

文章编号: 1000-5773(2003)04-0247-08

论 VLW 状态方程^{*}

龙新平¹, 何 碧^{1,2}, 蒋小华¹, 吴 雄³

(1. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川绵阳 612900;

2. 北京理工大学机电工程学院, 北京 100081;

3. 西安近代化学研究所, 陕西西安 710065)

摘要: 论述了 VLW 状态方程中爆轰产物分子势参数的确定; 根据不同类型炸药爆轰性能参数计算结果对炸药爆轰产物碳在 CJ 态的相进行了分析讨论, 认为不同的炸药, 产物碳有石墨和金刚石两种相存在; 将 VLW 状态方程和 BKW 状态方程进行了比较分析, 指出了 BKW 状态方程与 VLW 状态方程的区别及其产生的原因, 并给出了 VLW 状态方程计算含能材料(包括高能炸药、燃料空气炸药、民用炸药)的爆轰性能参数计算结果。结果表明, 计算值与实验值符合较好。

关键词: 状态方程; 爆轰; 维里系数

中图分类号: O521.2; O414.12

文献标识码: A

1 引 言

以维里(VIRIAL)理论为基础建立的 VLW 高温高压爆轰产物状态方程(VLW EOS)于 1985 年和 1989 年分别在第八届和第九届国际爆轰会议发表^[1,2]。我们应用它计算了系列炸药的爆轰性能参数, 并预报了多种未知高能含能炸药化合物^[2~4], 后来又成功地计算了含大量惰性添加物的民用工业炸药的爆轰参数^[5,6]。VLW 状态方程问世 20 年来的应用表明: 从常压到近百万大气压的压力范围内都适用, 既可计算初始密度为 2.0 g/cm³ 的高能炸药的爆轰参数^[3,4], 也可计算初始密度为 10⁻³ g/cm³ 量级的燃料空气炸药的爆轰参数^[7,8]。实践证明 VLW EOS 是一个普适性较好的高温高压状态方程, 并已得到广泛应用。有关 VLW 状态方程的理论基础和建立, 文献[1,2,9]已经有详细的介绍, 我们着重介绍 VLW 状态方程参数的确定, 对 VLW 状态方程和 BKW 状态方程进行了分析比较, 给出了 VLW 状态方程在含能材料(包括高能炸药、普通军用炸药、燃料空气炸药、工业炸药)爆轰性能参数方面的计算结果。

2 VLW 状态方程参数的确定

2.1 爆轰产物 LJ 势参数

VLW 状态方程的完整形式如下

$$\frac{pV}{RT} = 1 + B^*(T^*)\omega + \frac{B^*(T^*)}{T^{*1/4}} \sum_{n=3}^m \frac{\omega^{(n-1)}}{(n-2)^n} \quad (1)$$

式中:

* 收稿日期: 2002-11-26; 修回日期: 2003-06-30

基金项目: 国家自然科学基金(1860382); 中国工程物理研究院科学基金(920513, 9401009, 960577)

作者简介: 龙新平(1961—), 男, 博士, 研究员, 博士生导师。

$$B^*(T^*) = \sum_{j=0}^{\infty} b^{(j)} T^{*-(2j+1)/4}, \quad b^{(j)} = -\frac{2^{j+1/2}}{4j!} \Gamma\left(\frac{2j-1}{4}\right),$$
$$b_0 = \frac{2}{3} \pi N \sigma^3, \quad T^* = \frac{kT}{\epsilon}, \quad \omega = \frac{b_0}{V}$$

N 为阿佛加德罗常数; k 为玻耳兹曼常数; T^* 为无量纲温度; σ, ϵ 为 Lennard-Jones 势参数。

VLW 状态方程既可以使用爆轰产物的 Lennard-Jones(LJ)势参数,也可以使用 EXP-6 势参数。计算中多采用 LJ 势。除 H_2O 、 NH_3 、 HF 、 CF_4 和 CO_2 外,其余主要爆轰产物的 LJ 势均源于文献[10]。从 VLW 状态方程建立以来,不同时期使用的爆轰产物 LJ 势参数有一些变化。1985 年,VLW 状态方程取四项形式,使用了一套参数,1991 年^[11],方程取五项时,将 H_2O 和 NO 的余容作了调整,结果见表 1,参数调整后在计算不同种类炸药爆轰参数时,仍然无法得到满意的结果。1999 年,龙新平^[9]根据刘福生等人^[12]对液态 CO_2 在高温高密度下状态方程的研究结果,将 CO_2 余容取值为 83.05,而 H_2O 和 NO 的余容取文献[10]的值。调整后,计算不同炸药的爆轰参数均可得到满意的结果,计算结果见表 7。

表 1 爆轰产物的 LJ 势参数和 VLW 状态方程不同时期 b_0 取值情况

Table 1 LJ potential of detonation products and the value of b_0 used in VLW EOS in different period						
Detonation products	LJ potential in Ref. [10]			b_0 used in VLW EOS/(mL/mol)		
	σ /(nm)	ϵ /(K)	b_0 /(mL/mol)	Ref. [1]	Ref. [11]	Ref. [9]
H_2O				30.42	28.00	30.42
H_2	0.287	29.2	29.76	29.76	29.76	29.76
O_2	0.358	117.5	57.75	57.75	57.75	57.75
CO_2	0.407	205.0	85.05	85.05	85.05	83.05
CO	0.3763	100.2	67.22	67.22	67.22	67.22
NH_3				70.00	70.00	70.00
NO	0.317	131.0	40.00	40.00	42.00	40.00
N_2	0.3698	95.05	63.78	63.78	63.78	63.78
CH_4	0.3817	148.2	70.16	70.16	70.16	70.16
HF				29.00	29.00	29.00
CF_4	0.470	152.5	131.0	131.0	131.0	131.0

2.2 CJ 态产物碳的相

计算中产物碳的状态方程使用了 Cowan 状态方程。Cowan 状态方程的形式为^[13,14]

$$p = p_1(V_S) + a(V_S)T_V + b(V_S)T_V^2 \tag{2}$$

式中: $p_1(V_S)$ 为冷压项, $a(V_S)$ 为晶格振动对压力的贡献, $b(V_S)$ 为电子运动对压力的贡献,它们的表达式分别为

$$p_1(V_S) = A_S + \frac{B_S}{V_S} + \frac{C_S}{V_S^2} + \frac{D_S}{V_S^3} + \frac{E_S}{V_S^4}$$
$$a(V_S) = A_1 + A_2/V_S$$
$$b(V_S) = C_1 + C_2V_S + C_3V_S^2$$
$$V_S = \rho_0/\rho$$
$$T_V = T/R$$

式中: $A_S, B_S, C_S, D_S, E_S, A_1, A_2, C_1, C_2, C_3$ 为常数,称为 Cowan 状态方程参数。

图 1 为 Bundy^[15] 通过实验得到的碳的相图。图中 B-S 线称

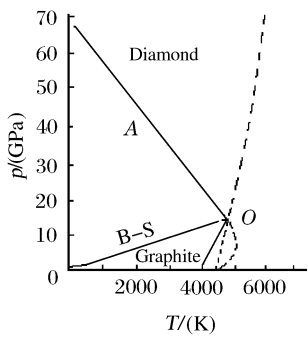


图 1 碳的相图
Fig. 1 Phase diagram of carbon

为 Berman-Simon 线,线以上为金刚石相区,线以下为石墨区,右边为液相区。金刚石相区又分上下两部分(以 OA 线为界),上半部分为绝对金刚石区;下半部分的稳态为金刚石,亚稳态为石墨。石墨区也分为左右两部分。右区为石墨;左区稳态为石墨,亚稳态为金刚石。O 点为三相点, $T=4710\text{ K}$ 。

研究表明,在炸药爆轰性能参数计算中,尤其在计算富含碳炸药时,产物碳的相对计算结果有十分明显的影响。对于 CJ 状态下产物碳的存在形式,目前还没有统一的认识。传统观点认为,在爆轰反应区内碳以石墨相存在,后来通过对碳相图的研究,有学者认为碳在爆轰反应区内以金刚石相存在,另外一部分学者认为存在碳液滴,甚至有气相碳的存在^[16~19]。由于爆炸反应极其复杂,产物碳的 CJ 态到底是以哪一种相存在不能一概而论,与炸药的特性和初始状态有关。章冠人根据碳的相图和炸药爆炸化学反应的复杂性对此问题进行了分析^[20],结合 Yamada 和 Titov 的研究结果认为,碳主要生成了金刚石^[21,22]。

本研究分别将爆轰产物碳以石墨、金刚石和类液态碳处理,计算了三种状态下炸药的爆轰性能参数,将炸药爆轰参数计算结果与实验结果进行比较,对 CJ 态碳的相态进行分析。三种相态碳的 Cowan 状态方程参数见表 2,其中,石墨的数据来源于文献[13],金刚石的数据是用 Mader 提供的专用程序 TDF 计算得出的^[14],液态碳的数据来源于文献[19]。三种炸药爆轰参数计算结果见表 3。

表 2 不同型态产物碳的 Cowan 状态方程参数

Table 2 The Cowan EOS coefficients of carbon in different phases

	A_s	B_s	C_s	D_s	E_s
Graphite ^[12]	0.8309358	-1.3938180	0.6725697	-0.1135373	0.00649156
Diamond ^[15]	-0.8925648	0.701102	-0.3516268	0.0639260	0.00151900
Quasi-liquid carbon ^[19]	0.3893430	-0.8032880	0.4195450	-0.0747715	0.00463421
	A_1	A_2	C_1	C_2	C_3
Graphite ^[12]	-0.2267053	0.12051657	0.008316	-0.17559	0.15531
Diamond ^[15]	-0.3401114	0.12051657	0.008316	-0.17559	0.15531
Quasi-liquid carbon ^[19]	-0.1521190	0.12051657	0.008316	-0.17559	0.15531

表 3 产物碳取不同相时三种炸药爆轰参数计算结果

Table 3 The calculated detonation parameters of 3 type explosives as carbon in different phases

Explosive	ρ_0 /(g/cm ³)	ΔH_f /(kJ/mol)	CJ parameter	Exp.	Calculated		
					Quasi-liquid carbon	Graphite	Diamond
TNT	1.64	-62.76	D	6950	6632	6961	6711
			p	19.0	22.47	18.90	17.45
			T		2975	4125	4080
RDX	1.80	61.55	D	8754	8329	8807	8777
			p	34.7	33.23	35.79	34.78
			T		4145	4941	4934
RX39AB ^[23]	1.942	15.73	D	9208	8674	9098	9102
			p	43.0	38.08	46.64	43.89
			T		4388	5331	5294

Note: p represents the CJ pressure, and the unit is GPa. D represents the detonation velocity in m/s.

T is detonation temperature in K.

表 3 比较了当产物碳取不同的相态时,对三种比较典型炸药 TNT(TNT 类炸药)、RDX(RDX 类炸药)和 RX39AB(一种以 CL-20 为基的高能量密度材料,配方为 CL20 95.8/ESTANE 4.2)爆轰性能参数的影响。计算结果表明,对于 RDX 和 RX39AB 来说,产物碳用金刚石来描述比较合适,对于 TNT 用石墨较合适。在用 VLW 状态方程计算时,对上述三种炸药来说,用类液碳参数得到的结果,偏离实验结果太大。即对一般炸药来说,其 CJ 爆温和爆压值,落在碳相图的金金刚石或者石墨相区,所以产物碳应该用金刚石或者石墨来描述更为合理,这和章冠人等人的结论是一致的。

3 VLW 状态方程与 BKW 状态方程的比较

BKW 状态方程目前是国内外应用较广泛的爆轰产物状态方程。但和 VLW 状态方程比较,BKW 状态方程有明显的不足,这就是,BKW 状态方程针对不同炸药使用了多套经验参数,而 VLW 状态方程没有使用经验参数。

BKW 状态方程参数 α, β, κ 和 θ 为经验参数。这些参数是以实测的部分主要产物的 Hugoniot 参数和炸药爆轰参数为根据拟合的,从而使 BKW 状态方程成功预报了多种炸药的爆轰性能参数,预报的爆轰速度和压力与实测值十分接近,尤其是爆速的计算值与实测值的偏差不超过 3%。但是,研究表明,一套参数对广泛的炸药无法得到令人满意的结果。Mader 根据炸药分子含碳元素的裕度给出了 TNT 类和 RDX 类两种炸药的两套参数^[14],后来又给出一套 RDX 类炸药的最佳参数。由于 BKW 状态方程计算的炸药爆温偏低,1978 年 Guidry 认为,计算的爆轰温度和 θ 相关, θ 值越大,则爆温越高。因此将 θ 进行了再参数化,由 400 调为 1800。为了在不同种类的炸药爆轰参数计算中取得满意的结果,就出现了针对不同类炸药的多套参数。

VLW 状态方程基于维里方程。其第二项与第二维里系数相同,第三、第四和第五项是根据维里系数在高温条件下的相似性,以第二维里系数的函数来表示。

第三维里系数形式如下

$$C^*(T^*) = \sum_{j=0}^{\infty} c^{(j)} T^{*-(2j+2)/4} \quad (3)$$

当 $T^* > 1$ 时(爆轰条件下, T^* 总是大于 20), $B^*(T^*)$ 和 $C^*(T^*)$ 很快收敛,当 T^* 很大时,可以只取第一项而忽略后面各项^[23],此时

$$\frac{B^*(T^*)}{C^*(T^*)} = \frac{b^{(0)} T^{*-1/4}}{c^{(0)} T^{*-2/4}} = \frac{1.733 T^{*1/4}}{1.729} = \frac{1.002}{T^{*-1/4}} \approx \frac{1}{T^{*-1/4}} \quad (4)$$

这说明,VLW 状态方程的第三项和理论值十分接近,可近似作理论值。由于方程的前三项在 VLW 状态方程中起主要作用,尽管 $D^*(T^*)$ 和 $E^*(T^*)$ 完全是经验假设,但由于这两项的绝对值比前三项小得多,因此,对计算结果的影响很小。所以,尽管 VLW 状态方程没有人为经验参数,却能在较广范围内的炸药爆轰参数计算中取得满意的结果。

表 4 比较了 TNT、RDX 和 RX39AB 三种炸药 CJ 参数实验值和 VLW、BKW 计算值。表中 TNT 参数的上标“T”表示以 TNT 参数计算,RDX 和 RX39AB 以 RDX 参数计算。

表 4 数据表明,VLW 状态方程计算较宽范围内炸药爆轰参数均取得了令人满意的结果。当爆轰产物碳以金刚石态处理时,RX39AB 这种高能量密度炸药的 CJ 爆速与爆压的计算结果与实验值分别相差 1% 和 2%。BKW 状态方程计算 RX39AB 的 CJ 参数无论以金刚石还是以石墨处理产物碳,均得不到令人满意的结果,当以石墨处理时,爆速计算结果与实验值差 1%,但 CJ 压力与实验值差了近 9%,当以金刚石处理时,爆速计算结果与实验值差 3.5%,CJ 压力与实验值差了近 2%。如果想得到好的计算结果,就必须重新拟合一套适合高能炸药计算的 BKW 状态方程参数。

从表 4 数据还可以看出,BKW 计算 RDX 的 CJ 参数时,产物碳以石墨处理得到的结果比以金刚石处理得到的结果更好,这和碳的相图不符。产生这一现象的原因是,BKW 状态方程适合 RDX 类炸药

的参数是以 RDX 的实验结果标定的。

表 4 三种炸药爆轰参数实验值与 VLW 和 BKW 计算值比较
Table 4 Experimental and calculated CJ proper

Explosive	ρ_0 /(g/cm ³)	ΔH_f /(kJ/mol)	CJ parameter	Exp.	BKW		VLW	
					Graphite	Diamond	Graphite	Diamond
TNT (C ₇ H ₅ N ₃ O ₆)	1.64	−62.76	<i>D</i>	6950	7237 ^T	6969	6961	6711
			<i>p</i>	19.0	20.5	19.3	18.90	17.45
			<i>T</i>				4125	4080
RDX (C ₃ H ₆ N ₆ O ₆)	1.80	61.55	<i>D</i>	8754	8754	8740	8807	8777
			<i>p</i>	34.7	34.7	33.7	35.79	34.78
			<i>T</i>		2587		4941	4934
RX39AB	1.942	15.73	<i>D</i>	9208	9002	9543	9098	9102
			<i>p</i>	43.0	39.19	42.10	46.64	43.89
			<i>T</i>		2627	2147	5331	5294

4 VLW 状态方程的应用

自 VLW 状态方程问世以来,先后用于计算普通军用炸药、高能量密度炸药、燃料空气炸药、民用炸药以及推进剂的性能参数。计算结果见表 5、表 6、表 7。表 7 中以 VLW 表示 LJ 势参数取自文献[11], VLWR 表示 LJ 势参数取自文献[9]。

表 5 燃料空气炸药爆轰性能参数计算值与文献值^[24]的比较
Table 5 The detonation parameters of fuel-air explosive calculated by VLW EOS

Fuel	Concentration	p_{CJ} /(MPa)		D_{CJ} /(km/s)		T_{CJ} /(K)	
		Calc.	Ref. [24]	Calc.	Ref. [24]	Calc.	Ref. [24]
Methane	7.25	1.812	1.780	1.880	1.837	2829	2717
Butane	6.26	2.042	2.014	1.841	1.800	2941	2828
Propylene oxide	9.62	2.111	2.106	1.847	1.826	2987	2930
Butane/Propylene oxide(9 : 1)	6.49	1.990	2.018	1.832	1.801	2927	2833
Butane/Propylene oxide (8 : 2)	6.73	1.997	2.023	1.833	1.803	2931	2839
Butane /Butyl nitrate (9 : 1)	6.71	1.997	2.027	1.833	1.806	2928	2835
Butane /Butyl nitrate (8 : 2)	7.23	2.007	2.042	1.832	1.802	2934	2843
Aluminum powder	20.87	2.611	2.562	1.907	1.847	4458	4256

表 6 民用工业乳化炸药爆轰性能参数 VLW 计算值与实验值^[25]的比较
Table 6 The detonation parameters of industrial explosive calculated by VLW EOS

Explosive	Composition	Density /(g/cm ³)	p_{CJ} /(GPa)		D_{CJ} /(km/s)		T_{CJ} /(K)
			Calc.	Exp. ^[25]	Calc.	Exp. ^[25]	
RJ-52	C _{0.4919} H _{5.923} N _{1.811} O _{3.723} Na _{0.1412}	1.11	6.613	—	5.006	5.096	2624
EL105	C _{0.6118} H _{5.788} N _{1.923} O _{3.091} Na _{0.118} Al _{0.037}	1.11	6.274	—	4.757	4.700	2702

表 7 不同类型炸药爆轰性能参数计算值与实验值的比较

Table 7 Comparison of the calculated detonation parameters of different explosives with the experimental results

Explosive	ρ_0 /(g/cm ³)	ΔH_f /(kJ/mol)	CJ parameter	Exp.	BKW (Graphite)	VLW (Graphite)	VLWR	
							(Graphite)	(Diamond)
RDX (C ₃ H ₆ N ₆ O ₆)	1.80	61.55	<i>D</i>	8754	8754	8820	8807	8777
			<i>p</i>	34.7	34.7	37.10	35.79	34.78
			<i>T</i>		2587	4941	4941	4934
HMX (C ₄ H ₈ N ₈ O ₈)	1.90	47.28	<i>D</i>	9100	9159	9078	9088	9078
			<i>p</i>	39.3	39.5	44.47	41.47	39.69
			<i>T</i>		2364	4911	4880	4885
PETN (C ₅ H ₈ N ₄ O ₁₂)	1.77	-538.5	<i>D</i>	8300	8421	8522	8456	8439
			<i>p</i>	33.5	31.8	33.71	32.60	32.47
			<i>T</i>		2833	5121	5124	5129
TNT (C ₇ H ₅ N ₃ O ₆)	1.64	-62.76	<i>D</i>	6950	6950 ^T	7015	6961	6711
			<i>p</i>	19.0	20.6	19.17	18.90	17.45
			<i>T</i>		2937	4117	4125	4080
TETRYL (C ₇ H ₇ N ₅ O ₃)	1.70	-50.21	<i>D</i>	7560	7629	7713	7651	7526
			<i>p</i>		25.1	24.72	24.26	23.11
			<i>T</i>		2917	4610	4620	4596
TATB (C ₆ H ₆ N ₆ O ₆)	1.895	-139.95	<i>D</i>	7860	7874 ^T	8076	8032	7877
			<i>p</i>		29.7	27.70	27.26	24.9
			<i>T</i>		2128	3795	3795	3767
NM (C ₁ H ₃ N ₁ O ₂)	1.128	-112.97	<i>D</i>	6290	6463	6166	6159	6160
			<i>p</i>	14.1	13.0	11.52	11.50	11.86
			<i>T</i>	3800	3120	3896	3900	3915
BTF (C ₆ N ₆ O ₆)	1.859	615.05	<i>D</i>	8485	8156	8594	8553	8533
			<i>p</i>	36	32.5	40.84	39.19	37.49
			<i>T</i>		4059	6151	6144	6172
TNTAB (C ₆ N ₁₂ O ₆)	1.74	1129.68	<i>D</i>	8576	8094	8670	8642	8620
			<i>p</i>		30.0	37.84	36.74	35.79
			<i>T</i>		4046	6192	6187	6207
RXAC (H _{32.69} N _{16.84} O ₃)	1.14	100.42	<i>D</i>	8025	9393	7889	8067	8067
			<i>p</i>	22.8	22.7	15.47	15.82	15.82
			<i>T</i>	2180	1008	2546	2546	2546
TFNA (C ₅ H ₇ N ₄ O ₆ F ₇)	1.692	-753.12	<i>D</i>	7400	7569	7579	7574	7508
			<i>p</i>	24.9	24.2	2638	26.15	25.28
			<i>T</i>		2204	4327	4335	4322
Comp. B (RDX/TNT 64/36)	1.713	7.78	<i>D</i>	8030	8084	8110	8068	7971
			<i>p</i>	29.4	28.40	27.81	27.32	26.11
			<i>T</i>		2763	4645	4651	4634
Pentolite (PETN/TNT 50/50)	1.65	97.96	<i>D</i>	7465	7470 ^T	7627	7561	7456
			<i>p</i>		24.7	23.69	23.26	22.45
			<i>T</i>		3390	4599	4607	4591
Aluminized explosive C _{1.873} H _{2.470} N _{1.615} • O _{2.04} Al _{0.733}	1.77	-538.5	<i>D</i>	7530	7954	7661	7660	7606
			<i>p</i>	23	30.66	30.46	30.28	29.88
			<i>T</i>		5977	6713	6714	6741
RX39AB	1.942	15.73	<i>D</i>	9208	9002		9098	9102
			<i>p</i>	43.0	39.19		46.64	43.89
			<i>T</i>		2627		5331	5294

Note: ΔH_f adopts the value under 298 K; The symbol "T" represents that the TNT parameter set is applied.

从表 7 可以看出,将 CO_2 的势参数调整后,VLW 状态方程能够在不同炸药的爆轰参数计算中均能取得较满意的结果。表 5 和表 6 也说明 VLW 状态方程计算的燃料空气炸药和民用炸药爆轰性能参数和文献值符合得很好。

5 结 论

(1) VLW 状态方程没有经验参数,计算中所采用的分子势函数是 Lennard-Jones 势,一套势参数就满足不同类型炸药爆轰性能参数计算,计算结果和实验或文献值符合很好。

(2) 对计算结果和文献分析表明,产物碳在 CJ 条件下是以石墨或金刚石形态存在。计算时,对于 TNT 类爆压和爆温较低的炸药,以石墨相描述产物碳较合理,而对 RDX、HMX、RX39AB 这些高能炸药,其爆轰产物碳在 CJ 条件下以金刚石形态描述更合理。

(3) 计算结果表明:VLW 状态方程能较准确地计算初始密度为 10^{-3} g/cm^3 数量级的燃料空气炸药、民用工业炸药和初始密度接近 2.0 g/cm^3 的高能密度炸药的爆轰参数。

References:

- [1] Wu X. Detonation Performance of Condensed Explosives Computed with the VLW EOS [A]. Proc 8th Symposium (Int) on Detonation [C]. Albuquerque, 1985. 796—804.
- [2] Wu X. Detonation Parameters of New Powerful Explosives Compounds Predicted with a Revised VLW EOS [A]. Proc 9th Symposium(Int) on Detonation [C]. Portland, 1989. 190—197.
- [3] Long X P, Wu X, Jiang X H. Detonation Parameters of High Energy Density Explosives Predicted with a New Revised VLW EOS [A]. Europyrc 95, the 6th Congress (Int) on Pyrotechnics, France, 1995. 221—229.
- [4] Wu X. The Principle to Assess the Power of Energetic Materials [J]. Energetic Materials, 1993, 1(1): 21—26. (in Chinese)
吴 雄. 含能材料能量评价准则的讨论 [J]. 含能材料, 1993, 1(1): 21—26.
- [5] Wu X. The Application of VLW EOS in Calculating the Detonation Performance of Domestic Explosives [A]. Proceedings of Symposium on Blasting [C]. 1991. 3—7. (in Chinese)
吴 雄. VLW 状态方程在民用炸药计算中的应用 [A]. 中国民爆学术会议论文集 [C]. 1991. 3—7.
- [6] Zhang S J. Calculation the Detonation Performance of Industrial Explosives [J]. Magazine of Blasting Equipment, 1997, 26(2): 6—8. (in Chinese)
张双计. 工业炸药爆轰性能的计算 [J]. 爆破器材杂志, 1997, 26(2): 6—8.
- [7] He B. Theory & Practice of Energetic Materials(Vol. II) [M]. The Publishing House of Ordnance Industry, 1997. 41—45.
- [8] Gui D Y, Liu J P, Feng S S. Research of Power Performance of Several Typical Fuel-Air Explosives [J]. Energetic Materials, 2002, 3(10): 121—124. (in Chinese)
贵大勇, 刘吉平, 冯顺山. 几种典型燃料空气炸药威力性能研究 [J]. 含能材料, 2002, 3(10): 121—124.
- [9] Long X P. The VLW Equation of States for Detonation Products and the Detonation Characteristics of Nanometer Aluminized Explosives [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 1999. (in Chinese)
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.
- [10] Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B. Molecular Theory of Gases and Liquids [M]. New York: Wiley, 1964. 157.
- [11] Wu X. A New Equation of State for Detonation Products [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1991, 5(2): 98—103. (in Chinese)
吴 雄. 新型爆轰产物物态方程 [J]. 高压物理学报, 1991, 5(2): 98—103.
- [12] Liu F S, Chen X M, Chen P S, et al. Equation of State of Liquid CO_2 under High Temperature and High Densities [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1998, 12(1): 28—33. (in Chinese)

- 刘福生,陈先猛,陈攀森,等. 液态 CO₂ 高温高密度状态方程研究 [J]. 高压物理学报,1998,12(1):28—33.
- [13] Mader C L. Numerical Modeling of Detonation [M]. New York:Berkeley,1979.
- [14] Mader C L. Numerical Modeling of Explosives and Propellants [M]. New York:CRC Press,1998.
- [15] Berman R,Simon F. Diamond Graphite Equilibrium Line in Their Phase Diagram [J]. Z Electrochem,1955,59:333.
- [16] Gokien N A,Chang E T,Poston T M. Determination of Graphite/Liquid/Vapor Triple Point by Laser Heating [J]. High Temperature Science,1976,8:89—91.
- [17] Togaya M,Sugigama S,Mizubara E. Melting Line of Graphite [A]. Schmidt S C. High Pressure Science and Technology [C]. New York:AIP Press,1993.
- [18] Nagaev E L. Temperature Effect on Ultrafine Diamond Growth in Detonation Wave Front [J]. Usp Fiz Nauk,1992,162(9):124.
- [19] Xue Z Q. The Equation of State of Detonation Products and the Exploding Process of Aluminized Explosive [D]. Beijing:Beijing Institute of Technology,1998. (in Chinese)
薛再清. 爆轰产物状态方程及含铝炸药的爆炸过程 [D]. 北京:北京理工大学,1998.
- [20] Zhang G R. Problems about Synthesis Ultra Dispersed Diamond by Detonation [J]. Explosion and Shock Waves,1998,18(2):118—122. (in Chinese)
章冠人. 炸药爆炸产生超细金刚石微粉问题 [J]. 爆炸与冲击,1998,18(2):118—122.
- [21] Yamada K,Sawaoka A B. Very Small Spherical Crystals of Dispersed Diamond Found in a Detonation Products of Explosive and Their Formation Mechanism [J]. Carbon,1994,32(4):665—673.
- [22] Titov V M,Anisichkin V F,Malkov I Y. Synthesis of Ultrafine Diamond in Detonation Waves [A]. Proceedings of 9th Symposium on Detonation [C]. Arlington:Office of The Chief of Naval Research,1989. 407—416.
- [23] Simpson R L,Urtiew P A. CL-20 Performance Exceeds That of HMX and Its Sensitivity Is Moderate [J]. Propell Explos Pyrot,1997,22:249—255.
- [24] Sedgwick R T. AD-A159 177/5HDM,1979.
- [25] Lu C X. The Actuality and Prospect of the Industrial Explosives in China [J]. Magazine of Blasting Equipment,1995,24(6):5—6. (in Chinese)
吕春绪. 我国工业炸药的现状与发展 [J]. 爆破器材杂志,1995,24(6):5—6.

Discussions on the VLW Equation of State

LONG Xin-Ping¹, HE Bi^{1,2}, JIANG Xiao-Hua¹, WU Xiong³

(1. *Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China;*

2. School of Mechanics and Electronic Engineering,

Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

3. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: The determination of the LJ potential of detonation products used in VLW EOS is introduced. The phase state of detonation product carbon under CJ condition has been discussed by comparing the calculated data with the experimental results. The main difference between VLW EOS and BKW EOS has been pointed out and the origin of this difference has been analyzed. The performance parameters calculated by VLW EOS of a wide range of energetic materials, including high explosives, fuel-air explosives and civil explosives, is listed, and the calculations are in accord with the experimental data very well.

Key words: VLW equation of states; detonation parameters; LJ potential