 在颗粒间生成  $3$  μm 厚的黏结层, 最后对颗粒进行切角和光滑处理。设置的级配参数见表 1。

表 1 Voronoi 模型级配参数

Table 1 Grading parameters of voronoi model

area / mm	grading / mm	number of particles
	0.052	5
0.5×0.5	0.026	95
	0.011	12

由该级配得到炸药颗粒体积占比为 87% 的 PBX-9502 微结构几何模型, 如图 3 所示。

由于 TATB 晶粒具有高度的各向异性, 在 Voronoi 模型中, 以随机取向的方式给每个颗粒赋予局部的材料方向。

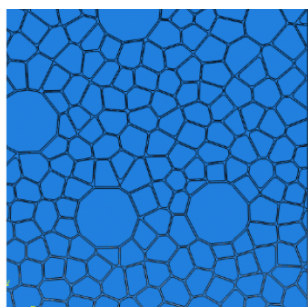


图3 Voronoi模型

Fig.3 Voronoi model

### 2.2.2 微结构材料本构模型

在PBX-9502的细观建模过程中,还需设置各组分材料的材料性能。本研究考虑了PBX-9502中各向异性TATB晶粒、黏结剂以及晶粒/黏结剂界面的热力学性能,还考虑了黏结剂的拉伸破坏和晶粒/黏结剂界面的脱黏<sup>[14,24]</sup>。

#### 2.2.2.1 TATB材料各向异性弹性和各向异性热膨胀

张丘等<sup>[25]</sup>的研究表明,单个完好的TATB晶体经热循环后不会出现不可逆应变,因此,可将TATB晶体视为各向异性的线弹性体。各向异性线弹性体本构方程的一般形式为<sup>[26]</sup>:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha_{kl}\Delta T) \quad (2)$$

式中, $\sigma_{ij}$ 为应力张量,GPa; $\varepsilon_{kl}$ 为应变张量,为无量纲参数; $C_{ijkl}$ 为四阶弹性张量,GPa; $\alpha_{kl}$ 为热膨胀系数张量, $^{\circ}\text{C}^{-1}$ ; $\Delta T$ 为温度变化量, $^{\circ}\text{C}$ 。

由弹性模量的局部对称及模量的主对称性, $C_{ijkl} = C_{klij} = C_{jilk} = C_{ikjl}$ ,四阶弹性张量 $C_{ijkl}$ 可通过Voigt标记法简化为含21个分量的二阶弹性张量 $E_{ij}$ ,GPa。同理,热膨胀系数张量 $\alpha_{kl}$ 可通过Voigt标记法简化为含6个分量的向量 $\beta_j$ , $^{\circ}\text{C}^{-1}$ 。采用Schlenker方法<sup>[27]</sup>,通过晶格参数<sup>[28-29]</sup>即可求得TATB的弹性张量 $E_{ij}$ 和热膨胀系数 $\beta_j$ 。

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} 65.7 & 18.5 & 4.0 & -0.2 & -1.0 & 1.0 \\ & 62.0 & 5.0 & 0.6 & -0.5 & 1.0 \\ & & 18.3 & 0.2 & -0.4 & -0.4 \\ & \text{sym} & & 1.4 & 0.1 & 0.3 \\ & & & & 0.68 & 0.4 \\ & & & & & 21.6 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\beta_j = \begin{pmatrix} 8.28 \\ 29.04 \\ 264.7 \\ 0.41 \\ -26.14 \\ 3.34 \end{pmatrix}$$

#### 2.2.2.2 界面模型

引入界面双线性本构模型,即线弹性应力-分离准则<sup>[30]</sup>来描述晶粒/黏结剂界面的脱黏,图4为该模型在一维时的示意图。

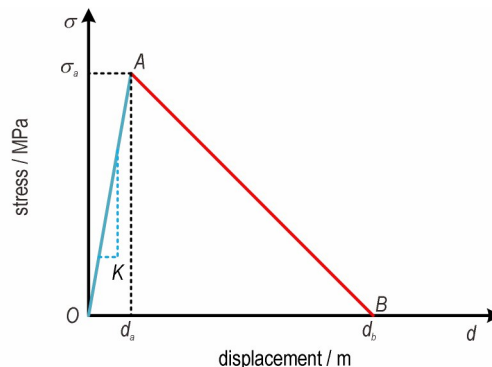
图4 界面双线性本构模型<sup>[30]</sup>Fig.4 Interface bilinear constitutive model<sup>[30]</sup>

图4中 $d$ 代表界面张开位移,m; $\sigma_a$ 为界面破坏应力,MPa;OA边的斜率 $K$ , $\text{MPa}\cdot\text{m}^{-1}$ ,是界面初始刚度,三角形OAB的面积为断裂能 $G$ , $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ 。当界面受到外力加载时,加载路径为OA,若加载的应力首次达到 $\sigma_a$ ,界面开始脱黏;继续加载,加载路径变为AB,界面刚度逐渐降低,且不可恢复,最后达到B点处时刚度变为0,界面完全破坏。

在三维空间中,破坏应力 $\sigma_a$ 包含了 $\sigma_{11}$ , $\sigma_{22}$ , $\sigma_{33}$ 三个分量,分别代表法向和两个切向的最大破坏应力;初始界面刚度 $K$ 包含了 $K_{11}$ , $K_{22}$ , $K_{33}$ 三个分量,分别代表法向和两个切向的初始界面刚度。

实验测得<sup>[31]</sup>:界面的法向破坏应力 $\sigma_{11} = 0.759$  MPa,切向破坏应力 $\sigma_{22} = \sigma_{33} = 0.97$  MPa,设置晶粒/黏结剂界面的材料参数如表2所示。

表2 界面材料参数<sup>[31]</sup>Table 2 Material parameters of interface<sup>[31]</sup>

$K_{11}$	$K_{22}$	$K_{33}$	$\sigma_{11}$	$\sigma_{22}$	$\sigma_{33}$	$G$
/MPa·m <sup>-1</sup>	/MPa·m <sup>-1</sup>	/MPa·m <sup>-1</sup>	/MPa	/MPa	/MPa	/J·m <sup>-2</sup>
10 <sup>6</sup>	10 <sup>6</sup>	10 <sup>6</sup>	0.759	0.97	0.97	81

#### 2.2.2.3 黏结剂热弹塑性模型

PBX-9502的黏结剂为Kel-F 800,材料性质受温度影响较大,当达到特定温度时,出现玻璃化转化现象,材料属性急剧变化,在建模时采用温度相关的弹塑性模型,其杨氏模量与泊松比随温度的变化如表3所示<sup>[32]</sup>。

黏结剂的塑性参数和拉伸强度见表4<sup>[32]</sup>。

黏结剂的热膨胀系数也是一个很重要的材料参

数, 这会影响黏结剂与 TATB 之间的互相作用以至于影响材料内应力的分布, 设置黏结剂的热膨胀系数如表 5 所示<sup>[33]</sup>。

表 3 黏结剂的杨氏模量与泊松比随温度的变化<sup>[32]</sup>

Table 3 Young's modulus and poisson's ratio of binder with temperature<sup>[32]</sup>

T / °C	Young's modulus / MPa	Poisson's ratio
-53	856	0.3
-20	855	0.3
-10	853	0.31
0	850	0.31
10	825	0.32
20	800	0.32
30	600	0.33
40	200	0.35
50	80	0.356
60	10	0.36
70	7	0.37
75	5	0.375
120	5	0.375

表 4 黏结剂的塑性参数和拉伸强度<sup>[32]</sup>

Table 4 Plastic parameters and tensile strength of binder<sup>[32]</sup>

mechanical properties	yield stress / MPa	plastic strain
plastic parameters	2	0
	3	1.5
	T / °C	tensile strength / MPa
tensile strength	-50	20
	0	20
	21	10

表 5 黏结剂的热膨胀系数<sup>[33]</sup>

Table 5 Thermal expansion coefficient of binder<sup>[33]</sup>

T / °C	thermal expansion coeff / 10 <sup>-5</sup> · °C <sup>-1</sup>
-10	8.6
0	5.5
20	5.5
40	3.3
60	3.3
65	2.5
75	2.5
80	1

### 2.3 仿真计算

设定仿真计算的条件: 设定加载的起始点和终点温度为 23 °C, 从 23 °C 开始, 先加热到 103 °C, 再冷却到 -57 °C, 最后重新回到 23 °C, 以此作为一个周期的

加载路径, 温升/降率 1 °C · min<sup>-1</sup>, 如图 5, 加载 10 个周期; 温度加载采用场变量形式, 黏结剂的破坏采用基于最大主应力的启裂准则以及基于断裂能的裂纹张开准则, 取黏结剂的断裂能为 100 J · m<sup>-2</sup><sup>[34]</sup>。

计算中的试件假定为平面应力模型, 垂直方向为轴向。利用 2.2.1 中的方法建立了规模为 0.5 × 0.5 mm 的 Voronoi 模型, 图 3。TATB 晶粒的弹性模量和热膨胀系数分别采用公式 3 中的  $E_{ij}$  和  $\beta_j$ ; 晶粒/黏结剂的界面设置见表 2; 黏结剂的弹性、塑性参数, 拉伸强度和热膨胀系数见表 3 至表 5, 利用扩展有限元法 (XFEM) 来计算裂纹的启裂及扩展; 其他计算参数设置如表 6 所示<sup>[33]</sup>。

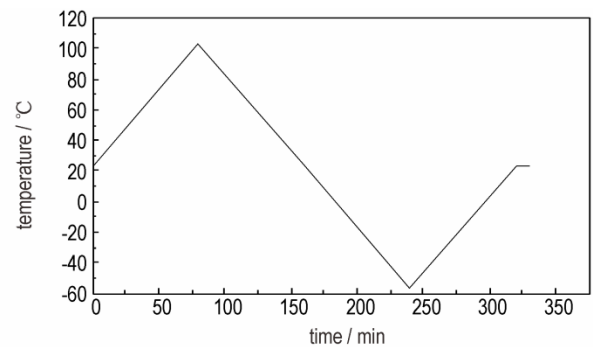


图 5 一个周期的温度加载历程

Fig.5 Temperature loading history for one cycle

表 6 黏结剂和 TATB 的热力学参数<sup>[33]</sup>

Table 6 Thermodynamic parameters of binder and TATB<sup>[33]</sup>

material	$\rho$ / kg · m <sup>-3</sup>	$\lambda$ / W · m <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup>	$c$ / J · kg <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup>
binder	2030	0.15	470
TATB	1940	0.544	1170

Note:  $\rho$  is density,  $\lambda$  is thermal conductivity, and  $c$  is the heat capacity of the material.

### 3 结果与分析

加载过程中, PBX-9502 试件 (图 3) 中的应力云图如图 6。加载结束后, PBX-9502 试件 (图 3) 的损伤如图 7, 其中图 7a 为加载结束后的模型; 区域 A 发生了黏结剂的开裂, 见图 7b; 图 7c~7e 分别为 B 区域晶粒/黏结剂界面脱黏形成的裂缝、裂缝的法向间隙和切向滑移。

由图 6、图 7 可见, 在温度加载过程中, PBX-9502 试件内部产生了不均匀的应力场, 当局部应力大于材料强度时, 产生黏结剂的破坏和晶粒/黏结剂界面的脱黏。推测其原因为: TATB 晶粒的各向异性弹性以及各向异性热膨胀、TATB 晶粒与黏结剂热力学性能的



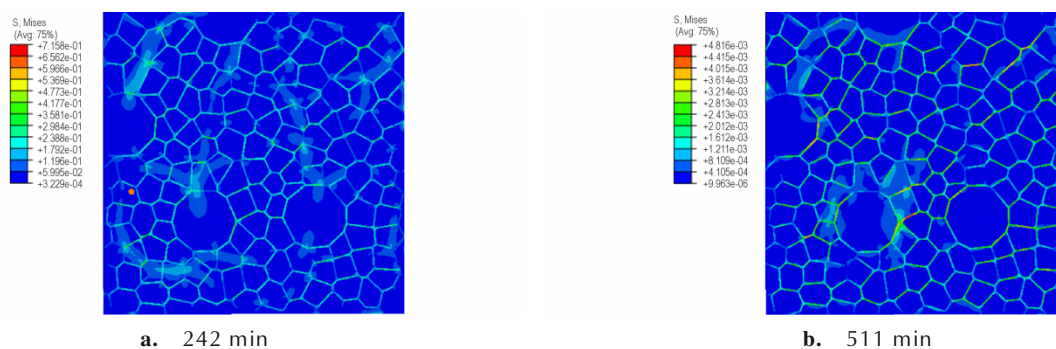


图6 两个不同时刻PBX-9502试件中的应力云图

Fig.6 Stress field at two certain time of PBX-9502

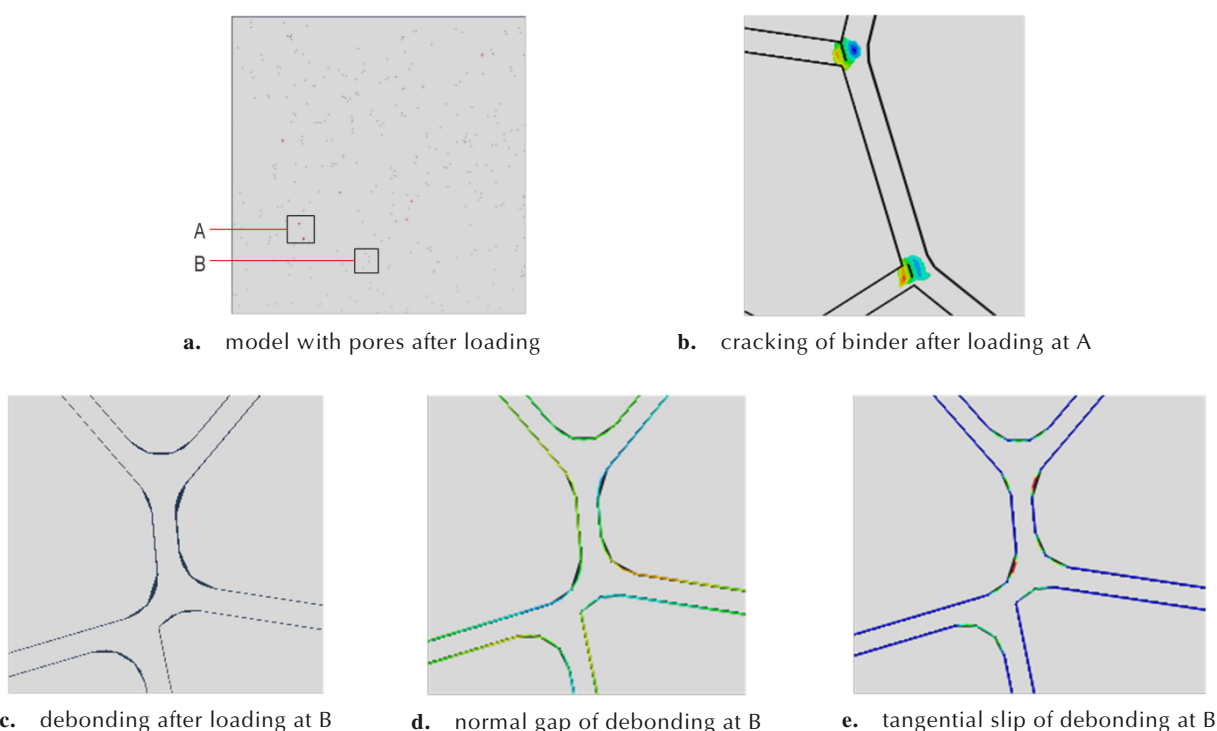


图7 加载结束后PBX-9502试件的裂纹和界面脱黏

Fig.7 Cracking and debonding after loading of PBX-9502

差异,导致TATB晶粒变形与黏结剂变形不协调。

图8和图9分别为加载过程中当温度为103℃和-57℃时PBX-9502试件(图3)晶粒/黏结剂界面的法向间隙和切向滑移。由图8和图9可知:在加热到103℃时,试件中的界面几乎不存在法向间隙,仅存在切向的滑移。在冷却到-57℃时,大颗粒附近出现界面的法向间隙,切向的滑移距离也更大。结果表明:PBX-9502在冷却阶段更容易出现界面的脱黏,受到较大的拉应力,这也意味着在冷却阶段更容易产生黏结剂开裂。

图10为计算过程中颗粒尖端A点处裂纹的萌生

及演化过程。

裂纹起始点位于图10a中的A点所示颗粒尖端处;图10b中裂纹起裂时温度为-15℃,此时PBX-9502处于冷却阶段;裂纹的起点和终点都位于颗粒边界上。

数值计算中,每一次循环加载后PBX-9502的轴向应变 $\varepsilon$ 随循环次数 $n$ 增加而变化的历程如图11所示。由图11可知:当黏结剂取弹性本构时,最大轴向应变接近0.17%,小于使用塑性本构时的0.2%,而且周期性的应变增长也更缓慢。这意味着黏结剂的塑性是PBX-9502应变增长的来源之一。

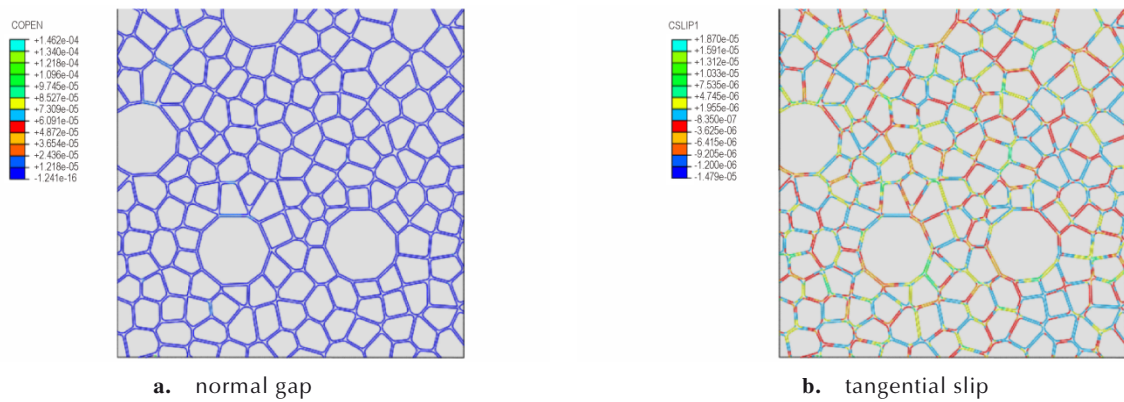


图8 晶粒/黏结剂界面的法向间隙和切向滑移(103 °C)  
Fig.8 Normal gap and tangential slip of interface(103 °C)

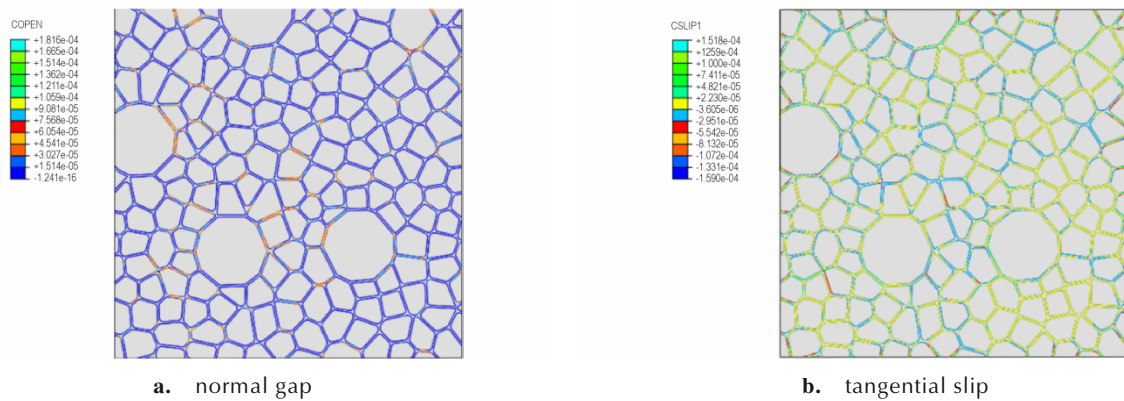


图9 晶粒/黏结剂界面的法向间隙和切向滑移(-57 °C)  
Fig.9 Normal gap and tangential slip of interface(-57 °C)

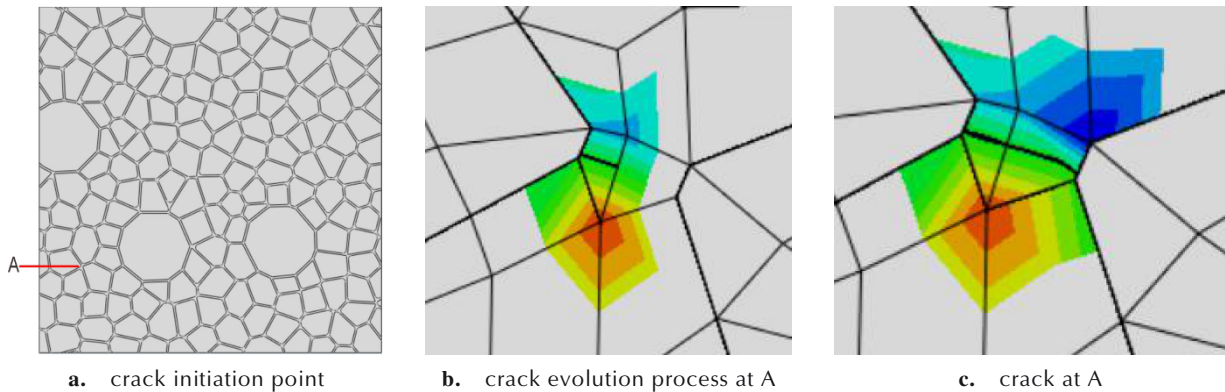


图10 A点处的裂纹萌生及演化  
Fig.10 Crack initiation and evolution at a certain point at A

Bennett 等<sup>[35]</sup>通过数值模拟也对PBX-9502的不可逆变形进行了研究,该研究中,PBX-9502在第10个加载周期的不可逆变应变约为1.20%,远大于实验测得的0.45%<sup>[12]</sup>和0.25%<sup>[9]</sup>。与之相比,本研究通过计算得到的不可逆变应变为0.2%,更贴近实验结果。

目前为止,学术界对PBX-9502的热循环不可逆变形现象的相关研究以宏观试验居多,积累了一定的

理论基础,但是对机理的认识仍显薄弱,由于PBX-9502微结构复杂,在细观尺度上的研究容易受到试验仪器和建模方法的限制。本研究引入带有级配的Voronoi模型,采用各向异性热力学细观建模方法,通过扩展有限元计算PBX-9502在温度循环加载过程中的应力不协调状态,将PBX-9502的细观损伤与宏观不可逆变形结合起来,对于PBX-9502热循环不可逆

变形现象的机理研究,具有一定的指导性。然而,通过数值方法计算PBX-9502的细观损伤是一种前沿且较为困难的问题,还处于理论研究阶段,许多问题尚未解决,有待进一步的探索和完善。

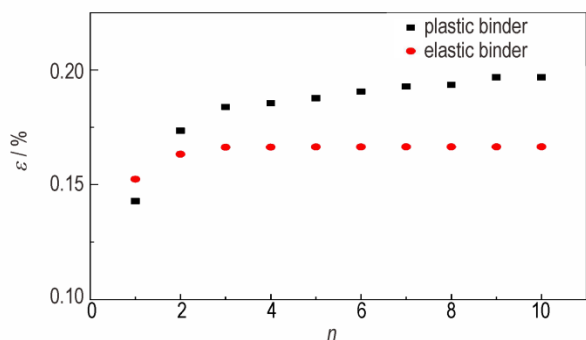


图11 循环加载后PBX-9502的轴向应变

Fig.11 The axial strain at the end of cyclic loading of PBX-9502

## 4 结论

(1) 在温度场作用下, TATB晶粒的各向异性弹性以及各向异性热膨胀、TATB晶粒与黏结剂热力学性能的差异, 导致晶粒变形与黏结剂变形不协调, 产生非均匀应力场。当局部应力超过材料的拉伸强度时, PBX-9502内部萌生裂纹, 随着温度的循环, 裂纹进一步扩展, 最终导致PBX-9502的不可逆变形。

(2) 仿真计算显示: 黏结剂的塑性也是PBX-9502不可逆变形的来源之一, 而且对应变的周期性变化趋势会造成一定的影响。

(3) 在冷却过程中, PBX-9502更容易产生晶粒/黏结剂界面的脱黏。

### 参考文献:

- [1] Skidmore C B, Phillips D S, Howe P W, et al. The evolution of microstructural changes in pressed HMX explosives[R]. Processing of 11th Detonation Symposium LA-UR-98-3473, 1998.
- [2] 康歌, 陈鹏万, 曾乙伦, 等. 一种高颗粒体积分数PBX细观模型的生成方法[J]. 含能材料, 2018, 26(9): 772-778.  
KANG Ge, CHEN Peng-wan, ZENG Yi-lun, et al. A method of generating mesoscopic model for PBXs with high particle volume fraction [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2018, 26(9): 772-778.
- [3] He G, Gong F, Liu J, et al. Improved mechanical properties of highly explosive-filled polymer composites through graphene nanoplatelets[J]. *Polymer Composites*, 2018, 39(11): 3924-3934.
- [4] Baer M R. Modeling heterogeneous energetic materials at the mesoscale[J]. *Thermochimica Acta*, 2002, 384(1): 351-367.
- [5] 李玉斌, 聂福德, 孙杰, 等. PBX药柱的不可逆长大对TATB/黏结剂界面粘结合性能的影响[J]. 火炸药学报, 2001, 24(4): 16-17+20.
- [6] 李文彬, 王晓鸣, 赵国志, 等. 装药底隙对弹底应力及发射安全性影响研究弹道学报[J]. 弹道学报, 2001, 13(3): 64-67.  
LI Wen-bin, WANG Xiao-ming, ZHAO Guo-zhi, et al. The research of the effect of base gap on the stress of explosives and the lurching safety[J]. *Journal of Ballistics*, 2001, 13(3): 64-67.
- [7] Dallman J C, Wackerle J. Temperature-dependent shock initiation of TATB-based high explosives [R]. Processing of 10th Detonation Symposium LA-UR-93-2904, 1993.
- [8] Mulford R N, Swift D. Sensitivity of PBX-9502 after ratchet growth [C]//AIP Conference Proceedings. AIP, 2012, 1426(1): 311-314.
- [9] 李敬明, 温茂萍, 黄毅民. 热循环对TATB基高聚物粘结炸药性能的影响研究[J]. 含能材料, 2005, 13(4): 208-210.  
LI Jing-ming, WEN Mao-ping, HUANG Yi-ming. Effect of thermal cycling test on the properties of TATB based PBX[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2005, 13(4): 208-210.
- [10] Urtiew P A, Tarver C M, Maienschein J L, et al. Effect of confinement and thermal cycling on the shock initiation of LX-17 [J]. *Combust and Flame*, 1996, 105(1): 43-53.
- [11] Willey T M, Buuren T V, Lee J R I, et al. Changes in pore size distribution upon thermal cycling of TATB-based explosives measured by ultra-small angle X-ray scattering [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2010, 31(6): 466-471.
- [12] Thompson D G, Schwarz R B, DeLuca R. Irreversible volume expansion of a TATB-based composite and compressive strength [C]//AIP Conference Proceedings. AIP, 2017, 1793(1): 40003.
- [13] Thompson D G, Brown G W, Olinger B, et al. The effects of TATB ratchet growth on PBX 9502 [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2010, 35(6): 507-513.
- [14] Mcgrane S D, Aslam T D, Pierce T H, et al. Temperature of shocked plastic bonded explosive PBX 9502 measured with spontaneous Stokes/anti-stokes raman [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 123(4): 045902.
- [15] Schwarz R B, Liu C, Thompson D G. Anisotropy in the ratchet growth of PBX 9502 [R]. LA-UR-15-21827, 2015.
- [16] Skidmore C B, Butler T A, Sandoval C W. The elusive coefficients of thermal expansion in PBX 9502 [R]. LA-14003, 2003.
- [17] Souers P C, Lewis P, Hoffman M, et al. Thermal expansion of LX-17 and PBX 9502, and ultrafine TATB [J]. *Propellants Explosives Pyrotech*, 2011, 36(4): 335-340.
- [18] Chen P, Huang F, Ding Y. Microstructure, deformation and failure of polymer bonded explosives [J]. *Journal of Materials Science*, 2007, 42(13): 5272-5280.
- [19] Willey T M, Overturf G. Towards next generation TATB-based explosives by understanding voids and microstructure from 10 nm to 1 cm [R]. Processing of 40th International Annual Conference of ICT LLNL-PROC-411719, 2009.
- [20] Yeager J D, Manner V W, Stull J A, et al. Importance of microstructural features in mechanical response of cast-cured HMX formulations [C]//AIP Conference Proceedings. AIP, 2018, 1979(1): 70033.
- [21] Arora H, Tarleton E, Li-Mayer J, et al. Modelling the damage

- and deformation process in a plastic bonded explosive microstructure under tension using the finite element method [J]. *Computational Materials Science*, 2015, 110(1): 91–101.
- [22] 刘群, 陈郎, 伍俊英, 等. PBX 炸药微观结构冲击点火的二维数值模拟[J]. 火炸药学报, 2011, 34(6): 18–24.  
LIU Qun, CHEN Lang, WU Jun-ying, et al. Two-dimensional mesoscale simulation of shock ignition in PBX explosives [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2011, 34(6): 18–24.
- [23] 韦兴文, 李明, 李敬明, 等. 孔隙对 TATB 基高聚物粘结炸药有效弹性模量的影响[J]. 含能材料, 2014, 22(4): 493–497.  
WEI Xing-wen, LI Ming, LI Jing-ming, et al. Influence of pore properties on effective elastic modulus of TATB based polymer bonded explosive [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2014, 22(4): 493–497.
- [24] 周红萍, 庞海燕, 温茂萍, 等. 3 种粘结剂材料的力学性能对比研究[J]. 材料导报, 2009, 23(24): 34–36+52.  
ZHOU Hong-ping, PANG Hai-yan, WEN Mao-ping, et al. Comparative studies on the mechanical properties of three kinds of binders [J]. *Materials Review*, 2009, 23(24): 34–36+52.
- [25] 张丘, 黄交虎, 孙杰. 压制参数对 TATB 基 PBX 膨胀特性的影响[J]. 火炸药学报, 2010, 33(5): 13–15.  
ZHANG Qiu, HUANG Jiao-hu, SUN Jie. Effects of pressing parameters on irreversible growth of TATB-based PBX [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2010, 33(5): 13–15.
- [26] Bower A F. *Applied mechanics of solids* [M]. Boca Raton: CRC Press, 2010: 76–77.
- [27] Schlenker J L, Gibbs G V, Boisen M B. Strain-tensor components expressed in terms of lattice-parameters [J]. *Acta Crystallographica Section A*, 1978, 34(1): 52–54.
- [28] Bedrov D, Borodin O, Smith G D, et al. A molecular dynamics simulation study of crystalline 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene as a function of pressure and temperature [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2009, 131(22): 224703.
- [29] Kolb J R, Rizzo H F. Growth of 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB) I. anisotropic thermal expansion [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 1979, 4(1): 10–16.
- [30] 范正杰, 刘占芳. 升温 and 降温引起 TATB 基 PBX 炸药脱黏的数值分析[J]. 应用数学和力学, 2020, 41(9): 956–973.  
FAN Zheng-jie, LIU Zhan-fang. Numerical analysis on debonding of crystal-binder interface in TATB-based polymer-bonded explosive caused by heating and cooling processes [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2020, 41(9): 956–973.
- [31] 颜熹琳, 唐明峰, 甘海啸, 等. 拉剪复合试验测试炸药晶体/粘结剂界面力学特性[J]. 含能材料, 2016, 24(6): 587–591.  
YAN Xi-lin, TANG Ming-feng, GAN Hai-xiao, et al. Mechanical properties of explosive crystal/binder interface based on tension-shear test [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(6): 587–591.
- [32] Clements B, Mariucescu L, Brown E, et al. Kel-F 800 experimental characterization and model development [R]. LA-UR-07, 2007.
- [33] 温茂萍, 唐维, 董平, 等. 粘结剂含量对热压 TATB 基 PBX 残余应力的影响[J]. 含能材料, 2017, 25(8): 661–666.  
WEN Mao-ping, TANG Wei, DONG Pin, et al. Effect of binder content on residual stress of thermally compacted TATB based PBX [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2017, 25(8): 661–666.
- [34] 黄西成, 李尚昆, 魏强, 等. 基于 XFEM 与 Cohesive 模型分析 PBX 裂纹产生与扩展[J]. 含能材料, 2017, 25(8): 694–700.  
HUANG Xi-cheng, LI Shang-kun, WEI Qiang, et al. Analysis of crack initiation and growth in PBX energetic material using XFEM-based cohesive method [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2017, 25(8): 694–700.
- [35] Bennett K C, Zecevic M, Luscher D J, et al. A thermo-elastoplastic self-consistent homogenization method for inter-granular plasticity with application to thermal ratcheting of TATB [J]. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 2020, 7(1): 1–32.

## Numerical Simulation Analysis of Irreversible Deformation Mechanism Caused by Thermal Cycling of PBX-9502

WANG Yi, HUANG Xi-cheng

(Institute of Systems Engineering, CAEP, Mianyang 621999, China)

**Abstract:** Aiming at the problem of the irreversible deformation mechanism caused by thermal cycling in PBX-9502 (a type of TATB based polymer bonded explosive), a three-phase microstructure model and an extended finite element method (XFEM) are used to establish a calculation model. The model takes into account the anisotropy of the TATB grains, the local differences in the thermodynamic properties of the bonding agent and its interface. Using the established model, the phenomenon and mechanism of irreversible deformation caused by thermal cycling of PBX-9502 are numerically analyzed. The results show that due to the severe anisotropy of TATB grains in PBX-9502 and the differences in the thermodynamic properties of TATB grains and binders, PBX-9502 specimens have internal deformation and stress concentration during thermal cycling. Resulting in the destruction of the bonding agent and the debonding of the interface and other internal damage to the material, which in turn led to the irreversible deformation of the PBX-9502 specimen under thermal cycling. At the end of the calculation, the axial strain of the PBX-9502 specimen reached 0.2%.

**Key words:** polymer bonded explosive (PBX); microstructure model; thermal cycling; irreversible deformation

**CLC number:** TJ55; O34

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2020091

(责编: 高毅)