

## 化工技术

# HATO 爆轰性能的理论计算

王永顺 南海 赵省向 张为鹏 李媛媛

(西安近代化学研究所, 西安 710069)

**摘要** 根据 Gibbs 自由能最小原理, 利用 BKW 状态方程程序对新型高能不敏感离子型含能材料 HATO 的爆轰性能进行了计算。通过测定爆速对计算结果进行了验证。结果表明, 该方法的理论计算值与实验值非常接近。计算得到的 HATO 爆容值相比其他单质炸药更大, 有助于提高炸药的做功能力。

**关键词** 应用化学 爆轰性能 BKW 状态方程

中图法分类号 TQ564.3; 文献标志码 A

1,1'-二羟基-5,5'-联四唑二羟胺盐 (dihydroxyl-ammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate, HATO, 慕尼黑大学称 TKX-50) 是一种新型高能不敏感离子型含能材料<sup>[1]</sup>。它的机械感度低于 RDX, 理论爆轰性能优于 HMX, 它的应用成为低易损高能炸药未来的一个发展方向。

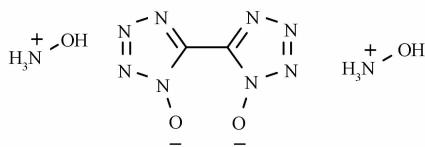


图 1 HATO 的结构式

Fig. 1 Structural formula of HATO

炸药的爆轰性能决定着炸药设计生产的可行性和使用的有效性。目前, HATO 的爆轰性能的预估与测试大多见诸于国外文献, 国内正处在开始研究阶段<sup>[1]</sup>。以高温高压下的气体状态方程为基础的热力学编码能够同时计算多种相态爆轰产物的组成和准确预测爆轰参数<sup>[2]</sup>。BKW 状态方程是在真实气体的 Virial 状态方程基础上建立起来的, 被广泛应用于计算高能炸药的爆轰参数和爆轰产物组成。为掌握 HATO 的爆轰性能, 了解其爆轰的基本规律, 使用 BKW 状态方程计算程序进行爆轰性能的计算。

## 1 计算方法

BKW 状态方程的基本表达形式<sup>[2]</sup>为

2015年1月6日收到

第一作者简介: 王永顺(1988—), 男, 硕士, 助理工程师。研究方向: 浇注 PBX 配方及工艺。E-mail: wangyongshun2000@163.com。

$$\frac{PV_g}{RT} = 1 + xe^{\beta x} \quad (1)$$

$$x = \frac{\kappa k}{V_g (T + \theta)^\alpha} \quad (2)$$

$$k = \sum (n_i / \sum n_i) k_i \quad (3)$$

式中,  $P$  为压力,  $V_g$  为摩尔气体体积,  $R$  为气体常数,  $\alpha, \beta, \theta, \kappa$  为可调参数,  $n$  为每种爆轰产物的摩尔数,  $k_i$  为余容。

以气体产物的 BKW 状态方程为基础, 再加上固体产物状态方程即 Cowan 固体状态方程、一组产物的等熵方程、一组热力学方程与一组流体力学爆轰理论方程, 根据以上热力学和爆炸力学的关系式编成 BKW 状态方程计算程序。

在该计算程序中爆轰产物的热力学函数表达式<sup>[3]</sup>为

$$S_0 = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (4)$$

$$H - H_0 = \frac{BT^2}{2} + \frac{2CT^3}{3} + \frac{3DT^4}{4} + \frac{4ET^5}{5} + IC \quad (5)$$

式中,  $A, B, C, D, E, IC$  为常数,  $T$  为温度,  $S_0$  为熵,  $H - H_0$  为爆轰产物温度为  $T$  与 0K 时的焓值之差。根据以上两式, 以及 JANAF 热力学函数数据表可以拟合出各爆轰产物的热力学函数系数。

首先假设爆轰产物的种类。根据 Gibbs 自由能最小原理, 任何系统在平衡时, 系统的自由能函数均为最小。若能求出所有可能状态下爆轰产物的自由能, 即可根据这一原则得到爆轰产物的平衡组成, 并根据爆轰力学的基本理论方程求解出主要的爆轰参数<sup>[4]</sup>。

## 2 HATO 爆轰性能的计算

HATO 的基本性能数据如表 1 所示。对 CHNO

炸药,假定生成的气体产物有  $H_2O$ 、 $CO_2$ 、 $N_2$ 、 $H_2$ 、 $O_2$ 、 $CO$ 、 $NH_3$ 、 $H$ 、 $NO$ 、 $OH$ 、 $CH_4$  十一种,固体产物选取石墨 C。根据 JANAF Thermochemical Tables<sup>[5]</sup> 拟合出以上爆轰产物温度范围在 300~6 000 K 的等熵方程系数。石墨 C 的 Cowan 固体状态方程系数<sup>[7]</sup> 如表 2 所示。

表 1 HATO 的系统性能数据<sup>[6]</sup>Table 1 Performance data of HATO<sup>[6]</sup>

HATO	分子量	理论密度/ (g·cm <sup>-3</sup> )	生成焓/ (kJ·mol <sup>-1</sup> )	氧平衡/%
$C_2H_8N_{10}O_4$	236.15	1.879	439.5	-27.1

表 2 固体 C 的 Cowan 状态方程参数<sup>[7]</sup>Table 2 The coefficients of Cowan equation of state for C<sup>[7]</sup>

$A_s$	$B_s$	$C_s$	$D_s$	$E_s$
0.830 936	-1.393 818	0.672 570	-0.113 537	0.006 491 56
$A_1$	$A_2$	$C_1$	$C_2$	$C_3$
-0.226 71	0.120 516 6	0.083 160	-0.175 590	0.155 310 0

根据以上数据,利用 BKW 状态方程计算程序对 HATO 和目前主要的单质炸药的爆轰性能进行计算,计算结果如表 3 所示。将计算得到的 HATO 的 C-J 产物组成列于表 4 中。其中爆容由阿伏伽德罗定律<sup>[8]</sup> 计算得到。

$$V_0 = 22.4 \sum n_i(g) \quad (6)$$

式(6)中,  $V_0$  为气体体积,  $n_i(g)$  为第  $i$  种爆轰气体产物的摩尔数。

表 3 HATO 与其他主要单质炸药的爆轰参数计算值

Table 3 Theoretical values of detonation parameters of HATO and other explosives

种类	分子式	密度/ (g·cm <sup>-3</sup> )	爆速/ (m·s <sup>-1</sup> )	爆压/ GPa	爆温/ K	爆热/ (J·g <sup>-1</sup> )	爆容/ (L·kg <sup>-1</sup> )
HATO	$C_2H_8N_{10}O_4$	1.879	9 441	41.0	1 920	6 706	854
CL-20	$C_6H_{12}N_{12}O_{12}$	2.04	9 590	47.4	3 279	7 031	692
HMX	$C_4H_8N_8O_8$	1.9	9 159	39.5	2 364	6 773	757
RDX	$C_3H_6N_6O_6$	1.8	8 754	34.7	2 587	6 793	758
TNT	$C_7H_5N_3O_6$	1.64	6 950	19.0	2 937	5 923	572

表 4 HATO 的 C-J 产物组成

Table 4 C-J production composition of HATO

爆轰 产物	摩尔数	爆轰 产物	摩尔数	爆轰 产物	摩尔数
$H_2O$	3.995 6	$O_2$	$1.000 0 \times 10^{-8}$	$NO$	$3.288 4 \times 10^{-7}$
$CO_2$	$2.152 3 \times 10^{-3}$	$CO$	$1.308 5 \times 10^{-4}$	$OH$	$1.000 0 \times 10^{-8}$
$N_2$	4.999 9	$NH_3$	$1.090 8 \times 10^{-4}$	$CH_4$	$7.779 3 \times 10^{-7}$
$H_2$	$4.270 6 \times 10^{-3}$	$H$	$1.000 0 \times 10^{-8}$	$C$	1.997 7

从计算结果可以看到 HATO 在理论密度 1.879 g/cm<sup>3</sup> 时的爆速值为 9 441 m/s,爆压 41.0 GPa 均比

HMX 要高。从表 4 中可以看出 HATO 的爆轰产物组成以  $N_2$ 、 $H_2O$ 、C 为最高,其他还主要含有  $CO_2$ 、 $H_2$ 、 $CO$  和  $NH_3$ 。由于 N 在 HATO 中占比非常高,且生成的气体产物以  $N_2$  为主,使 HATO 的爆容相较其他单质炸药更大。

为检验计算结果,根据 GJB772A—97 爆速的测试方法电测法测试炸药的爆速。对压制成型含 3% 石蜡的  $\Phi 25$  mm 的药柱,测得平均密度为 1.658 g/cm<sup>3</sup> 的药柱其爆速值为 8 472 m/s。利用 BKW 状态方程程序计算 1.658 g/cm<sup>3</sup> 含 97% HATO 混合炸药的爆速值为 8 524 m/s。理论计算值与实验值非常接近。

### 3 结论

1) 假设 HATO 生成的气体爆轰产物 11 种,固体产物为石墨,利用自编的 BKW 状态方程计算程序计算得到 HATO 密度为 1.879 g/cm<sup>3</sup> 时爆速为 9 441 m/s。利用电测法测定平均密度为 1.658 g/cm<sup>3</sup> 含 97% HATO 混合炸药的爆速值为 8 472 m/s,与计算值 8 524 m/s 比较接近。按此方法计算 HATO 的爆轰性能结果是令人满意的。

2) HATO 分子式中的 N 占比非常高,且绝大部分 N 生成  $N_2$ ,这使得 HATO 的爆容相比其他常用单质炸药会大,将会有助于提高炸药的做功能力。

### 参 考 文 献

- 葛忠学,毕福强. 高能不敏感含能材料——HATO. 含能材料, 2014;22(4):434—435  
Ge Zhongxue, Bi Fuqiang. HATO, the insensitive high energetic material. Energetic Materials, 2014;22(4):434—435
- Muhamed S, How-Ghee A, Serene C H Y. Study of the effect of covolumes in BKW equation of state on detonation properties of CHNO explosives. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2013; (38): 103—112
- 张熙和,云主惠. 爆炸化学. 北京:国防工业出版社,1989  
Zhang Xihe, Yun Zhuhui. Detonation chemistry. Beijing: National Defence Industry Publishing Company, 1989
- Mader C L. Numerical modeling of detonation. Berkely, California: University of California Press, 2005
- Chase M W, Jr Davies C A. NIST-JANAF thermochemical tables (Fourth Edition). New York: American Chemical Society and American Institute of Physics for the National Institute of Standards and Technology, 1999
- 毕福强,肖川,许诚,等. 1,1'-二羟基-5,5'-联四唑二羟胺盐的合成与性能. 含能材料, 2014;22(2):272—273  
Bi Fuqiang, Xiao Chuan, Xu Cheng, et al. Synthesis and properties of dihydroxyammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate. Energetic Materials, 2014;22(2): 272—273

(下转第 174 页)

## Soilelectrical Resistivity Deformation Trends of Expansive Soils under Free and Loading Condition

WANG Jing-jing, ZHANG Wen-hui, QI Jia-wei, LU Zi-wei

( Geotechnical Engineering Research Institute, Key laboratory of Geo-mechanics and Embankment Engineering, Nanjing 210098, P. R. China)

**[Abstract]** The electrical resistivity of expansive soil is studied indoor with two electrode resistivity measurement that under free and loading condition, and study the relationship of expansive soil resistivity between the water content and the loading condition. The experimental results showed that the soilelectrical resistivity is decreased with the increase of moisture content under free condition. The resistivity changed rapidly when the moisture content is 15%, and the resistivity and the moisture content conform to the negative exponent. Soilelectrical resistivity of expansive soils is decreased obviously under loading condition, and the soilelectrical resistivity is still decreased with the increase of moisture content, the resistivity changed rapidly when the moisture content is 10%. Moisture content is the main influence factors of expansive soil resistivity, and the loading condition have smaller influence on resistivity.

**[Key words]** soilelectrical resistivity      expansive soil      moisture content

(上接第 166 页)

- 7 奥尔连科. 爆炸物理学. 北京:科学出版社,2011:1313—1314  
 Orr Rienk. Detonation physics. Beijing: Science Publishing Company, 2011:1313—1314
- 8 孙业斌,惠君明,曹欣茂. 军用混合炸药. 北京:兵器工业出版

- 社,1995  
 Sun Yebin, Hui Junming, Cao Xinmao. Military mixed explosives. Beijing: Weapon Industry Publishing Company, 1995

## Calculation of Detonation Performance for HATO

WANG Yong-shun, NAN Hai, ZHAO Sheng-xiang, ZHANG Wei-peng, LI Yuan-yuan  
 ( Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710069, P. R. China)

**[Abstract]** The detonation properties of HATO were calculated which are based on the Gibbs free energy minimization method and the BKW EOS. Detonation velocity of HATO was also tested to compare with the calculation result. The results show that the calculation figure is close to the testing result. The detonation volume of HATO is bigger than other explosive's, which will improve the working capacity of ammunition.

**[Key words]** applied chemistry      detonation properties      BKW equation of state