

硝基胍发射药燃烧性能的模拟

杨 栋 赵宝昌 宋洪昌 何秀英
(南京理工大学化工学院, 南京 210094)

摘要 分析了硝基胍(NQ)热分解和燃烧的特征, 提出了 NQ 燃烧初期热分解的假设, 并推导了 NQ 发射药的燃速和燃速压力指数公式。对 NQ 发射药在 0~400MPa 的压力范围内的燃烧性能进行了数值模拟。计算结果与实测值十分吻合。

关键词 燃烧动力学 燃速压力指数 数值模拟 硝基胍发射药

中图法分类号 TQ562.24

1 引言

NQ 发射药是第二次世界大战前后发展起来的一种能量较高、烧蚀较低、其它性能良好的炮用发射药, 目前已广泛用作大、中口径的加农炮和榴弹炮装药^[1]。然而迄今尚未根据 NQ 的化学组成建立一燃烧模型, 定量计算 NQ 发射药的燃速特征。

本文在分析 NQ 热分解规律的基础上, 提出了 NQ 燃烧初期热分解的有关假设, 运用近年来提出的火药燃速预估方法^[2], 推导了 NQ 发射药的燃速公式及压力指数公式, 对 NQ 发射药的燃烧性能进行了数值模拟。

2 NQ 的热分解及燃烧特征

研究表明, NQ 热分解时产生约 65%~75% 的气体和约 25%~35% 的熔融中间产物。后者由含 -CN 基团的多种高分子(如三聚氰胺、三聚氰酸二酰胺、三聚氰酸一酰胺等)组成, 其分解温度为 380~570℃。在密闭容器里热分解加速, 分解完全。这说明在 NQ 的分子结构中, -CN 基团具有类似于硝酸酯中 -CHO 基团的特征, 即由 -CN 基团所形成的分解产物 [CN] 既可聚合, 又可裂解, [CN] 的自然裂解(非催化裂解)程度决定了 NQ 气相分解产物的裂解程度。

根据火药燃速预估理论^[2], 可裂解自由基的作用结果是使燃速压力指数降低。对于双基粘合剂来说, [CHO] 自由基自然裂解的特征压力 p_1^* 为 9.81MPa。在燃烧室压力为 p_1^* 时, [CHO] 以 CHO 的形式在气相存在, 此时火药的燃速压力指数最低。NQ 的燃速与压力的关系与双基粘合剂有明显的不同之处。NQ 的燃速随压力的升高而缓慢增大, 在中、高压力范围内燃速压力指数小, 也就是说 [CN] 基团自然裂解的特征压力 p_2^* 高于 [CHO] 自由基自然裂解的特征压力 p_1^* 。

根据以上讨论, 提出在特征压力 p_2^* 下 NQ 燃烧初期热分解的假设:



3 NQ 发射药燃速及燃速压力指数的计算

3.1 NQ 发射药的燃速公式

根据文献[2]提出的火药燃烧模型和燃速预估方法,考虑 NQ 燃烧现象的特殊性,得到 NQ 发射药燃烧表面附近氧化性气体的摩尔分数 $\theta_0(p)$ 计算公式:

$$\theta_0(p) = \frac{1}{\alpha + \beta + q_1\eta_1(p) + q_2\eta_2(p) + \gamma + 1} \quad (1)$$

式中, $\alpha = \alpha'/\delta'$, $\beta = \beta'/\delta'$, $\gamma = \gamma'/\delta'$, 而 α' , β' , γ' 分别为 1kg NQ 发射药燃烧产生的 [CO], [CH], [CH₂O] 类气体的摩尔数; q_1 为 $p = p_1^*$ 时 [CHO] 的相对摩尔数; q_2 为 $p = p_2^*$ 时 [CN] 的相对摩尔数; $\eta_1(p)$, $\eta_2(p)$ 分别表示 [CHO] 和 [CN] 自然裂解程度函数, 它们是燃烧室压力 p 的函数。 α , β , γ , q_1 , q_2 等被称为化学结构参数, 当发射药组成确定时, 可用已有的计算方法求得^[2]。

当初温为 20℃ 时, 燃速 $u(p)$ 与 $\theta_0(p)$ 的函数关系如(2)式所示。

$$u(p) = 1.709 p \theta_0^2(p) / \rho_p \quad (2)$$

式中, ρ_p 为火药的密度, g/cm³。

3.2 燃速计算值与实测值的比较

国内外两种 NQ 发射药(TF-3 和 M30)以及一种作为对比的双基发射药 SF-3 的组成列于表 1^[3,4], 其燃速的计算结果与实测值示于图 1~图 3。由此可见燃速计算值与实测值十分吻合, 平均相对偏差均小于 10%。说明本文所提出的有关假设是合理的, 计算公式是正确的。

表 1 发射药组成

Table 1 Composition of some propellants

序号	配方号	NC	NG	DNT	DBP	NQ	%
1	SF-3	55 ± 5	35 ± 5	4 ± 5	4 ± 2		2 ± 1
2	M30	28	22.5			47.7	1.8
3	TF-3	30 ± 5	20 ± 5	3 ± 1		45 ± 5	2.0

注: NC, 硝化纤维素; NG, 硝化甘油; DNT, 二硝基甲苯; DBP, 邻苯二甲酸二丁酯; C₁, 1 号中定剂。

3.3 NQ 发射药燃速压力指数计算

将(2)式两边取自然对数, 并以 p 为自变量求导, 得 NQ 发射药的燃速压力指数公式:

$$n = 1 + n_1 + n_2 \quad (3)$$

其中, $n_1 = -\frac{2pq_1}{Z} \cdot \frac{\partial \eta_1(p)}{\partial p}$; $n_2 = -\frac{2pq_2}{Z} \cdot \frac{\partial \eta_2(p)}{\partial p}$; $Z = \alpha + \beta + q_1\eta_1(p) + q_2\eta_2(p) + \gamma + 1$ 。

根据式(3)对上述三种发射药的燃速压力指数进行计算, 其结果如图 4 所示。由图 4 可见, NQ 作为组分可使发射药的燃速压力指数在中、高压力范围内下降, 并且在火炮膛压范围内压力指数均小于 1。这一计算结果与有关资料报道的硝胺发射药(RDX 和 HMX)的燃烧规律有很大不同。以 RDX 和 HMX 为高能填料的硝胺发射药在 40~100MPa 压力范

围内压力指数出现极大值,其数值大于^[5]。这是因为RDX类硝胺发射药的化学结构中缺少象[CN]之类的可裂解基团。因此,在优化设计硝胺发射药时,将NQ作为燃速改良剂以提高发射药化学结构中可裂解自由基的比例,可能起到降低压力指数的作用。

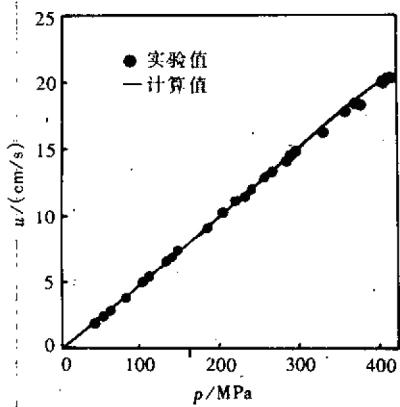


图1 SF-3发射药的燃速-压力曲线

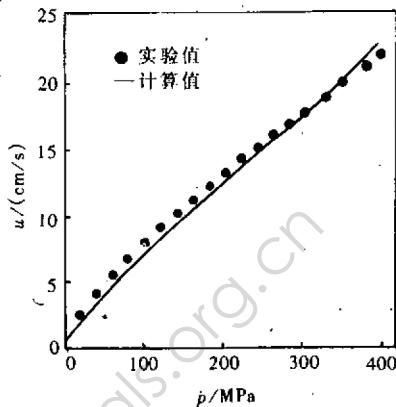
Fig.1 u - p curves of SF-3 propellant

图2 M30发射药的燃速-压力曲线

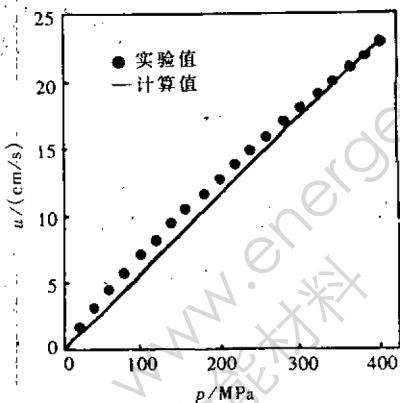
Fig.2 u - p curves of M30 propellant

图3 TF-3发射药的燃速-压力曲线

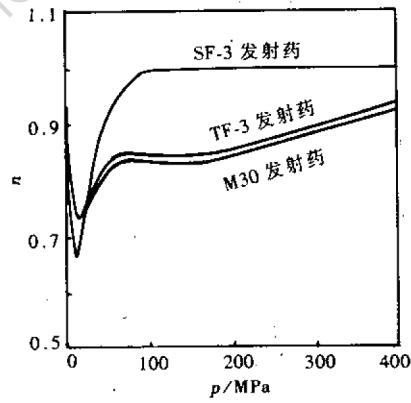
Fig.3 u - p curves of TF-3 propellant

图4 发射药的燃速压力指数-压力曲线

Fig.4 Pressure index vs pressure curves of some propellants

4 结 论

- 4.1 根据热分解结果的分析,提出了NQ发射药燃烧初期热分解反应的有关假设,并由此推导出燃速及燃速压力指数公式。
- 4.2 对国内外两种NQ发射药(M30,TF-3)的燃烧性能进行了数值模拟,计算结果与实测值十分吻合。
- 4.3 本文的压力指数计算公式可精确计算发射药在任意压力下的压力指数值,对进一步探讨发射药燃速压力指数的化学本质和优化压力指数有重要参考价值。

参考文献

- 1 赵宝昌等. NQ 发射药. 北京: 兵器工业出版社, 1989.
- 2 宋洪昌. 火药燃烧模型和燃速预估方法的研究:[博士学位论文]. 南京: 华东工学院, 1986.
- 3 陆安舫. 密闭爆发器恒压法及其应用. 工兵学报, 1986(2): 28~34
- 4 陆安舫等. 国外火药性能手册. 北京: 兵器工业出版社, 1990.
- 5 赵志建. 硝胺火药燃烧规律的研究:[博士学位论文]. 南京: 华东工学院, 1987.

MODELING ON BURNING CHARACTERISTICS OF NITROGUANIDINE PROPELLANT

Yang Dong Zhao Baochang Song Hongchang He Xiuying

(Chemical Coll., Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

ABSTRACT Thermal decomposition and combustion characteristics of nitroguanidine (NQ) are analysed. The NQ decomposition hypothesis about the primary stage of combustion is proposed, and the burning rate formula and pressure index formula of NQ propellant are derived. The NQ propellant burning characteristics from 0 MPa to 400 MPa are numerically modeled and calculated, the results are in good agreement with the experimental data.

The accurate calculated results show that the pressure index decreases at the middle and high pressure region with the addition of NQ to the double base propellant. The reason of low pressure index and the possibility of NQ as a burning rate modifier in nitramine (RDX and HMX) propellant are discussed.

KEYWORDS combustion chemical kinetics, NQ propellant, numerical modeling, pressure index of burning rate.



作者简介 杨栋(Yangdong), 1967年4月出生, 先后在山东大学化学专业, 西安近代化学研究所含能材料专业和南京理工大学含能材料专业取得学士、硕士和博士学位, 现任南京理工大学311教研室主任。从事推进剂燃烧机理和低特征信号推进剂的研究工作。