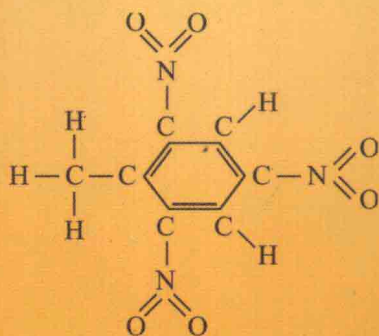
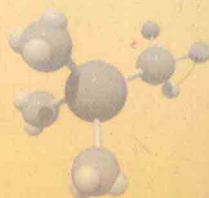
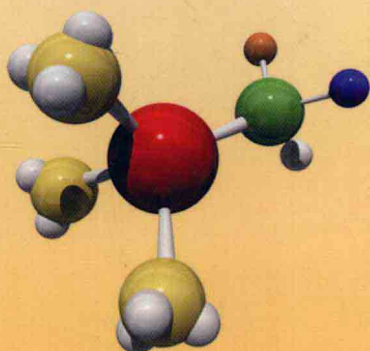




普通高等教育“十五”国家级规划教材

炸药的分子与配方设计

陆明 著



兵器工业出版社

普通高等教育“十五”国家级规划

炸药的分子与配方设计

陆 明 著

兵器工业出版社

内 容 简 介

本书阐述了炸药的分子与配方设计基础理论,如炸药的热化学、炸药的绿色化学;着重介绍了单质炸药(包括耐热炸药)分子设计的基本理论和合成方法,军用混合炸药(包括梯恩梯载体的混合炸药、高聚物粘结炸药、军用含铝炸药、液体炸药和低爆速炸药)的配方设计原理和方法,以及用数学模型法设计和评价工业炸药配方等内容。

本书可作为高等院校相关学科及专业的教师、研究生、本科生的教材,也可供从事炸药研究、设计、生产和使用单位的管理干部、工程技术人员及生产工人学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

炸药的分子与配方设计 / 陆明著. —北京:兵器工业出版社, 2004.8

ISBN 7-80172-247-7

I. 炸... II. 陆... III. ①炸药—分子结构—设计②炸药—配方—设计 IV. TQ564

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 050029 号

出版发行:兵器工业出版社
责任编辑:李翠兰 宋丽华
邮编社址:100089 北京市海淀区车道沟 10 号
经 销:各地新华书店
印 刷:济南市五三一印刷厂
版 次:2004 年 8 月第 1 版第 1 次印刷
印 数:1-1500

封面设计:仇雨婷
责任校对:全 静
责任印制:魏丽华
开 本:880×1230 1/32
印 张:11.75
字 数:347 千字
定 价:28.00 元

(版权所有 翻印必究 印装有误 负责调换)

前 言

炸药是指在一定的外界能量激发下能够发生极迅速的化学反应，发出大量的热量及气体，而对外做功的物质。常用的炸药主要有单质炸药、军用混合炸药和工业混合炸药，它们在国防军事和国民经济建设中具有重要的作用。单质炸药的分子设计是合成单质炸药的重要环节，配方设计是新型混合炸药研究开发的关键内容，而目前，国内外尚无专门论述单质炸药的分子设计和混合炸药的配方设计方面的书籍。

作者结合自己近几年来从事的科研项目，如高能量密度材料的合成、六硝基芪合成新工艺（1992 年获得兵器工业部级科技进步二等奖、1994 年获得国家发明三等奖）、结晶梯恩梯生产工艺（1998 年获得兵器工业部级科技进步三等奖）和膨化硝铵炸药（1997 年获得兵器工业部级科技进步特等奖、1998 年获得国家科技进步二等奖、1998 年获得江苏省科技进步三等奖）等的研究工作，开展了单质炸药的分子设计和混合炸药的配方设计研究，其中，尤其是工业炸药配方设计的研究，取得了一些积极的进展。其研究成果在《兵工学报》、《爆炸与冲击》、《应用化学》、《有机化学》、《南京理工大学学报》、《爆破器材》、《火炸药学报》、《含能材料》等国内核心期刊上和有关国际国内学术会议上发表论文 30 多篇，作者对这些论文和一些文献资料进行系统的整理归纳，形成了“炸药的分子和配方设计”一书的基本骨架和部分章节的核心内容。

本书的出版，将填补国内外炸药的分子与配方设计方面尚无教材的空白，对应用化学学科含能材料制造技术方向的研究生、本科生的学习；对从事炸药教学、研究、生产和使用的相关院所企业的工程技术人员的工作，提供一本有价值的参考教材，并具有很好的指导作用。本书对应用化学学科的发展、教材研究和教学改革将产生积极的效果，并将获得一定的社会效益。

本书是一部关于炸药的分子设计和配方设计的专著教材。针对单质炸药、军用混合炸药和工业混合炸药的组成不同，本书的内容分为四个部分。第一部分介绍炸药的热化学和绿色化学以及绿色化学和原子经济对炸药的要求，这些内容为炸药的分子设计和配方设计的理论基础，其中绿色化学和原子经济是当今国际化学研究的前沿领域；第二部分是单质炸药的分子结构，主要内容是分子结构与密度和能量的关系，高能单质炸药的分子结构特征与设计。由于耐热炸药在未来的航空航天和地球勘探中，将发挥非常重要的作用，本部分对耐热炸药的分子设计重点作了介绍；第三部分是军用混合炸药的配方设计，主要介绍军用混合炸药的配方设计原则，讨论混合炸药性能与配方设计的关系；第四部分是工业炸药的配方设计，主要内容是建立工业炸药配方设计的数学模型，用数理方法设计工业炸药配方，用数学模型评价和分析现有工业炸药配方，同时对低爆速炸药的配方设计理论进行了详细的介绍。

本书注重系统性、新颖性、理论性和实践性的统一。本书将较全面论述单质炸药的分子设计、军用混合炸药和工业炸药的配方设计，体现其系统性；炸药的绿色化学和用数学模型方法设计工业炸药的配方是作者的新近研究成果，体现其新颖性；将数学模型方法设计工业炸药配方的研究成果与生产实践相结合，得到一些既有一定的科学理论依据，又被实践检验为正确的结论，表现为理论性和实践性的统一。本书的出版，对我国炸药领域的科技发展，尤其是工业炸药技术的进步，将产生积极的推动作用。

本书可作为高等院校相关学科及专业的教材，也可供从事炸药研究、设计、生产和使用单位的管理、工程技术及生产人员参考。

本书由南京理工大学化工学院陆明教授编著，刘光烈研究员主审；在编著和出版过程中，得到了南京理工大学教务处的支持资助；吕春绪教授、刘祖亮研究员等老师，对本书提出了宝贵建议，在此深表谢意！

由于水平有限，书中错误在所难免，敬请读者批评指正。

作 者

2003 年 10 月

目 录

1 炸药的热化学	1
1.1 炸药及其爆炸特征	1
1.1.1 炸药的分类	1
1.1.2 炸药的爆炸特征	4
1.2 炸药的氧平衡	7
1.2.1 氧平衡的概念	7
1.2.2 氧平衡的计算	8
1.2.3 混合炸药的氧平衡计算	12
1.3 炸药化学变化的形式和爆轰反应化学方程式	13
1.3.1 炸药化学变化的形式	13
1.3.2 炸药爆炸反应方程式	15
1.3.3 工业炸药的爆炸反应方程式	17
1.4 炸药的生成焓	26
1.4.1 键能加和法计算炸药的生成焓	26
1.4.2 生成焓计算值的电子效应修正和几何因素修正	33
1.5 炸药的爆热	37
1.5.1 炸药爆热的计算	38
1.5.2 提高炸药爆热的途径	46
1.6 炸药的爆温	48
1.7 炸药的爆容	52
1.8 常用粉状工业炸药的爆热、爆容和爆温计算	53
参考文献	54
2 炸药的绿色化学	55
2.1 绿色化学与原子经济概述	55

2.1.1	绿色化学	55
2.1.2	原子经济	56
2.2	绿色化学对炸药的要求	57
2.2.1	绿色化学对炸药的要求	57
2.2.2	绿色化学对工业炸药原材料的要求	59
2.2.3	绿色化学对工业炸药配方和爆炸产物的要求	60
2.3	原子经济性和能量对工业炸药的要求	61
2.3.1	氧化剂的选择	61
2.3.2	可燃剂的选择	62
2.3.3	原子经济性对工业炸药爆轰产物的要求	64
2.4	绿色炸药技术	66
2.4.1	绿色炸药制造技术	66
2.4.2	安全低易损性炸药技术	72
2.4.3	可降解分子间炸药技术	76
	参考文献	81
3	单质炸药的分子特征与设计	83
3.1	单质炸药的分子特征	83
3.2	炸药密度的计算	85
3.2.1	摩尔折射度法	86
3.2.2	摩尔体积法	91
3.2.3	结晶化学法	98
3.3	单质炸药的密度与分子结构的关系	104
3.3.1	提高炸药密度途径的解析	104
3.3.2	键及基团对密度的贡献	105
3.3.3	特征密度 ρ_0 与结构的关系	111
3.3.4	K 值的影响因素	113
3.4	单质炸药能量水平的估算	117
3.4.1	单质炸药能量水平的估算	117
3.4.2	高爆热炸药合成方向的探讨	121
3.5	单质炸药的设计	123
3.5.1	高密度单质炸药的设计	123

3.5.2	缩合反应合成单质炸药	126
3.6	单质炸药设计和合成实例	136
3.6.1	1,4,6,9-四硝基-1,4,6,9-四氮杂双环[4,4,0]癸烷	136
3.6.2	2,4,7,9-四硝基-2,4,7,9-四氮杂双环[4,3,0]壬酮	137
3.6.3	1,3,5,7,7-五硝基-1,3,5-三氮杂环辛烷	139
3.6.4	2,4,6,8,10,12-六硝基-2,4,6,8,10,12-六氮杂三环 [7,3,0,0 ^{3,7}]十二烷二酮-5,11 (7201)	140
3.6.5	2,4,6-三硝基-2,4,6-三氮杂环己酮 (662)	141
3.6.6	1,3,3-三硝基氮杂环丁烷 (TNAZ)	142
3.6.7	六硝基六氮杂异伍兹烷	145
3.6.8	2,4,6,8-四取代-2,4,6,8-四氮杂双环[3,3,0]辛烷的合成	147
3.6.9	2,4,7,9,11,14-六氮杂三环[8,4,0,0 ^{3,8}]十四烷	150
	参考文献	151
4	耐热炸药的分子设计	154
4.1	概述	154
4.1.1	耐热炸药概述	154
4.1.2	耐热炸药的现状与发展	155
4.1.3	耐热炸药的应用	158
4.2	提高单质炸药分子耐热性的途径	162
4.2.1	氨基对提高耐热性的作用	163
4.2.2	共轭体系对提高耐热性的作用	163
4.2.3	成盐对提高耐热性的作用	164
4.2.4	分子结构对称性对耐热性的作用	166
4.3	耐热炸药的分子结构特征	167
4.3.1	1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯的分子结构与热安定性	167
4.3.2	六硝基芪的分子结构	173
4.3.3	2,6-双苦氨基-3,5-二硝基吡啶分子结构研究	177
4.4	典型耐热炸药的合成设计	183
4.4.1	合成 1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯的新方法	184
4.4.2	六硝基芪的合成新方法	187
4.4.3	2,6-二苦胺基-3,5-二硝基吡啶的合成新法	191

4.5	新型耐热炸药的设计和合成	195
4.5.1	2,4,6-三硝基-3-氨基氯苯的合成	195
4.5.2	2,6-二(2',4',6'-三硝基-3'-氨基苯胺基)-3,5-二硝基吡啶的合成	196
4.5.3	N,N'-二(2,4,6-三硝基-3-氨基苯基)乙二胺的合成	198
4.5.4	N,N'-二(2,4,6-三硝基-3-氨基苯基)脲的合成	199
4.5.5	2,4,6-三硝基-3-氨基氯苯与二元胺缩合反应研究	199
	参考文献	201
5	军用混合炸药的配方设计	203
5.1	军用混合炸药的概述	203
5.1.1	军用混合炸药的组成和分类	203
5.1.2	用于混合炸药的单质炸药	205
5.1.3	发展中的军用混合炸药	209
5.1.4	军用混合炸药的性能要求	212
5.2	梯恩梯载体的混合炸药配方设计	215
5.2.1	以梯恩梯为载体的混合炸药	215
5.2.2	以梯恩梯为载体的混合炸药的配方与性能	217
5.2.3	以梯恩梯为载体的混合炸药的改进	222
5.3	高聚物粘结炸药的配方设计	227
5.3.1	高聚物粘结炸药概述	227
5.3.2	造型粉的配方设计	229
5.3.3	塑性炸药的配方设计	239
5.3.4	挠性炸药的配方设计	244
5.4	军用含铝炸药的配方设计	249
5.4.1	军用含铝炸药的概况	249
5.4.2	军用含铝炸药的配方设计	253
5.4.3	含铝炸药的爆轰参数计算	262
5.5	液体炸药的配方设计	267
5.5.1	液体炸药的概况	267
5.5.2	液体炸药的配方设计	270

参考文献	277
6 工业炸药的配方设计	279
6.1 工业炸药的配方设计原则	279
6.1.1 工业炸药的氧平衡设计原则	279
6.1.2 性能、成本和爆破使用的平衡统一	280
6.1.3 减少环境污染和提高生产安全性	280
6.1.4 配方设计与生产工艺的综合考虑	281
6.1.5 工业炸药的配方设计要点	281
6.2 工业炸药配方设计的现状	281
6.2.1 工业炸药配方设计的现状	281
6.2.2 工业混合炸药配方设计的适用性和经济性原则	282
6.3 工业炸药配方设计的氧平衡法	283
6.3.1 解析法进行配方设计计算	283
6.3.2 图解法进行配方设计	284
6.3.3 图解法用于岩石膨化硝铵炸药的配方设计	286
参考文献	288
7 数学模型设计工业炸药配方	289
7.1 工业炸药配方设计数学模型的建立	289
7.1.1 含 C、H、O、N 元素的工业炸药配方设计数学模型的建立	289
7.1.2 含 C、H、O、N、Al 元素的工业炸药配方设计数学模型的建立	292
7.1.3 含 C、H、O、N、S 元素的工业炸药配方设计数学模型的建立	294
7.1.4 含 C、H、O、N、Na 的工业炸药配方设计数学模型的建立	295
7.2 岩石膨化硝铵炸药配方设计的数学模型	297
7.2.1 岩石膨化硝铵炸药的特点及生产工艺	297
7.2.2 岩石膨化硝铵炸药的配方设计数学模型	299
7.3 膨化铵油炸药配方设计的数学模型	306
7.3.1 大包膨化铵油炸药的配方设计的数学模型及	

求解	306
7.3.2 大包膨化铵油炸药配方的爆炸性能	308
7.4 膨化硝铵震源药柱的配方设计数学模型	308
7.4.1 膨化硝铵震源药柱概述	308
7.4.2 膨化硝铵震源药柱的配方设计数学模型	310
7.4.3 膨化硝铵震源药柱配方设计的实验研究	313
7.5 粉状铵梯油炸药配方设计的数学模型	315
7.5.1 粉状铵梯油工业炸药配方设计及最优化的数学模型 和求解	316
7.5.2 数学模型计算结果的分析	318
7.6 含铝膨化硝铵炸药配方设计的数学模型	318
7.6.1 含铝硝铵炸药配方设计的数学模型	319
7.6.2 含铝硝铵炸药配方设计数学模型的求解	320
7.6.3 含铝膨化硝铵炸药的爆炸性能研究	321
7.6.4 铝粉质量分数与炸药做功能力的关系	322
7.7 含硫膨化硝铵炸药配方设计的数学模型	323
7.7.1 硝铵硫磺工业炸药配方设计的数学模型	323
7.7.2 数学模型的计算结果	325
7.7.3 新型膨化硝铵硫磺炸药与现有工业炸药理论参数和 爆炸性能的比较	325
7.8 乳化炸药配方设计的数学模型	326
7.8.1 乳化炸药配方设计数学模型具体数学表达式和 求解	326
7.8.2 配方设计对乳化炸药爆热和爆容的影响	328
7.8.3 乳化炸药配方设计的实验研究	332
参考文献	333
8 工业炸药配方设计数学模型的其他应用	335
8.1 用工业炸药配方设计数学模型评价分析现有铵梯油炸药 的配方	335
8.1.1 粉状铵梯油炸药的基本参数	335
8.1.2 粉状铵梯油炸药配方设计的数学模型及计算	

结果	336
8.1.3 粉状铵梯油炸药理论配方的分析与评价	338
8.1.4 结论	340
8.2 氧平衡对粉状工业炸药爆炸性能影响的数学计算	340
8.2.1 含 C、H、O、N、Al 元素粉状工业炸药配方设计的 数学模型	340
8.2.2 氧平衡对粉状工业炸药爆炸性能影响的计算 依据	342
8.2.3 氧平衡对岩石膨化硝铵炸药爆炸性能影响的数学 计算	342
8.2.4 氧平衡对铵梯（油）炸药爆炸性能影响的数学 计算	345
8.2.5 氧平衡对含铝铵梯油炸药爆炸性能影响的数学 计算	349
8.2.6 结论	349
参考文献	351
9 工业低爆速炸药的配方设计	352
9.1 低爆速炸药的概述	352
9.2 低爆速炸药配方设计理论基础	353
9.3 低爆速炸药的配方及生产工艺	355
9.4 低爆速膨化硝铵炸药配方设计	358
9.4.1 低爆速膨化硝铵炸药的组成	358
9.4.2 低爆速膨化硝铵炸药的配方设计	358
9.4.3 低爆速膨化硝铵炸药的制备	359
9.4.4 低爆速膨化硝铵炸药的原材料成本分析	360
参考文献	361

1 炸药的热化学

1.1 炸药及其爆炸特征

1.1.1 炸药的分类

从热力学意义上讲，炸药是一种相对不稳定的物质，在外界能量作用下，能够自行发生急剧的化学变化，在极短的时间内突然释放大量的能量，产生的爆炸产物快速向周围膨胀，产生强冲击波，造成对周围介质的破坏。由这种化学变化引起的爆炸称为化学爆炸。发生化学爆炸时，参与爆炸的物质在瞬间发生分解或化合，变成新爆炸产物。

炸药因其组成、物理性能、化学性能和爆炸性能的不同分为很多种。通常有两种分类方法，一种是按炸药的用途分类；一种是按炸药的组成分类^[1, 2]。

1. 按用途分类

按其用途炸药可分为起爆药、猛炸药、火药和烟火剂四大类。

(1) 起爆药

起爆药是一种对外界作用十分敏感的炸药，在较轻微的外界作用（机械作用、热作用等）下，即可发生爆炸变化，而且其变化速度极快，一旦引爆便立即转变为稳定爆轰。起爆药主要用于引发猛炸药的爆炸，因此常用于装置各种起爆器材，如雷管、火帽等。起爆药也称为初发装药或第一装药。常用的起爆药有雷汞 $[\text{Hg}(\text{ONC})_2]$ 、叠氮化铅 $[\text{Pb}(\text{N}_3)_2]$ 、三硝基间苯二酚铅 $[\text{C}_6\text{H}(\text{ON}_2)_3\text{O}_2\text{Pb}]$ 和二硝基重氮酚 $[\text{C}_6\text{H}_2(\text{NO}_2)_2\text{ON}_2]$ 等。

(2) 猛炸药

猛炸药与起爆药相比，猛炸药的感度较低，使用时通常需要借

助于起爆药的作用才能激发爆轰，因此，有时也称猛炸药为次发装药或第二装药。猛炸药爆炸的主要形式是爆轰，一旦被起爆就会具有较高的爆速和强烈的破坏威力，因此军事上常用于装填各种弹药及爆破器材。常用的猛炸药有梯恩梯 $[C_6H_2(NO_2)_3CH_3]$ 、黑索今 $[(CH_2N-NO_2)_3]$ 、奥克托今 $[(CH_2N-NO_2)_4]$ 、泰安 $[C(CH_3)_3ONO_2]$ 、特屈儿 $[C_6H_2(NO_2)_3-N(CH_3)(NO_2)]$ 等，以及各种混合炸药。

(3) 火药

火药又称发射药。火药的主要化学反应形式是燃烧，能够在没有外界助燃剂（如氧）的参与下进行有规律的燃烧，放出大量的气体和热量，对外界做抛射功。主要用做炮弹、枪弹和火箭的发射燃料，也有用来做点火药和延期药的。

火药又分为黑火药（有烟火药）、单基火药、双基火药、三基火药和高分子复合火药。

黑火药是由硝石、木炭和硫磺按一定比例混合而成，其特点是易于点燃，燃烧迅速，点火能力强，性能稳定，广泛用于制作导火索、点火药和传火药等。

单基火药由 95% 的硝化棉和 5% 的非爆性组分构成，主要用做枪炮的发射药。

高分子复合火药是以高分子化合物作为粘结剂和可燃剂，加固态氧化剂为基本成分。它只用作火箭的发射装药，又称复合固体推进剂。

(4) 烟火剂

烟火剂通常由氧化剂、有机可燃物或金属粉及少量粘合剂等混合而成，用于装填特种弹药或烟火器材，以产生特定的烟火效应。烟火剂包括照明剂、烟幕剂、信号剂和曳光剂等。

起爆药、猛炸药、火药和烟火剂，都具有爆炸性能，在一定条件下都能产生爆轰。通常情况下，起爆药和猛炸药的基本形式是爆轰，而火药和烟火剂则主要是爆燃。通常所说的炸药主要是指猛炸药，它的生产和使用量较大。

2. 按组成分类

按其组成炸药可分为单质炸药和混合炸药两大类。

(1) 单质炸药

单质炸药是单一成分的化合物类炸药。这种化合物的分子内含有特殊的原子团，因而具有不稳定性，在外界一定的热能和机械能的作用下即行分解，引起爆炸反应。例如三硝基甲苯——梯恩梯（TNT）、三硝基苯酚——苦味酸、二硝基甲苯——地恩梯（DNT）、三硝基苯甲硝胺——特屈儿，及环三亚甲基三硝胺——黑索今（RDX）、环四亚甲基四硝胺——奥克托今（HMX）等都是具有一个或数个硝基（ NO_2 ）的硝基化合物；硝化甘油、硝化乙二醇、泰安以及硝化棉等是具有一个或数个硝酸酯（ ONO_2 ）原子团的硝酸酯类化合物；雷汞等雷酸盐类；硝酸铵等硝酸盐类；其他还有氯酸盐、高氯酸盐、叠氮化合物等等。

(2) 混合炸药

混合炸药是指由两种或两种以上独立的化学成分组成的爆炸混合物，是由含有丰富氧的物质为主要成分与不含氧的可燃物或含氧量不足的物质相互混合而成。此外，根据对炸药的爆炸性能、安全性能、力学性能、成型性能以及耐高低温性能的要求，还可以加入少量某些添加剂。因此，混合炸药的种类很多。无论在军用炸药领域，还是在民用炸药领域，混合炸药都得到了广泛地应用。下面介绍几种常用的混合炸药。

梯黑炸药。它是由梯恩梯和黑索今以不同的比例组成的混合炸药，是军事上应用最广泛的一种混合炸药。

钝化黑索今炸药。是由黑索今与钝感剂组成的粒状混合炸药，通常由黑索今和蜡等组成，如 A3（黑索今 91/蜡 9）炸药，A IX-1（黑索今 95/石蜡 5）炸药等。

含铝混合炸药。在炸药中加入适量铝粉，可以提高炸药爆炸热效应，从而提高爆炸威力。含铝炸药是混合炸药中高威力炸药的一个重要系列。常用的含铝炸药有钝黑铝炸药（钝化黑索今 80/铝粉 20）、梯黑铝炸药（梯恩梯 60/黑索今 24/粒状铝粉 13/片状铝粉 3）和 ТГАГ-5（梯恩梯 60/黑索今 24/铝粉 16，外加 5% 地蜡或石蜡）等等。

高分子混合炸药。这类炸药通常以高能炸药如黑索今、奥克托今、泰安等为主体，配以粘合剂、增塑剂、钝感剂等添加剂构成，按

爆炸性能可分为高爆速、高威力、低爆速、低易损性等类型；按其物理状态分为高强度、塑性的、挠性的、弹性的、泡沫态的等等，可以满足各种不同的需要。

硝铵炸药。也称为工业炸药，它是以硝酸铵为主要成分的混合炸药，通常由氧化剂硝酸铵、敏化剂硝基化合物和木粉、石蜡等可燃物混合而成。硝铵炸药现已有铵梯炸药、铵油炸药、浆状炸药、水胶炸药、乳化炸药、膨化硝铵炸药和粉状乳化炸药等多个品种，广泛用于采矿、采石、交通、能源、建筑以及爆炸加工等民用领域，同时它也是重要的军用代用炸药。

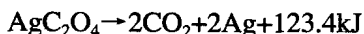
燃料空气炸药。它是一种新的爆炸能源，是由挥发性的碳氧化合物（如环氧乙烷，环氧丙烷、低碳的烷、炔、烯烃及其混合物）或固体粉状可燃物（如铝粉、镁粉等）作为可燃剂，以空气中的氧气作为氧化剂而组成的爆炸性气溶胶混合物。这种炸药主要用于军事目的，与凝聚炸药比较，有其独特的优点，并已受到各国的重视。

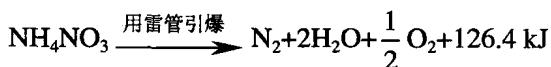
1.1.2 炸药的爆炸特征

从热力学意义上说，炸药是一种相对不稳定的物质，在外界作用下，能够自行发生高速化学反应，放出大量的热，并生成大量气体产物。以上三点被称为炸药爆炸的三个特征，也是任何化学反应导致爆炸的必备条件，三者互相关联，缺一不可^[2]。

1. 反应过程的放热性

反应放热是产生爆炸的必要条件之一。只有伴随热的释放，才会有爆炸反应的激发和爆炸反应的自动进行。此外，爆炸现象是一种能量的转化过程，即炸药通过爆炸反应释放的化学能变成爆炸反应产物的热能，产物的热能再转化为对周围环境介质所做的机械功。不放热或放热量相对较少的化学反应均不能产生爆炸现象。例如：





上述分解反应中， ZnC_2O_4 和 PbC_2O_4 因是吸热反应不发生爆炸； HgC_2O_4 、 AgC_2O_4 、 NH_4NO_3 因是放热的反应，而且释放的热量较多，则能发生爆炸；而 CuC_2O_4 虽然也是放热反应，但因放热较少，基本不显示爆炸性。这表明，反应过程的放热性是发生化学爆炸的首要条件。

但是，是不是凡放热反应都发生爆炸呢？是否放热越多的化学反应爆炸就越强烈呢？实际上并不是这样。例如，硝化甘油爆炸时放出的热量为 $6222\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ ，梯恩梯爆炸时放出热量为 $4232\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ ，而煤和笨燃烧时放出的热量却分别是 $8925\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 和 $9763\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。可见，一个放热反应过程是否发生爆炸，不能只看放热多少，如前所述，爆炸过程还必须具备极大的能量密度。煤燃烧时放热量虽然比硝化甘油爆炸时大得多，但前者的能量密度只有 $1.72 \times 10^4 \text{kJ} \cdot \text{m}^{-3}$ ，而后者则高达 $9.89 \times 10^6 \text{kJ} \cdot \text{m}^{-3}$ 。能量密度取决于化学反应过程进行的速度。这样就决定了爆炸必备的第二个特征。

2. 反应过程的高速度

爆炸反应的高速度是区别一般放热化学反应的重要标志。只有极高化学反应速度，即极高的能量释放速度，才能造成反应产物极高的能量密度。以煤的燃烧和黑索今爆炸为例， 1kg 煤完全燃烧放出的热量为 32660kJ ，而 1kg 黑索今爆炸时的爆热为 5860kJ ，但前者反应完了所需要的时间为数十分钟，而后者则只需要数微秒，也就是说，黑索今爆炸反应速度是煤燃烧速度的数千万倍。

由于炸药爆炸反应的速度极高，因而可以近似认为在爆炸完成的瞬间，爆炸产物并未来得及膨胀；爆炸反应所释放的热量几乎全部聚集在原来炸药所占据的体积内，从而使爆炸反应产物处于极高温度和压力状态，造成了极高的能量密度。而一般化学反应，反应速度缓慢，生成的气体产物和放出的热量均能充分发生扩散，不可能造成反应产物的高温高压状态，产物的能量密度也很低，其压力几乎是常压，因而不可能发生爆炸现象。某些炸药爆炸时和燃料混合物燃烧时的能量密度见表 1-1。