文章编号:1000-5773(2012)06-0665-09

铝热剂反应性冲击热点分析*

王新征[1],张松林[1,2],张庆明[2],秦志桂[1],陈 旻[1],李文杰[1]

(1.西北核技术研究所,陕西西安 710024;
2.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:采用激光粒度扫描仪测量了二元混合物铝热剂($Al+Fe_2O_3$)原料的粒径分布,在电子显微镜下观察了铝颗粒、氧化铁颗粒的颗粒形状及两者按照化学配比混合后的颗粒接触状态。综合粒径分布和反应体系的化学配比关系,得到两种反应物的特征粒径和混合物的颗粒布局。根据特征粒径和颗粒布局,建立了该反应体系的等效细观模型,该细观模型能够保证得到与实际颗粒体系相一致的具有统计意义的孔穴结构。采用无网格粒子方法,数值模拟了铝热剂体系在不同冲击速度作用下,基本氧化铁颗粒排列形成的热点特征。研究表明,氧化铁三颗粒紧密排列的模式为形成单独热点的最基本排列,在平面冲击作用下,二元不同粒径的含能材料混合物形成热点的尺寸由初始孔穴尺寸确定,而热点温度受冲击速度影响较大。采用轻气炮对不同密度和配比的铝热剂进行了冲击点火实验,并将测量和数值计算结果进行了对比分析,结果表明,两者的定性结论吻合较好。

关键词:铝热剂;热点;二元颗粒含能材料;冲击;等效细观模型
中图分类号:O383 **文献标识码**:A

1 引 言

在描述固相反应系统的点火过程时,热点火理论应用最为广泛[1]。非均质材料在冲击作用下激发化学反应[2-3],例如炸药的冲击点火、粉末材料的冲击合成等,其主要原因归结为非均质材料具有不均一的物理-力学结构,在冲击作用下瞬间形成温度高达数百度乃至千度量级的“热点”,这些热点就是激发体系发生反应的热源。冲击点火的研究主要包括两个方面:(1) 冲击引起的热点温度及分布;(2) 由热化学决定的点火温度及其分布。

目前研究“热点”形成机制的模型主要有孔穴塌缩模型和细观模型。在孔穴塌缩模型中,含能材料描述为非均匀介质,由实体材料和孔穴组成。孔穴塌缩模型一般假设实体材料在冲击作用下不可压缩,孔穴被压缩而塌缩形成高温区,即所谓的“热点”,该模型适用于描述单相非均质含能材料的冲击点火[4-10]。细观模型是在细观尺度建立研究体系的细观结构,并研究相关规律,主要用于研究含能材料的冲击点火、颗粒材料冲击压实和粉末材料冲击合成等[11-16]。这两种模型具有一定适用范围:孔穴塌缩模型无法研究多元混合物各组分之间的相互作用,在建立模型的过程进行了大量的平均化处理;细观模型中因为颗粒尺寸较小、颗粒形状及颗粒空间分布情况比较复杂,很难建立具有代表意义尺度的三维计算模型。目前的细观研究模型一般是纤维组成的结构,将其简化为二维模型;对于颗粒状材料一般将颗粒简化为均匀小球[16-20]。

本工作采用实验与数值模拟相结合的手段,研究反应物具有不同颗粒尺寸的铝热剂反应体系,在冲

* **收稿日期**:2011-04-11;**修回日期**:2012-03-09
基金项目:国防预先研究重点支持项目(KY-2006A-1)
作者简介:王新征(1979—),男,硕士,工程师,主要从事爆炸冲击、结构防护等方面的研究. E-mail:wxzhmalan@163.com

击作用下形成“热点”的特征及机制，分析模型是具有统计意义的等效细观模型。通过实验得到颗粒的等效体积半径，以此建立的细观模型具有代表意义的孔穴结构，通过对该细观模型的研究，分析反应体系的宏观材料性能，并与轻气炮实验结果进行对比。

2 反应物颗粒几何特征参数的确定

Meyers 等[20]研究了冲击作用下不同尺寸纤维组成复合层的压缩特征，将其简化为二维细观数值计算模型，用于模拟金属粉末的压实，其中纤维尺寸分布与实际颗粒的粒径分布一致，不同尺寸纤维之间形成了不同的孔穴结构；利用该模型研究了不同冲击速度下孔穴塌缩的规律，发现孔穴几何特征是影响孔穴塌缩的重要因素，该研究结果与实验结果吻合较好。高举贤等[21]研究了接触爆炸情况下多层等径低碳钢金属丝被压实的实验，数值模拟了冲击压实过程形成的高温区及物质流动规律，发现仅孔穴区域的物质达到了熔化温度，这与实验结果吻合较好。这些研究表明，细观孔穴结构是影响孔穴塌缩后温度分布的重要因素；对于颗粒体系，孔穴结构主要受颗粒尺寸和颗粒之间的接触特征所控制。

对于非完备球形颗粒体系，目前很难建立与实际颗粒尺寸分布、接触状态一致的细观模型。Bendsoe等[22]提出，采用均匀化方法将结构中的细观尺度变量和材料的宏观力学性质联系起来，用于解决材料优化问题。本研究讨论采用具有统计意义的颗粒等效体积半径，建立满足化学配比的铝热剂细观模型，该模型能够得到具有统计意义、与实际颗粒体系一致的孔穴结构，对于研究铝热剂的冲击点火具有重要意义。

采用激光粒度扫描仪测量铝颗粒和氧化铁颗粒的粒径分布，并获得两种颗粒的等效体积半径。测量结果表明，两种材料颗粒粒径特征都是单峰分布，根据等效体积半径可以得到单个颗粒的体积，相关参数见表 1。

表 1 颗粒特征参数

Table 1 Characteristic parameters of particles

Material	Equivalent volume radius /(μm)	Volume /(μm³)
Iron oxide	18.1	2.48×10^{4}
Aluminum	75.7	1.82×10^{6}

采用两种不同的途径计算混合物中两种物质按照化学配比((1)式)的体积比，以检验用等效体积半径描述混合物各物质成分的合理性。

$$2\mathrm{Al}+\mathrm{Fe_2O_3}=\!=\!=\mathrm{Al_2O_3}+2\mathrm{Fe} \tag{1}$$

方法 1：利用细观尺度测量的参数，计算两种物质的体积比。已知实验测量的等效体积半径和两种物质的密度，根据标准化学配比所要求的铝物质和氧化铁物质的质量比，可以计算出两种物质颗粒的数量比为 $n_{\mathrm{Al}}:n_{\mathrm{Fe_2O_3}}=1:112$。再根据颗粒数量之比和颗粒等效体积，可以计算得到两种物质的体积比为

$$\frac{V_{\mathrm{Al}}}{V_{\mathrm{Fe_2O_3}}}=\frac{n_{\mathrm{Al}}\times V_{\mathrm{Al,d}}}{n_{\mathrm{Fe_2O_3}}\times V_{\mathrm{Fe_2O_3,d}}}=0.651 \tag{2}$$

式中：V_{Al}为铝物质体积，$V_{\mathrm{Fe_2O_3}}$为氧化铁物质体积，$V_{\mathrm{Al,d}}$为单个铝颗粒体积，$V_{\mathrm{Fe_2O_3,d}}$为单个氧化铁颗粒体积。

方法 2：利用宏观尺度参数计算两种物质体积比。根据铝热剂中铝物质和氧化铁物质的质量比和密度，计算得到密实状态下混合物中铝粉和氧化铁的体积比为 0.398∶0.602=0.661，与(2)式得到的结果相近。

由此可见，由等效颗粒体积半径及各物质的颗粒数量关系建立的细观模型，可以满足混合物各物质的质量比，实现细观和宏观质量比的一致性。

3 数值计算模型分析

在采用的数值计算模型反应体系中有两种颗粒：铝颗粒和氧化铁颗粒。这两种颗粒之间有 3 种接触类型：铝颗粒与铝颗粒、氧化铁颗粒与氧化铁颗粒、氧化铁颗粒与铝颗粒。对于该化学反应体系，有效接触是氧化铁颗粒与铝颗粒之间的接触，数值计算模型的简化和分析都是基于有效接触。

3.1　按照标准化学配比简化数值分析模型

数值计算模型简化如下:

(1) 铝颗粒和氧化铁颗粒形状都是球形,半径等于实验测得的等效体积半径;

(2) 数值计算模型中,两种颗粒在尺寸匹配的情况下,在铝颗粒周围排列氧化铁颗粒,得到初步计算模型,在此基础上得到有效接触情况的简化模型。

基于统计理论建立的细观模型基本单元为 1 个铝颗粒和相应配比氧化铁颗粒组成的立方体,该立方体长度等于铝颗粒直径与两倍氧化铁直径之和。根据两种颗粒的几何尺寸和可能的拓扑结构,在该立方体内对两种颗粒进行如下排列:首先在铝颗粒周围布置氧化铁颗粒,1 个铝颗粒的球面上可以排列 9 层,一共需要 66 个氧化铁颗粒;立方体的剩余空间还可以排列 40 个氧化铁颗粒,此时可以得到铝颗粒与氧化铁颗粒的数量比为 1∶106,与前面按照质量守恒定律计算得到的两种颗粒的数量比例 1∶112 相近,保证了细观模型中孔穴结构与实际统计意义的颗粒体系的孔穴结构相一致,说明采用这种简化方法建立的细观模型是合理的。模型见图 1。

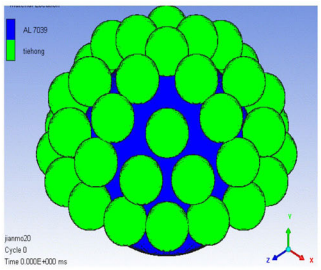


图 1　数值计算模型

Fig. 1　Numerical simulation model

采用颗粒相互碰撞的方法产生冲击效应,在数值计算中,假设铝颗粒以一定初速度向氧化铁颗粒群碰撞。数值计算采用动力有限元软件 AUTODYN 中的无网格粒子(SPH)算法。两种材料均选择 Grüneisen 状态方程,本构模型选择 Johnson-Cook 模型[23-24],材料参数见表 2 和表 3[25-26]。

表 2　铝物质材料参数

Table 2　Parameters of aluminum materials

Density /(g/cm^3)	Grüneisen coefficient	C_1 /(m·s)	S_1	Reference temperature/(K)
2.71	2.10	5 380	1.337	300
Specific heat /[J/(kg·K)]	Shear modulus /(GPa)	Yield stress /(GPa)	Hardening constant/(GPa)	Hardening exponent
875	26.9	0.290	0.343	0.41
Strain rate constant	Reference strain rate/(s^{-1})	Melting temperature/(K)	Thermal softening exponent	
0.01	10^5	897	1.00	

表 3　氧化铁材料参数

Table 3　Parameters of hematite materials

Density /(g/cm^3)	Grüneisen coefficient	C_1 /(m·s)	S_1	Reference temperature/(K)
5.27	2.00	7 435	0.035	300
Specific heat /[J/(kg·K)]	Shear modulus /(GPa)	Yield stress /(GPa)	Hardening constant/(GPa)	Hardening exponent
1 100	93.5	0.337	0.343	0.3
Strain rate constant	Reference strain rate/(s^{-1})	Melting temperature/(K)	Thermal softening exponent	
0.01	10^5	1 935	0.5	

分别分析了碰撞速度为 300、500、800 和 1 100 m/s 4 种情况下形成热点的特征，分析的重点是铝颗粒温度场的变化特征。碰撞过程中温度场的演化见图 2。

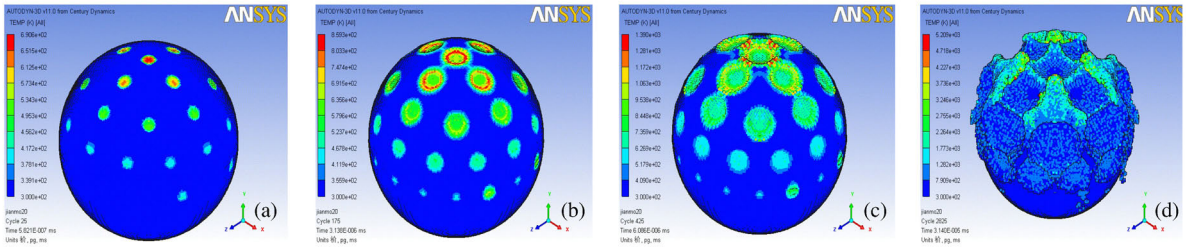


图 2 孔穴闭合过程中的温度场

Fig. 2 Temperature field during collapse of pores

通过对比分析颗粒碰撞过程中不同时刻铝颗粒温度场的特征，得到以下几点认识。

(1) 在氧化铁颗粒和铝颗粒碰撞初期，碰撞作用引起铝颗粒的塑性变形是能量沉积的主要机制。此时，不同区域因塑性变形量不同而温度不同，碰撞中心区域温度最高，见图 2(a)。

(2) 如果定义相互接触的氧化铁颗粒与铝颗粒切平面法向和冲击波方向的夹角为 θ(锐角)，则 θ 值越小的氧化铁颗粒在铝颗粒作用区域上形成的温度越高。

(3) 当铝颗粒和氧化铁颗粒从正面碰撞作用发展到两种颗粒之间的侵彻和摩擦作用时，材料在高应变率情况下的绝热剪切，成为能量沉积的主要机制。从温度云图上可以看到，顶部氧化铁颗粒与铝颗粒作用区域的外围温度高于中心温度，说明在该过程中，材料的高速剪切变形所沉积的能量占主导；而不同于前者，下部氧化铁颗粒在铝颗粒上形成的高温区，下部温度高于其与铝颗粒接触的其余区域，见图 2(b)。

(4) 在较高的碰撞速度下若孔穴能够塌缩，颗粒之间相互作用的特点为：首先铝颗粒与氧化铁颗粒碰撞，铝颗粒物质材料强度小、尺寸大，将产生较大变形；随着相互作用的发展，铝颗粒在氧化铁颗粒的侵彻、挤压作用下，发生较大塑性流动，在孔穴区域内将产生射流(从速度云图可以看出，该区域的粒子速度远远大于周围的粒子速度，形状近似蘑菇状，见图 2(c))，在此过程中形成射流的铝物质与上部封闭孔穴的氧化铁颗粒相互作用，沉积大量能量，形成“热点”；后期是孔穴填充过程，铝物质继续被挤压，发生塑性流动，孔穴最终被充填，见图 2(d)。

(5) 在碰撞速度较高，能够形成射流的情况下，第二层氧化铁颗粒之间的间距对形成热点的特征有很大影响。如果顶部氧化铁颗粒与相邻下一层氧化铁颗粒之间相互接触，则两种颗粒形成的孔穴体积最小，此时产生的“热点”温度较高，体积较小；若顶部氧化铁颗粒与相邻下一层氧化铁颗粒之间不接触，则形成的“热点”体积较大，温度较低。如果碰撞速度较低，不能形成射流或孔穴不能塌缩，形成热点的温度远低于能够形成射流情况下的热点温度。

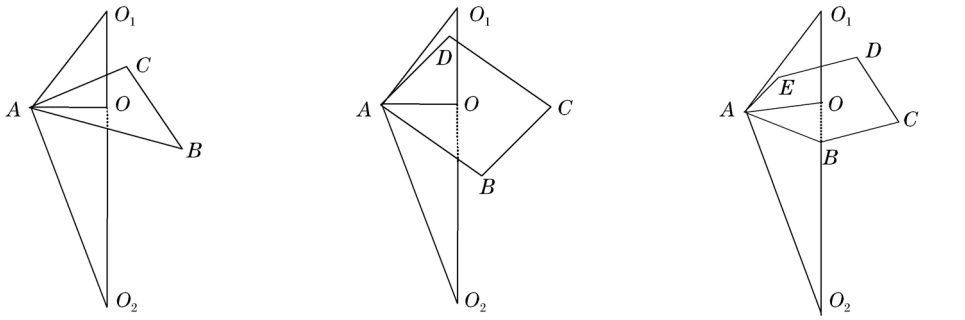
(6) 在能够使孔穴塌缩的速度范围内，改变碰撞速度，热点温度随碰撞速度的增加变化不大，热点的大小基本不变，体积与塌缩前的孔穴相当，但是孔穴塌缩需要的时间越来越短。

3.2 基本颗粒排列拓扑结构分析

计算分析发现，热点特征与氧化铁颗粒的排列特征及冲击作用方向有关，位于冲击波正前方区域的热点温度最高，而该区域氧化铁的排列特征是关键的影响因素，所以分析最基本氧化铁颗粒排列的模型对形成热点的影响具有重要意义。

颗粒位置可用其球心坐标描述，通过判断球心之间的长度是否合理可以确定基本氧化铁颗粒的排列模型。根据两种物质颗粒数量的关系和尺寸大小，在数值模型中首先建立一个铝颗粒，其余主要任务是确定氧化铁颗粒的排列情况。除顶部用于封闭孔穴的氧化铁颗粒外，假设其余的氧化铁颗粒的球心位于同一平面。颗粒基本排列情况见图 3，图中相关字母的含义如下：O_1 是上部封闭氧化铁颗粒的球

心,O_2 是下部铝颗粒的球心,O 是研究基本排列的氧化铁颗粒球心所确定的平面与 O_1O_2 连线的交点,A、B、C、D、E 分别是氧化铁颗粒的球心。其中,AB、AO_1、BC、CA、CD、DA、DE 和 EA 的长度等于氧化铁颗粒的直径(36.2 μm),AO_2 是氧化铁颗粒中心与铝颗粒中心的连线,长度为 93.8 μm。O_1O 可用来判断颗粒排列的可能性,当 $O_1O>0$ 时排列合理;当 $O_1O\leqslant 0$ 时排列不合理,此时其物理本质是,顶部的氧化铁颗粒可以从基本排列的氧化铁颗粒之间围成的孔穴中漏出。根据该判断条件可知,基本排列中的氧化铁颗粒数量有 3、4 和 5 个 3 种情况。



(a) Arrangement of three grains　(b) Arrangement of four grains　(c) Arrangement of five grains

图 3　颗粒球心相对位置

Fig. 3　Relative position of the grain centers

4　基本氧化铁颗粒排列形成的热点特征研究

4.1　3 个氧化铁颗粒排列情况

在 3 个氧化铁颗粒排列情况下,控制氧化铁颗粒的间距可以控制孔穴大小。分别分析了基本氧化铁颗粒球心间距为 18.1×2(颗粒接触)、20×2 和 24×2(μm)的 3 种情况。碰撞速度分别为 300、500、800 和 1 100 m/s 4 种情况。热点特征见表 4,温度场见图 4。

表 4　3 个氧化铁颗粒排列情况下孔穴闭合特征

Table 4　Characters of pore collapse under three hematite grains

Distance of iron oxide/(μm)	Impact velocity /(m/s)	Maximum temperature/(K)	Time of cavity collapse/(μs)
0	300	—	Unclosed
	500	1 142	Unclosed
	800	2 000	25.5
	1 100	3 886	9.84
1.9	300	—	Unclosed
	500	—	42.7
	800	1 520	18.8
	1 100	2 300	13.1
4.9	300	—	96.7
	500	—	45.2
	800	1 178	22.4
	1 100	1 700	15.6

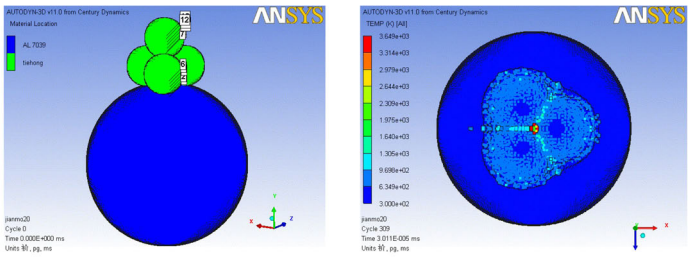
(1) 在相同颗粒排列条件下,在不同碰撞速度下,形成高温区的相对位置和机制不相同。在较低碰撞速度下,如果不能形成射流,温度升高机制主要是颗粒碰撞产生的塑性变形,此时高温区域一般位于氧化铁颗粒与铝颗粒接触区的中心部位;如果碰撞速度较高,能够形成射流,则高温区位于孔穴内。

(2) 在能够形成射流的情况下,温度最高的局部区域位于上部氧化铁颗粒底部。这主要是形成射流的铝物质与顶部氧化铁颗粒相互作用形成了高温区。分析形成射流的铝物质的质点速度,其数值远大于相邻区域,基本上等于临近区域质点速度的 2～3 倍。

(3) 孔穴塌缩过程中形成射流的条件是,铝颗粒和氧化铁颗粒之间存在足够大的速度差。如果两者速度差太小,则不能形成射流,甚至孔穴不能塌缩。若孔穴完全塌缩,则形成热点的大小基本与塌缩前孔穴的体积相当。

(4) 增加基本排列氧化铁颗粒的间距,高温区的平均温度有所降低,孔穴塌缩比较容易;而且高温

区位置发生变化，温度最高点不再位于上部氧化铁颗粒下部，而是位于 3 个相邻氧化铁颗粒与铝颗粒形成的封闭区域内，见图 5。



(a) Arrangement of grains (b) Temperature field under 1 100 m/s

图 4 3 个氧化铁颗粒排列情况下热点剖面图

Fig. 4 States for three iron oxide grains

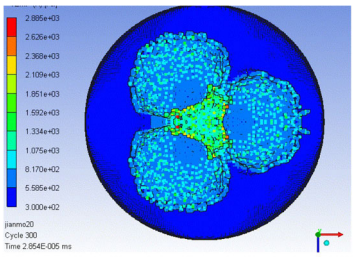


图 5 氧化铁颗粒不接触情况下的温度场

Fig. 5 Temperature field with contactless hematite grains

从表 4 可以看出，在不同颗粒间距的情况下，300 m/s 的碰撞速度很难使孔穴塌缩，所以在后两种基本排列情况中不再分析该碰撞速度。

4.2 4 个氧化铁颗粒排列情况

该排列情况下形成孔穴的体积大于 3 个氧化铁颗粒排列的情况，热点特征明显不同于 3 个颗粒排列情况：

(1) 在较高的碰撞速度下，封闭孔穴内的高温区域趋向于形成 4 个热点，且随着共面氧化铁颗粒间距的增加，形成 4 个热点的趋势越来越明显；

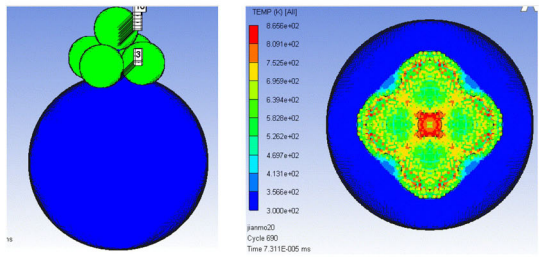
(2) 在相同的碰撞速度下，孔穴闭合比 3 个氧化铁颗粒相对应的情况容易，见表 5 和图 6。

5 个氧化铁颗粒排列的分析内容同 4 个颗粒相应情况，冲击作用后的温度场见图 7。

表 5 4 个氧化铁颗粒排列情况下孔穴闭合特征

Table 5 Characteristics of pore collapse under four hematite grains

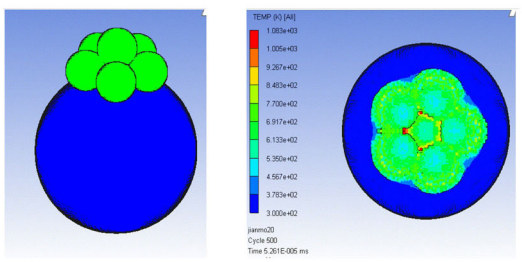
Distance of iron oxide/(μm)	Impact velocity /(m/s)	Maximum temperature/(K)	Time of cavity collapse/(μs)
0	500	832	35.14
	800	1 220	18.4
	1 100	2 100	13.0
1.9	500	837	25.7
	800	1 642	15.9
	1 100	2 341	11.9
4.9	500	827	26.1
	800	1 160	15.1
	1 100	1 943	11.1



(a) Arrangement of grains (b) Temperature field after shock

图 6 4 个氧化铁颗粒排列情况

Fig. 6 States for four iron oxide grains



(a) Arrangement of grains (b) Temperature field after shock

图 7 5 个氧化铁颗粒排列情况

Fig. 7 States for five iron oxide grains

4.3 基本颗粒排列情况形成热点特征对比分析

综合对比分析 3 种颗粒排列情况，可以得到以下认识。

(1) 随着共面氧化铁颗粒间距的增加，下部铝颗粒与顶部氧化铁颗粒可能相互接触，造成连通孔穴

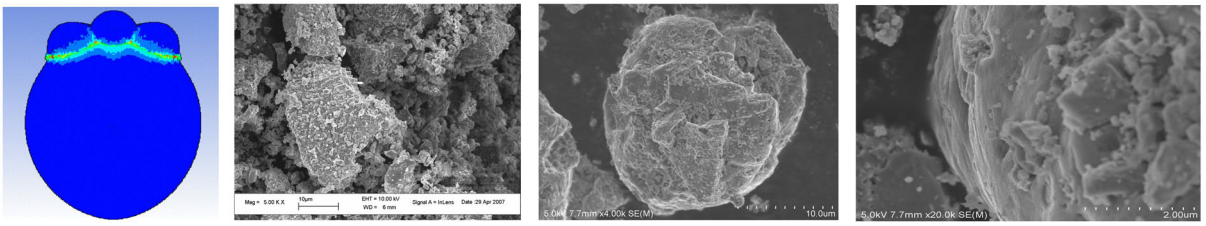
的分割,出现多个热点或不能形成热点,这与氧化铁颗粒间距大小有关。在基本氧化铁颗粒接触排列的情况下,随着共面氧化铁颗粒数目的增加,形成多个相对独立热点的趋势越明显,5 个氧化铁颗粒形成单独热点的趋势比 4 个的情况明显。在 5 颗粒碰撞后形成的温度场中,形成了 5 个相对独立的热点。所以,可以得出 3 个氧化铁颗粒排列是形成单独热点的最基本排列方式的结论。

(2) 随着碰撞速度的增大,氧化铁颗粒与铝颗粒的侵彻作用效果明显。

(3) 从表 4 和表 5 可以看出,封闭孔穴区域内的最高温度不仅受碰撞速度和排列氧化铁数量的影响,还受氧化铁颗粒间距的影响。

5　数值计算结果对轻气炮实验相关规律的解释

采用轻气炮进行了铝热剂混合物的冲击点火实验,飞片材料为紫铜,厚度为 5 mm,实验样品采用 1 m厚棉丝进行软回收,对回收后的样品进行成分和微观形貌分析。根据冲击作用后的样品特征,可以分为 3 类:完全没有发生化学反应的样品、发生部分化学反应但反应未持续下去的样品和完全发生化学反应的样品(实现点火)。其中产生部分化学反应的样品,保留了临界冲击点火速度作用后颗粒相互作用的直接证据,对其进行了扫描电镜(SEM)分析,得到了冲击压缩后混合物颗粒的形貌,并与数值计算结果进行了对比。图 8(a)是 3 个基本氧化铁颗粒排列,受 500 m/s 速度的碰撞作用后,氧化铁颗粒与铝颗粒的接触情况和温度场,氧化铁颗粒与铝颗粒形成了较大颗粒。图 8(b)是冲击压缩前铝热剂混合物的 SEM 照片,从图中可以看出氧化铁颗粒分散在铝颗粒表面,从表面形态可以分辨出两种颗粒。图 8(c)和图 8(d)是冲击压缩后,部分化学反应样品的 SEM 照片,从照片中可以发现两种颗粒的分界变得不明显,已经形成了较大的颗粒;其外表面比较光滑,说明铝颗粒表面物质已经熔化,温度超过了铝粉的熔点。



(a) Apparent of particle with numerical simulation　(b) Apparent before shock with SEM　(c) Overall appearance of the melted aluminum particle　(d) Melted state of aluminum particle in the cavity

图 8　冲击前后实验及数值模拟的颗粒接触情况

Fig. 8　States for the experiment and numerical simulation before and after the shock

研究了不同装填密度和不同配比铝热剂的冲击点火效应,实验测量数据见表 6,当氧化铁与铝粉的质量比满足(1)式时为标准配比,为 1.0。结果表明:(1) 随样品装填密度的增加,点火难度降低,与细观模型的研究结果一致,当混合物颗粒之间距离过大(宏观密度变小)时,不利于点火;(2) 铝热剂化学配比对铝热剂的冲击点火影响不明显,细观模型表明,铝粉过多或过少对改变铝颗粒与氧化铁颗粒之间的有效接触概率,以及相同冲击作用下形成有效热点的大小和多少影响不大。

表 6　不同密度和配比铝热剂冲击点火实验结果

Table 6　The experimental results of thermites at different density and chemical ratio under shock

Density /(g/cm^3)	Design impact velocity/(m/s)	Chemical ratio of thermite	Reaction status
1.8	350	1.0	Unburned
1.8	400	1.0	Burned
2.0	300	1.0	Burned
2.5	290	1.2	Unburned
2.5	260	0.8	Unburned
2.5	290	0.8	Burned

另外还进行了铝热剂静态点火温度测量实验,该实验在封闭容器中进行。利用燃烧铝热剂的高温

产物作为加热热源，将球形测试样品放在一个小坩埚内，小坩埚和热源之间用一个大坩埚隔离。将高温热电偶温度计放置在大小坩埚之间，通过分析测量的温度曲线和实验后样品的成分，可判断样品是否点火及计算点火温度，最后得到该颗粒配比铝热剂的点火温度为 1 548 K 左右。考虑到冲击作用使铝粉外部的保护膜受损，此时化学反应过程中铝粉破膜比静态点火相对容易，所以在冲击情况下，点火温度应该在 1 548 K 和铝的熔点(897 K)之间。对应数值计算中的碰撞速度为 300～800 m/s，而实验测量的临界冲击点火速度为 400 m/s 左右。考虑到采用统计方法和计算模型简化带来的不确定度，实验和数值模拟的结论吻合较好。

6 结 论

对不同颗粒尺寸的二元混合物 $Al+Fe_2O_3$ 进行了颗粒特征分析，通过合理简化，建立了等效细观模型，该细观模型能够保证得到与实际颗粒体系相一致的统计意义的孔穴结构。采用数值模拟手段，研究了该体系在冲击作用下形成热点的机制和特征，并对轻气炮实验得到的结论进行了初步解释，两者吻合较好。研究表明，该体系的反应性冲击热点特征受颗粒尺寸、颗粒排列等因素影响，其本质是受铝颗粒和氧化铁颗粒之间形成的孔穴特征影响；采用等效体积半径研究二元非均匀颗粒体系在冲击作用下孔穴塌缩形成热点的特征，能够得到与宏观实验相一致的定性结论。采用实验与数值模拟相结合的手段，研究二元不同尺寸颗粒状含能材料的冲击热点是可行的。

References:

[1] Feng C G. Theory of Heat Ignition [M]. Changchun: Jilin Science and Technology Press, 1991. (in Chinese)
冯长根. 热点火理论 [M]. 长春：吉林科学技术出版社，1991.

[2] Meyers M A, Murr L E. Shock-Wave and High-Strain-Rate Phenomena in Materials [M]. New York: Marcel Dekker, Inc, 1992: 233-492, 783-794.

[3] Thadhani N, Chen E. Shock Synthesis of Materials [M]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 1994.

[4] Kang J, Butler P B. A thermomechanical analysis of hot spot formation in condensed-phase, energetic materials [J]. Combust Flame, 1992, 89: 117-139.

[5] Bourne N K. On the collapse of cavities [J]. Shock Waves, 2002, 11: 447-455.

[6] Dubnov L V, Sukhikh V A. On the nature of mechanically induced hot spots in condensed explosives [J]. Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1971, 7(1): 123-125.

[7] Burkina R S, Vilyunov V N. Initiation of chemical reaction at a "Hot Spot" [J]. Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1980, 16(4): 423-426.

[8] Knyazeva A G. Hot-spot thermal explosion in deformed solids [J]. Combustion, Explosion, and Shock Waves, 1993, 29(4): 419-428.

[9] Bourne N K, Field J E. Explosive ignition by the collapse of cavities [J]. Math Phys Eng Sci, 1999, 455(1987): 2411-2426.

[10] Bourne N K, Milne A M. The temperature of a shock-collapsed cavity [J]. Math Phys Eng Sci, 2003, 459(2036): 1851-1861.

[11] Maiden D E, Nutt G L. Hot-spot model for calculating the threshold for shock initiation pyrotechnic mixtures [A]//Proceeding of the Eleventh International Pyrotechnics Seminar [C]. California: Lawrence Livermore National Lab, 1986: 813.

[12] Boslough M B. A Thermochemical model for shock-induced reactions (heat detonations) in solids [J]. J Chem Phys, 1990, 92(3): 1839-1848.

[13] Mutz A H. Heterogeneous shock energy deposition in shock wave consolidation of metal powders [D]. California: California Institute of Technology, 1991.

[14] Boslough M B, Graham A. Submicrosecond shock-induced chemical reactions in solids first real-time observations [J]. Chem Phys Lett, 1985, 21(4-5): 446-452.

[15] Hornig H, Kruy J W. Shock ignition of pyrotechnic heat powders [A]//Proceeding of the Eleventh International Pyrotechnics Seminar [C]. Vail, Colorado, 1986: 699-719.

[16] Wang J X. Research of micro-mechanism of energy deposition in explosive consolidation of powders [D]. Dalian:

Dalian University of Technology,2005. (in Chinese)
王金相. 爆炸粉末烧结的细观沉能机制研究 [D]. 大连:大连理工大学,2005.
[17] Zhang D L, Wang X L. The numerical research of the effects of material parameters on powders explosive consolidation [J]. Explosion and Shock Waves,1996,16(2):105-110. (in Chinese)
张德良,王晓林. 粉末爆炸烧结材料参数效应数值研究 [J]. 爆炸与冲击,1996,16(2):105-110.
[18] Zhang D L. Numerical simulation of explosive compaction of powder [J]. Advances in Mechanics,1994,24(1):37-56. (in Chinese)
张德良. 粉末材料爆炸压实数值模拟 [J]. 力学进展,1994,24(1):37-56.
[19] Willamson R L. Parametric studies of dynamic powder consolidation using a particle-level numerical model [J]. J Appl Phys,1990,68(3):1287-1296.
[20] Meyers M A, Benson D J. Shock consolidation: Microstructurally-based analysis and computational modeling [J]. Acta Mater,1999,47(7):2089-2108.
[21] Gao J X, Shao B H, Zhang K. A study of the mechanism of consolidating metal powder under explosive-implosive shock waves [J]. J Appl Phys,1991,69(11):7547-7555.
[22] Bendson M P, Kikuchi N. Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method [J]. Comput Meth Appl Mech Eng,1988,71:197-224.
[23] Johnson G R, Cook W H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strain rate, temperatures and pressures [J]. Eng Fract Mech,1985,21(1):31-48.
[24] Johnson G R, Holmquist T J. Strain-rate effects for high-strain-rate computations [J]. J Phys, Ⅳ France, 2006, 134:391-396.
[25] Snow C L, Lee C R, Shi Q, et al. Size-dependence of the heat capacity and thermodynamic properties of hematite (α-Fe_2O_3) [J]. J Chem Thermodyn,2010,42(9):1142-1151.
[26] Marsh S P. LASL Shock Hugoniot Data [Z]. Berkeley, CA: University of California Press,1980:166.

Analysis of Reactive Hot Spot for Thermite under Shock Waves

WANG Xin-Zheng[1], ZHANG Song-Lin[1,2], ZHANG Qing-Ming[2],
QIN Zhi-Gui[1], CHEN Min[1], LI Wen-Jie[1]

(1. *Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an* 710024, *China*;
2. *State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing* 100081, *China*)

Abstract: Using laser scaners to measure the size of binary mixture of energetic materials thermite ($Al+Fe_2O_3$) and get the particle size distribution, the particle shape of aluminum powder, iron oxide and the contact status of the mixtures meeting the standard chemical proportion are observed under the electron microscope. Combined the raw material particle size distribution and the mass ratio of chemical reaction, the particle characteristic size (equivalent volume radius) and arrangement of aluminum and iron oxide particle were obtained. Based on the above conditions, the mesoscopic model for the thermite mixtures was established. The mesoscopic model can be guaranteed to get the statistical cavities structure consistent with that of the actual granular system. The features of "hot spot" for the thermite by impact were studied with the Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) method, under the condition of different particle arrangements and shock velocities. The result shows that the arrangement of three iron oxide particles closely contact each other is the basic one forming a single "hot spot"; the size of hot spot is determined by the initial size of the cavity; and the temperature of "hot spot" is controlled by the shock velocity. Finally, the thermite mixtures of different density and chemical ratio were impacted on the light gas gun, the qualitative regularities of experiments are well consistent with those of numerical simulation.

Key words: thermite; hot spot; binary granular energetic materials; shock waves; equivalent mesoscopic model