文章编号: 1001-1455(2014)01-0067-08

烤燃条件下 HMX/TATB 基混合炸药多步热分解反应计算*

马 欣,陈 朗,鲁 峰,伍俊英
(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: 采用多步热分解反应动力学模型,描述单质炸药热分解反应,提出了多组分网格单元计算方法,对以 HMX/TATB 为基的多元混合炸药在烤燃条件下的热反应过程进行了计算。通过炸药烤燃实验测量了炸药内部温度,获得了炸药点火时间,验证了计算的准确性。分析了混合炸药组成比例的变化对炸药热反应性能的影响。在 HMX/TATB 混合炸药热反应阶段,主要是 HMX 发生分解反应释放热量,TATB 的反应量很少,随着混合炸药中 TATB 含量的增多,炸药的点火时间逐渐增长,点火温度逐渐增高,炸药热安全性增强。

关键词: 爆炸力学;多步反应;多组分网格单元;混合炸药;烤燃
中图分类号: O389 **国标学科代码**: 1303599 **文献标志码**: A

炸药装药在热刺激作用下的点火时间、点火温度和反应情况,可以通过炸药烤燃实验进行观测。而根据炸药的结构组成,对炸药热反应过程进行预测计算,一直是人们关心的问题。

早在 1928 年 N. N. Semenov[1] 首次提出采用单步反应动力学模型描述炸药放热分解反应,通过解析计算得到了均温系统中炸药的热爆炸临界温度和绝热爆炸延滞期。但炸药热反应解析计算理论,由于受计算求解方法的制约,对复杂几何结构,非线性加热条件的炸药装药不能求解,难以在工程实际中广泛应用。20 世纪 60 年代以后,随着数值计算的进步,数值计算成为炸药热反应理论分析的主要手段[2-3]。但炸药热反应模型仍采用单步反应模型,即认为炸药由反应物直接生成最终产物,忽略了中间产物对反应过程的影响。由于通过烤燃实验标定炸药反应动力学参数后,采用单步反应模型能够较好地计算炸药装药的点火时间和温度,因此单步反应模型被大量使用[4-5]。但炸药烤燃过程中的热反应与其组分密切相关,单步反应模型不能描述炸药中各组分分解反应历程,无法实现混合炸药热反应过程的预测计算。1981 年,R. R. McGuire 等[6] 提出了单质炸药多步热分解反应动力学模型,准确计算了 HMX、RDX 和 TNT 等炸药的一维热爆炸实验的点火时间。多步热分解反应动力学模型将中间产物考虑到反应过程中,更细致地描述了炸药热反应过程,为混合炸药热反应计算奠定了基础。C. M. Tarver 等[7-8] 建立了交叉反应计算模型,模型中不仅包含炸药多步分解反应,还考虑了粘结剂与炸药分解产物发生的交叉反应,分析了吸热粘结剂和放热粘结剂对 PBX 炸药点火时间的影响。J. J. Yoh 等[9-10] 采用多步热分解反应动力学模型描述了 RDX 和 HMX 炸药在慢速烤燃实验中的热分解过程,并利用 ALE3D 软件对炸药点火后的燃烧爆炸现象进行了模拟计算。W. L. Prerry 等[11] 对 HMX 多步热分解反应动力学模型进行改进,采用过渡态理论描述了 HMX 发生 β 相→δ 相晶型转变的吸热过程,改进后的模型能够获得 HMX 晶型转变过程中的温度平台。W. L. Perry 等[12] 建立了四步可逆反应动力学模型,对慢速烤燃实验和摩擦引起的 PBX9501 炸药点火进行数值模拟。从现有研究情况看,炸药多步热分解反应动力学模型主要被用于单质炸药或单组元的混合炸药计算,而对于多组元混合炸药,如何处理各炸药组分对热反应的影响是需要解决的主要问题。

本文中,通过烤燃实验获得以 HMX 和 TATB 为基的混合炸药的基本热反应特征,采用多步热分

* **收稿日期**: 2012-09-03; **修回日期**: 2012-10-20
基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973 计划)项目(61383)
作者简介: 马 欣(1983—),女,博士研究生。

解反应动力学模型描述单质炸药热分解反应，提出多组分网格单元计算方法，计算各组分对炸药热量的贡献，从而实现混合炸药热反应的预测计算，分析炸药组分变化对其热反应性能的影响。

1 炸药烤燃实验

图 1 是炸药烤燃实验装置简图，实验装置结构和加热方法与传统烤燃弹实验[2]类似。为了更全面地观测炸药热反应特征，测量了炸药内部不同位置的温度。烤燃装置主要由炸药、壳体和端盖组成。受试炸药为 HMX/TATB/Kel-F 混合炸药。烤燃弹壳体是厚 4 mm 的钢壳，药柱直径为 50 mm，长 88 mm。实验时，在烤燃弹内部中心横截面处放置 3 个测温热电偶，电偶 1 位于药柱中心，电偶 2 位于药柱 1/2 半径处，电偶 3 位于药柱边缘。壳体外侧包裹加热套，加热速率为 0.5 K/min。根据热电偶测量的温度随时间的变化曲线，可以获得炸药点火时间和点火时此位置的炸药温度，从而获得炸药基本的热反应特征。

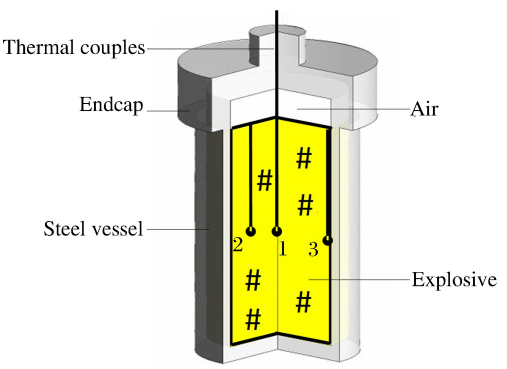


图 1 炸药烤燃实验装置简图

Fig. 1 Schematic geometry of cook-off test

2 混合炸药多步热分解反应计算

混合炸药受热后，外部环境的热量以热传导的形式通过炸药外部的壳体传递到炸药内部，炸药中各个组分，即每种单质炸药和粘结剂，在受热后均要发生分解反应，并且组分之间也有可能发生化学反应。每种单质炸药在相同温度条件下都有各自的分解规律，它们并不是由反应物直接生成产物，而是要经过复杂的多步反应才能完成。炸药发生自热分解反应后，将炸药的化学能转变为热能，随着热量积累，炸药温度逐渐升高，同时又加速了自热分解反应，放出更多的热量，最终导致炸药点火。对混合炸药烤燃过程进行数值模拟，关键是要准确描述混合炸药的热分解反应。采用多步热分解反应动力学模型描述各个组分的分解反应。其中，各个组分在不同热分解阶段时，既发生吸热反应又发生放热反应，它们的吸热量和放热量之和即为炸药的总反应热。

HMX 热分解历程可用 4 步化学反应进行描述[5]：

$$\text{反应 1}\quad \mathrm{A}\longrightarrow \mathrm{B},\qquad r_1=Z_1\exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right)\rho_{\mathrm{A}} \tag{1}$$

$$\text{反应 2}\quad \mathrm{B}\longrightarrow \mathrm{C},\qquad r_2=Z_2\exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right)\rho_{\mathrm{B}} \tag{2}$$

$$\text{反应 3}\quad \mathrm{C}\longrightarrow \mathrm{D},\qquad r_3=Z_3\exp\left(\frac{-E_3}{RT}\right)\rho_{\mathrm{C}} \tag{3}$$

$$\text{反应 4}\quad \mathrm{D}\longrightarrow \mathrm{E},\qquad r_4=Z_4\exp\left(\frac{-E_4}{RT}\right)\rho_{\mathrm{D}}^2 \tag{4}$$

式中：r_m 为质量反应速率，Z_m 为指前因子，E_m 为反应的活化能，m 为反应序号，$m=1,2,\cdots$；ρ_n 为质量浓度，$n=\mathrm{A},\mathrm{B},\cdots$；$R$ 为普适气体常数；A 为固体 β-HMX，B 为固体 δ-HMX，C 为固体中间产物，D 和 E 分别为中间气体产物和最终气体产物。反应 1 是 HMX 发生 β 相→δ 相晶型转变的吸热过程；反应 2 是 δ-HMX 吸收热量生成固体中间产物；反应 3 是轻微放热反应，固体中间产物生成气体中间产物 CH_2O、N_2O、HCN 和 HNO_2；反应 4 是二级气相反应，气体中间产物生成最终气体反应产物，如 CO_2、CO、N_2 和 H_2O，同时释放出大量化学能，最终导致炸药点火。

HMX 热分解过程为连续反应过程，即前一步的生成物就是下一步的反应物，如此依次连续进行，直至反应结束。连续反应可表示为：

$$\mathrm{A}\xrightarrow{k_2}\mathrm{B}\xrightarrow{k_2}\mathrm{C}\xrightarrow{k_4}2\mathrm{D}\xrightarrow{k_5}\mathrm{E} \tag{5}$$

各步反应速率方程可表示为：

$$-\frac{\mathrm{d}\rho_n}{\mathrm{d}t}=k_m\rho_n^x \tag{6}$$

式中：k_m为反应速率常数，x 为反应级数，$x=1,2$；且

$$k_m=Z_m\exp\left(\frac{-E_m}{RT}\right) \tag{7}$$

对应每一步反应，热量生成速率可表示为：

$$S_m=Q_mZ_m\exp\left(\frac{-E_m}{RT}\right)\rho_n^x \tag{8}$$

式中：Q_m为反应热。

因此，HMX 热分解过程中单位时间内生成的热量为：

$$S(\mathrm{HMX})=\rho_{\mathrm{A}}Q_1k_1+\rho_{\mathrm{B}}Q_2k_2+\rho_{\mathrm{C}}Q_3k_3+\rho_{\mathrm{D}}^2Q_4k_4 \tag{9}$$

TATB 热分解历程可用 3 步化学反应进行描述[5]：

$$\text{反应 5}\qquad \mathrm{F}\longrightarrow \mathrm{G}+\mathrm{H_2O},\qquad r_5=Z_5\exp\left(\frac{-E_5}{RT}\right)\rho_{\mathrm{F}} \tag{10}$$

$$\text{反应 6}\qquad \mathrm{G}\longrightarrow \mathrm{H}+\mathrm{Gases},\qquad r_6=Z_6\exp\left(\frac{-E_6}{RT}\right)\rho_{\mathrm{G}} \tag{11}$$

$$\text{反应 7}\qquad \mathrm{H}\longrightarrow \mathrm{I},\qquad r_7=Z_7\exp\left(\frac{-E_7}{RT}\right)\rho_{\mathrm{H}}^2 \tag{12}$$

式中：F 为固体 TATB，G 和 H 均为固体中间产物，I 为最终气体产物。

TATB 的分解反应主要发生在固相中，反应 5 和反应 6 均是吸热反应，H_2O 分子先分解出来，生成中间产物。反应 7 是二级放热反应，由固体中间产物生成最终气体产物，释放出大量化学能。计算中，忽略 H_2O 分子和气体中间产物引起的固体反应物的质量消耗。TATB 分解过程中单位时间内生成的热量为：

$$S(\mathrm{TATB})=\rho_{\mathrm{F}}Q_5k_5+\rho_{\mathrm{G}}Q_6k_6+\rho_{\mathrm{H}}^2Q_7k_7 \tag{13}$$

Kel-F 是一种吸热粘结剂，其分解温度低于 HMX 和 TATB 的分解温度，因此，在相同温度下，Kel-F 的热稳定性最高。Kel-F 的分解反应如下[5]：

$$\text{反应 8}\qquad \mathrm{J}\longrightarrow \mathrm{K},\qquad r_8=Z_8\exp\left(\frac{-E_8}{RT}\right)\rho_{\mathrm{J}} \tag{14}$$

式中：J 为 Kel-F，K 为分解产物。反应 8 是一级吸热化学反应。

同时，Kel-F 中含有 C-H、C-Cl 和 C-F 键，这些键易与 TATB 分解的气体产物如 HCN、CO、CO_2、HNCO 和 NO 等发生吸热反应[11]，最终导致加入吸热粘结剂 Kel-F 后混合炸药的点火时间比单质炸药的点火时间长。反应机制如下：

$$\text{反应 9}\qquad \mathrm{I}+\mathrm{J}\longrightarrow \mathrm{L},\qquad r_9=Z_9\exp\left(\frac{-E_9}{RT}\right)\rho_{\mathrm{I}}\rho_{\mathrm{J}} \tag{15}$$

式中：I 为 TATB 的最终气体产物，L 为反应产物。反应 9 是吸热反应，对于每一个反应物反应级数均为 1。Kel-F 分解过程中单位时间内生成的热量为：

$$S(\text{Kel-F})=\rho_{\mathrm{J}}Q_8k_8+\rho_{\mathrm{I}}\rho_{\mathrm{J}}Q_9k_9 \tag{16}$$

298 K 时，HMX、TATB 和 Kel-F 的物性参数及其热分解反应动力学参数[7]见表 1。

根据炸药烤燃实验，建立炸药烤燃三维数值计算模型。模型中主要考虑炸药、壳体和空气槽，其中壳体外壁为加热边界，以替代外部加热器的作用。炸药烤燃过程涉及的能量变化，主要是外部环境的热量以热传导的形式通过炸药外部的壳体传递到炸药内部，炸药受热后各组分分别进行自热分解反应。在模型中，将计算网格单元设为多种单质炸药及粘结剂组成的混合热分解单元，各组分按自身的多步热分解反应释放或者吸收热量，单元总热量为每个组分吸收和释放热量之和，计算思路如图 2 所示。

表 1 HMX、TATB 和 Kel-F 的物性参数及其热分解反应动力学参数[7]

Table 1 Physical parameter for HMX, TATB and Kel-F as well as their thermal and chemical kinetic parameters[7]

材料	ρ/(kg·m^{-3})	c_V/(J·g^{-1}·K^{-1})	λ/(W·m^{-1}·K^{-1})	m	Z/s^{-1}	E/(J·mol^{-1})	x	Q/(J·g^{-1})
HMX	1 850	1 004.62	0.535 8	1	$7.990\,9\times10^{20}$	203 574	1	+42.0
				2	$1.413\,0\times10^{21}$	221 340	1	+252.0
				3	$2.608\,1\times10^{16}$	186 060	1	−558.6
				4	$1.598\,4\times10^{12}$	143 220	2	−5 615.4
TATB	1 835	1 088.33	0.879 0	5	$7.016\,7\times10^{23}$	252 000	1	+210.0
				6	$8.749\,3\times10^{12}$	176 400	1	+210.0
				7	$4.356\,0\times10^{11}$	141 960	2	−2 940.0
Kel-F	2 020	1 000.43	0.052 7	8	$9.934\,9\times10^{17}$	272 328	1	+5 871.6
				9	$7.694\,8\times10^{23}$	272 328	1	+2 520.0

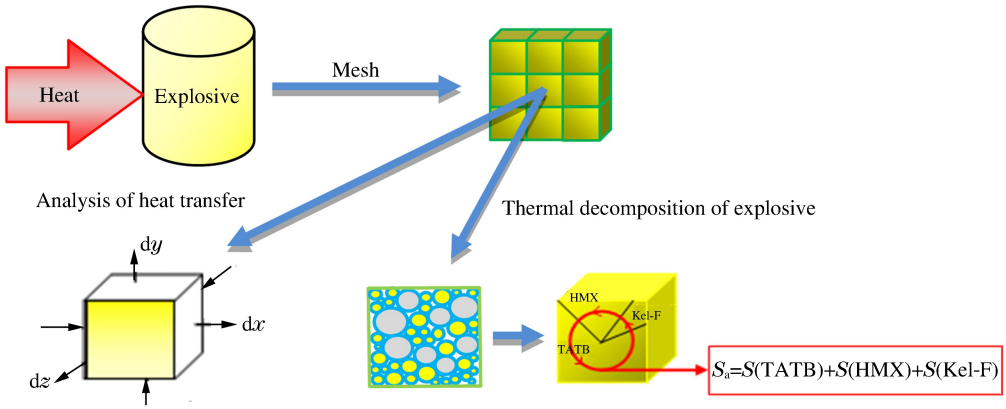


图 2 计算思路示意图

Fig. 2 Sketch map of calculational method

在直角坐标系中,固体炸药烤燃过程中的能量守恒方程为:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}=\lambda\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\lambda\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\lambda\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)+S \tag{17}$$

式(17)左边为控制单元内能的增量,右边前 3 项分别为从 x、y 和 z 方向进入控制单元的净热量,S 为炸药自热反应源项。HMX/TATB/Kel-F 炸药热分解过程中单位时间内生成的总热量为:

$$S_a=\rho_A Q_1 k_1+\rho_B Q_2 k_2+\rho_C Q_3 k_3+\rho_D^2 Q_4 k_4+\rho_F Q_5 k_5+$$
$$\rho_G Q_6 k_6+\rho_H^2 Q_7 k_7+\rho_J Q_8 k_8+\rho_I \rho_J Q_9 k_9 \tag{18}$$

根据单质炸药和粘结剂的热分解反应动力学参数,采用多组分网格单元计算方法,即可对不同组分配比的混合炸药的烤燃过程进行计算,不需要通过实验标定混合炸药的反应动力学参数。

3 结果与讨论

对 HMX、TATB 和 Kel-F 的质量分数 w 分别为 0.38、0.57 和 0.05 的 HMX/TATB/Kel-F 混合炸药的烤燃实验进行数值计算,炸药内部 3 个测点的温度曲线如图 3 所示。测点 1 和 2 处计算曲线的升温速率略高于实验曲线,这可能是由于计算中未考虑壳体与炸药接触面的接触热阻,导致炸药温度的计算值略高于实验值。测点 3 位于炸药表面,与钢壳接触,计算得到的温度曲线与实验曲线基本吻合。

加热速率为 0.5 K/min 的条件下,炸药点火时间的实验值和计算值分别为 24 857 和 21 641 s,误差为 12.9%,两者基本一致,表明利用建立的混合炸药多步热分解反应动力学模型可以较好地计算烤燃炸药热反应过程。由于实验中不能直接测量到炸药的点火温度,炸药的点火温度只能由计算获得,计算得到炸药点火时点火点的温度为 527 K。

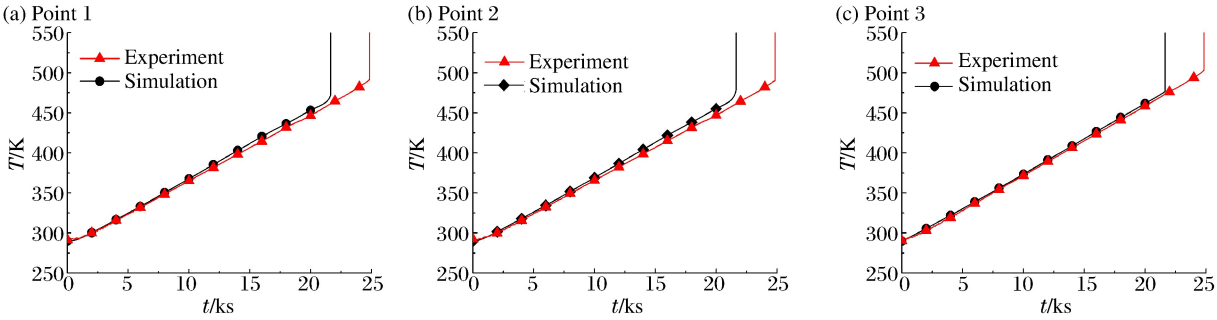


图 3　炸药内部 3 个测点温度曲线

Fig. 3　Temperature-time curves at three points in explosive

图 4 为计算得到的炸药点火点的温度-时间曲线和热量-时间曲线。当炸药放热量急剧增加时，炸药最高温度区域的温度发生突变，此时炸药点火，对应的温度为炸药点火温度。通过炸药点火区域的温度变化，可以分析炸药热反应的全过程。

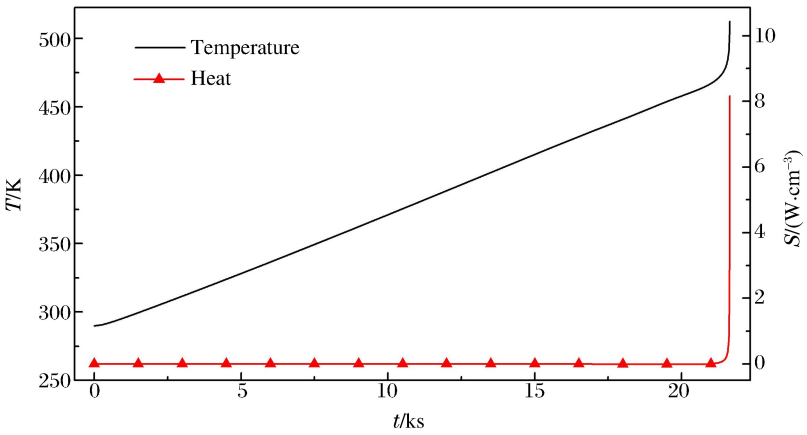


图 4　计算得到的炸药点火点的温度-时间曲线和反应热-时间曲线

Fig. 4　Calculated ignition temperature and reaction heat of explosive varied with time

图 5 为不同时刻炸药点火区域各组分的质量分数分布。当温度高于 414 K 时，约 1% 的 β-HMX 开始发生晶型转变，生成 δ-HMX；当温度达到 452 K 时，β-HMX 基本反应完毕，δ-HMX 含量达到最大值，同时有少量固体中间产物产生；炸药点火前，TATB 和 Kel-F 的反应量很少；当温度达到 527 K 时，炸药点火；此种配比的混合炸药点火主要是由 HMX 分解放热引起的。

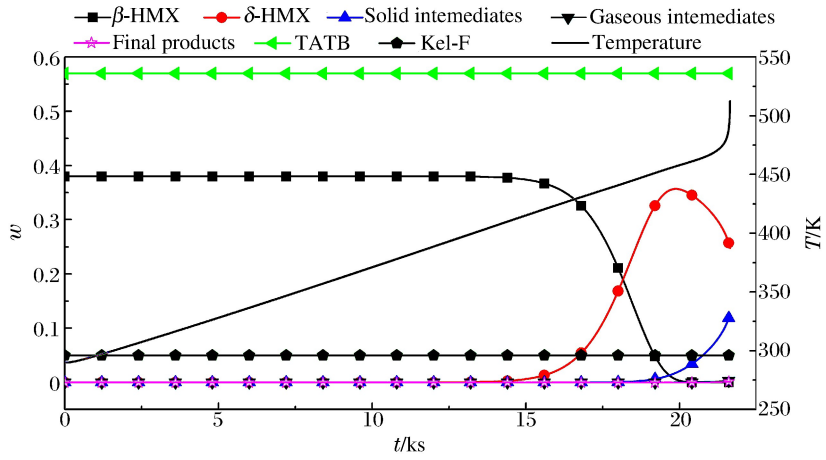


图 5　不同时刻炸药点火区域各组分的质量分数

Fig. 5　Mass fraction of each component in the ignition region of explosive at different times

图 6 给出了不同时刻炸药内部的温度分布。10 000 s 时，外部钢壳温度最高，炸药内部温度最低，热量由钢壳向炸药内部传递。21 641s 时，炸药发生点火，点火区位于药柱底部以炸药柱中线为轴线的环状区域。这是由于炸药的侧面和底面与壳体紧密接触直接受热，而炸药上表面为空气层，空气的导热系数远小于钢的导热系数，所以炸药上部的温度低于下部，点火位置位于炸药的底部。

利用混合炸药热反应计算模型，分别对组分质量分数不同的 6 种混合炸药在 1 K/min 加热速率下的烤燃过程进行了数值计算，计算结果如表 2 所示。从表 2 中可以看出，加热速率为 1 K/min 时，随着混合炸药中 HMX 含量的逐渐减少、TATB 含量的逐渐增加，炸药的点火时间 t 逐渐延长，点火温度 T 逐渐增高。HMX/TATB/Kel-F 炸药烤燃过程中，HMX 反应活化能低，热稳定性差，首先发生分解反应释放热量；HMX 发生快速放热反应 4 之前，TATB 主要吸收热量，随着混合炸药中 TATB 含量的增多，吸收的热量增多，从而延长了混合炸药的点火时间，提高了炸药的热安全性。HMX 发生快速放热反应 4 时，释放的热量远多于热传导所消耗的热量，导致炸药温度迅速升高，热分解反应加速，最终导致炸药点火。炸药点火前，HMX 对炸药热量积累的贡献最大。

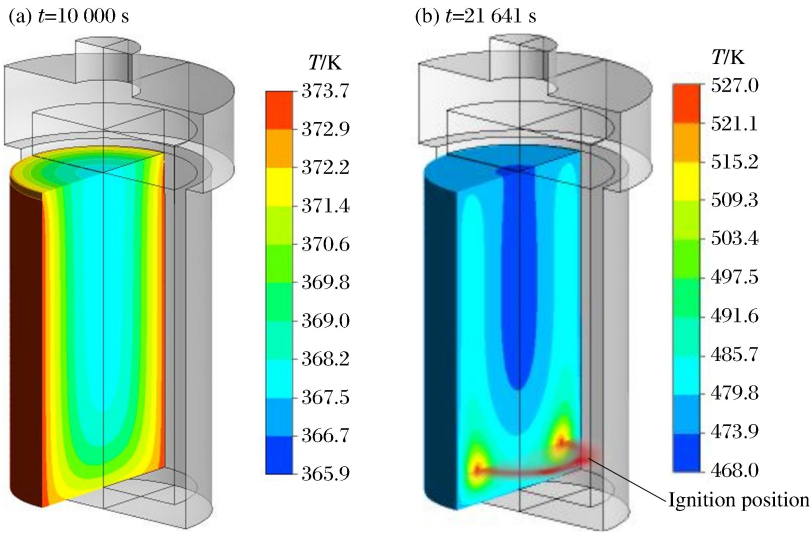


图 6 不同时刻下炸药内部的温度分布

Fig. 6 Temperature distribution in bomb section at different times

表 2 不同组分含量混合炸药烤燃计算结果

Table 2 Calculation results of composite explosives at various content of component

炸药组分	t/s	T/K
w(HMX)∶w(Kel-F)=95∶5	10 965	508
w(HMX)∶w(TATB)∶w(Kel-F)=88∶7∶5	10 974	510
w(HMX)∶w(TATB)∶w(Kel-F)=78∶17∶5	10 988	510
w(HMX)∶w(TATB)∶w(Kel-F)=55∶40∶5	11 036	519
w(HMX)∶w(TATB)∶w(Kel-F)=38∶57∶5	11 095	523
w(HMX)∶w(TATB)∶w(Kel-F)=15∶80∶5	11 289	552
w(TATB)∶w(Kel-F)=95∶5	15 588	620

图 7 给出了不同时刻 w(HMX)∶w(Kel-F)=95∶5 的 HMX/Kel-F 混合炸药点火区域各组分的质量分数分布。当温度达到413K时，约有1%的β-HMX开始发生晶型转变，生成δ-HMX；当温度达

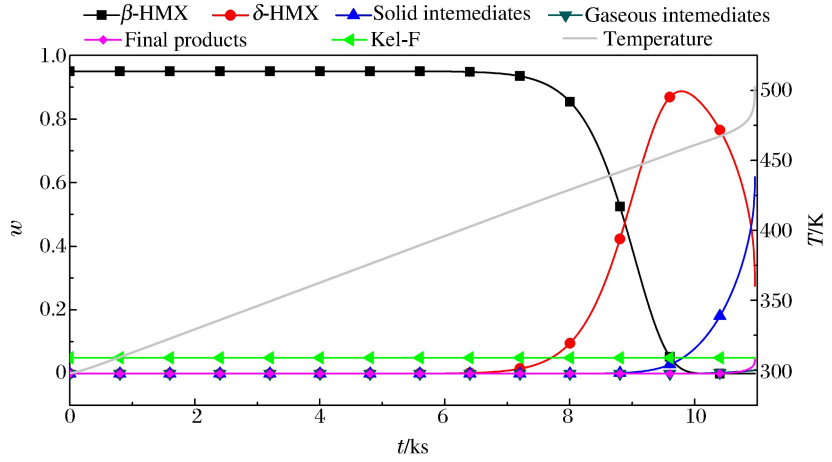


图 7 不同时刻 w(HMX)∶w(Kel-F)=95∶5 的 HMX/Kel-F 混合炸药点火区域各组分的质量分数分布

Fig. 7 Distribution of mass fraction of each component in the ignition region of the HMX/Kel-F composite explosive with w(HMX)∶w(Kel-F)=95∶5 at different times

到 457 K 时，β-HMX 基本反应完毕，δ-HMX 含量达到最大值，同时有少量固体中间产物生成；炸药点火前，Kel-F 未反应；当温度达到 509 K 时，该 HMX/Kel-F 混合炸药点火。

图 8 给出了不同时刻 w(TATB)∶w(Kel-F)=95∶5 的 TATB/Kel-F 混合炸药点火点处各组分的质量分数分布。当温度达到 482 K 时，少量 TATB 开始发生分解反应，生成固体中间产物 G；随着温度的升高，反应加剧；当温度达到 515 K 时，少量固体中间产物 H 和气体产物生成，同时 Kel-F 开始发生吸热反应；当温度达到 627 K 时，TATB/Kel-F 混合炸药点火，此时 TATB 和 Kel-F 反应完毕。Kel-F 与 TATB 的分解产物发生吸热反应，同时自身分解吸热，延长了 TATB/Kel-F 混合炸药的点火时间。

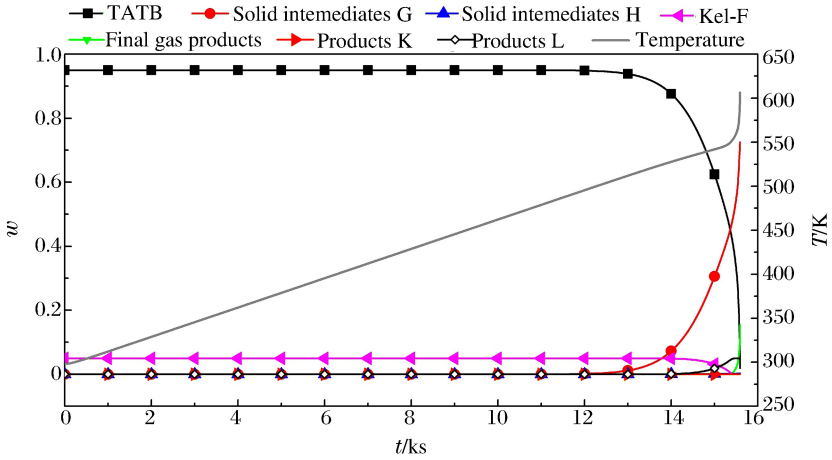


图 8 不同时刻 w(TATB)∶w(Kel-F)=95∶5 的 TATB/Kel-F 混合炸药点火点处各组分的质量分数分布

Fig. 8 Distribution of mass fraction of each component in the ignition region of the TATB/Kel-F composite explosive with w(TATB)∶w(Kel-F)=95∶5 at different times

4 结　论

在单质炸药多步热分解反应动力学模型的基础上，采用多组分网格单元计算方法，实现了混合炸药热反应过程的计算，可根据炸药的配方预测炸药的热安全性。

HMX/TATB/Kel-F 混合炸药烤燃过程中，炸药点火前，主要是 HMX 发生分解反应释放热量，TATB 吸收热量，随着混合炸药中 TATB 含量的增多，TATB 吸收的热量增多，炸药的点火时间逐渐延长，点火温度逐渐升高，炸药的热安全性增强；Kel-F 与 TATB 的分解产物发生吸热反应会延长炸药的点火时间。

参考文献：

[1] Semenov N N. Theories of combustion process[J]. Physics: Z, 1928,48:571-582.

[2] Jones D A, Parker R P. Heat flow calculations for the small-scale cook-off bomb test[R]. AD-A236829, 1991.

[3] Wang Pei, Chen Lang, Wang Xiao-feng, et al. Cook-off test and numerical simulation for explosive heated by fire [J]. Journal of Beijing Institute of Technology, 2009,18(2):146-151.

[4] Williams M R, Matei M V. The decomposition of some RDX and HMX based materials in the one-dimensional time to explosion apparatus. Part 1: Time to explosion and apparent activation energy[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2006,31(6):435-441.

[5] 陈朗，马欣，黄毅民，等. 炸药多点测温烤燃实验和数值模拟[J]. 兵工学报，2011,32(10):1230-1236.
Chen Lang, Ma Xin, Huang Yi-min, et al. Multi-point temperature measuring cook-off test and numerical simulation of explosive[J]. Acta Armamentarii, 2011,32(10):1230-1236.

[6] McGuire R R, Tarver C M. Chemical decomposition models for the thermal explosion of confined HMX, TATB, RDX and TNT explosives[C]// Proceedings of the 7th International Symposium on Detonation. Anapolis, MD, USA, 1981:1-8.

[7] 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, 2008,26(1):1-28.

[8] Tarver C M. Effects of exothermic binders on times to explosion of HMX-plastic bonded explosives[C]// Proceedings of the 14th International Symposium on Detonation. Coeur d'Alene Resort, Idaho, 2010:861-870..

[9] Yoh J J, McClelland M A, Maienschein J L, et al. Simulating thermal explosion of cyclotrimethylenetrinitramine-based explosives: Model comparison with experiment[J]. Journal of Applied Physics, 2005,97,083504:1-11.

[10] Yoh J J, McClelland M A, Maienschein J L, et al. Simulating thermal explosion of octahydrotetranitrotetrazine-based explosives: Model comparison with experiment[J]. Journal of Applied Physics, 2006,100,073515:1-9.

[11] Dickson P M, Asay B W, Henson B F, et al. Measurement of phase change and thermal decomposition kinetics during cookoff of PBX 9501[C]// Shock Compression of Condensed Matter-1999. 2000:837-840.

[12] Perry W L, Gunderson J A, Dickson P M. Application of a reversible four-step HMX kinetic model to an impact-induced friction ignition problem[C]// The 14th International Detonation Symposium. Coeur d'Alene Resort, Idaho, 2010.

[13] Land T A, Siekhaus W J, Foltz M F, et al. Condensed-phase thermal decomposition of TATB investigated by AFM and STMBMS[C]// The 10th International Detonation Symposium. Boston, MA, 1993.

Calculation on multi-step thermal decomposition of HMX- and TATB-based composite explosive under cook-off conditions*

Ma Xin, Chen Lang, Lu Feng, Wu Jun-ying

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

Abstract: The thermal decomposition of each component in the composite explosive was described by the multi-step chemical kinetics model. A multi-component grid unit calculation method was put forward to calculate the thermal decomposition reaction processes of the HMX and TATB based composite explosives under the cook-off conditions. And the cook-off tests were carried out to measure the temperatures and ignition times of the explosives and verify the accuracies of the calculations. The thermal reaction performances of the composite explosives were analyzed by changing the mass fraction of each component in them. The results show that the exothermic decomposition of the HMX predominates in the thermal decomposition process of the HMX/TATB composite explosive. Moreover, the ignition time and temperature of the composite explosives increase with the increasing of the TATB contents in the composite explosives.

Key words: mechanics of explosion; multistep reaction; multicomponent grid unit; composite explosive; cook-off

---

* Received 3 September 2012; Revised 20 October 2012

Supported by the National Basic Research Program of China (973 Program) (61383)

Corresponding author: Chen Lang, chenlang@bit.edu.cn

(责任编辑 张凌云)