

高压物理学报

极端条件下含能材料的模拟研究思考

姬广富

Some Viewpoints on the Simulation Research of Energetic Materials under Extreme Conditions

Ji Guangfu

引用本文:

姬广富. 极端条件下含能材料的模拟研究思考[J]. 高压物理学报, 2025, 39(1):010102. DOI: 10.11858/gywlb.20240911

Ji Guangfu. Some Viewpoints on the Simulation Research of Energetic Materials under Extreme Conditions[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(1):010102. DOI: 10.11858/gywlb.20240911

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11858/gywlb.20240911>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

位错动力学在极端环境力学中的发展及应用

Advances and Application of Dislocation Dynamics in the Mechanics of Extreme Environment

高压物理学报. 2020, 34(3): 030101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20200516>

高温高压下高能钝感炸药TATB物性及相关实验技术研究进展

Advances of High-Temperature and High-Pressure Physical Properties and Experimental Technology on High-Energy Insensitive Explosive TATB

高压物理学报. 2022, 36(3): 030101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20220520>

高压下主族金属富氮化合物的结构与含能特性

Structure and Energy Properties of Nitrogen-Rich Compounds of Main Group Metals under High Pressure

高压物理学报. 2024, 38(4): 040101 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20230810>

高能量密度氮的研究进展

Research Progress of High Energy Density Nitrogen

高压物理学报. 2024, 38(4): 040102 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20230797>

硝酸铷高压相变和物理性质的第一性原理研究

First-Principles Study of the High-Pressure Phase Transition and Physical Properties of Rubidium Nitrate

高压物理学报. 2024, 38(4): 040103 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20240776>

K_2N_2 中一维氮链的压力诱导聚合

Pressure-Induced Polymerization of One-Dimensional Nitrogen Chains in K_2N_2

高压物理学报. 2024, 38(4): 040104 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20240719>

极端条件下含能材料的模拟研究思考

姬广富

(中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: 含能材料在军事、民用和航天等领域具有广泛应用, 极端条件下其物理化学性质会发生显著变化。通过模拟研究预测和优化含能材料性能具有重要意义, 包括性能预测、优化设计、安全评估、成本效率控制等。为此, 综述了极端条件下含能材料的研究背景、基本性质、模拟研究方法以及进展、关键问题以及相关实验研究进展。其中, 详细介绍了量子力学、分子动力学、蒙特卡罗和有限元等模拟方法及其研究进展, 阐述了高压、高温、激光作用和界面效应等极端条件下模拟研究的关键问题, 并列举了含能材料在撞击感度、化学释能规律、3D打印、绿色电合成、爆轰机理和超高含能材料合成等方面的实验研究进展。通过遴选代表性研究, 展示了模拟研究在实际问题中的应用和解决方案。同时, 介绍了一些最新研究成果, 以反映该领域的最新进展和未来趋势。此外, 详细讨论了跨学科研究的实现方式以及含能材料在极端条件下的安全性问题, 包括可能的风险和预防措施。

关键词: 含能材料; 极端条件; 模拟研究; 高压; 高温; 激光作用

中图分类号: O521.2

文献标志码: A

1 极端条件下的含能材料研究背景及意义

含能材料作为一类能够在特定条件下迅速释放出大量能量的特殊物质, 在现代社会的众多领域中扮演着举足轻重的角色。其家族成员包括炸药、推进剂、烟火剂等, 广泛应用于军事国防、民用建设以及航空航天等诸多关键领域。在军事领域, 它们是武器装备威力的关键支撑; 在民用领域, 它们在各类爆破工程中不可或缺; 在航天领域, 它们更是火箭推进等动力系统的核心要素。极端条件, 如高温、高压、高速撞击以及激光照射等特殊环境, 能够促使含能材料发生更为复杂且独特的物理和化学变化, 进而开辟出更多样化的能量释放途径。深入探究极端条件下含能材料的特性和行为, 具有极其重要的科学意义和广泛的应用价值, 不仅与现代科技发展的诸多需求紧密相连, 更是推动材料科学、能源技术以及军事国防等领域进步的关键驱动力之一。

1.1 极端条件下的含能材料研究背景

(1) 国防军事领域的强劲推动

在当今复杂多变且竞争激烈的国际军事格局中, 各国纷纷致力于军事技术的创新与发展, 以维护国家的安全和战略利益。含能材料作为现代武器系统的核心动力源和毁伤源, 其性能的优劣直接关系到武器装备的关键作战性能指标, 如威力、射程、精度以及可靠性等。以导弹技术为例, 为了实现更远的打击射程和更高的命中精度, 需要含能材料具备更高的能量密度, 从而为导弹提供更强大的推力, 确保其在飞行过程中保持稳定的动力性能。同时, 先进的炸药材料能够使炮弹、炸弹等弹药在爆炸瞬间释放出更为巨大的能量, 显著增强对目标的毁伤效果, 从而有效提升军事作战效能^[1]。然而, 现代战争的战场环境日益复杂恶劣, 武器装备常常需要在极端条件下运行。例如: 在导弹发射瞬间, 含能材料会

* 收稿日期: 2024-10-16; 修回日期: 2024-11-23

作者简介: 姬广富(1963—), 男, 博士, 研究员, 主要从事凝聚态化学与物理研究. E-mail: cyfjfkf@caep.cn

受到高温气流的强烈冲击;在炎热气候地区长时间存储时,含能材料要面临高温环境的考验;在深海作战环境或高海拔地区,含能材料需要承受高压或低压条件的挑战;炮弹发射以及炸弹爆炸时,含能材料又会遭受强冲击和高过载作用。这些极端条件对含能材料的性能表现提出了严苛的要求,研究其在这类条件下的性能变化和反应机理,对于确保武器装备在复杂战场环境下的可靠运行和有效使用具有重要意义^[2]。只有深入理解和掌握含能材料在极端条件下的特性,才能提升军队的战斗力,为作战胜利提供坚实保障,这也是现代国防军事领域对含能材料研究的迫切需求所在。

(2) 航空航天事业的高速发展需求

航空航天领域作为人类探索宇宙和发展高科技的前沿阵地,对含能材料的性能和可靠性提出了近乎极致的要求。在火箭推进系统中,含能材料作为推进剂,承担着为火箭提供强大推力的关键任务。火箭发射过程是一个极其复杂和极端的过程,涉及极高的加速度、剧烈的温度变化以及巨大的压力波动。例如,在火箭发动机点火瞬间,推进剂会瞬间受到高温高压的强烈冲击,此时含能材料必须迅速而稳定地燃烧,产生持续且强大的推力,同时确保燃烧过程的精确可控和高度安全。对于深空探测任务而言,航天器在漫长的太空飞行过程中,会面临各种极端恶劣的环境条件,如极低的温度、高真空状态以及强烈的宇宙辐射等。在这样的环境下,含能材料需要始终保持稳定的性能,以确保在关键时刻,如轨道调整、着陆等关键操作中正常工作,否则可能导致整个航天任务失败。此外,为了提高航天任务的整体效率和降低成本,航天领域的科研工作者一直在不懈研发具有更高能量密度的含能材料。通过使用高能量密度的含能材料,可以有效减少推进剂的质量和体积,从而为航天器增加更多的有效载荷,实现更多的科学探测任务或提升航天器的功能^[3]。卫星技术在现代通信、导航、气象观测以及地球资源探测等众多领域发挥着不可替代的重要作用。在卫星发射和运行过程中,含能材料同样具有广泛而关键的应用价值。例如,卫星发射装置中的点火系统和分离装置,通常都依赖含能材料来实现精确控制。在太空环境中,卫星面临着诸多潜在风险,如微流星体的撞击、太阳风暴等极端事件的威胁,这就要求含能材料具备出色的抗冲击性能和良好的环境适应性,以保障卫星的安全稳定运行。同时,为了满足卫星长期在轨运行的能源需求,研究人员正在积极探索将一些新型含能材料应用于卫星的能源存储和转换系统,如基于含能材料的微型电池或能量回收装置等,以提高卫星的能源利用效率、延长使用寿命,进一步提升卫星系统的性能和可靠性^[4]。

(3) 能源领域的潜在应用需求

随着全球经济的持续发展和人口的不断增长,能源需求呈现日益增长的态势。与此同时,人们对可持续能源的追求也愈发迫切,不断寻求新的解决方案^[1]。含能材料因其独特的高能量密度特性,在高能量密度存储与转换技术研发中展现出了潜在的应用价值。在电池技术领域,一些含能材料有望作为高能量密度电池的电极材料或电解质添加剂,通过在充放电过程中的化学反应,实现电能的高效存储和释放。与传统电池材料相比,含能材料具有显著的优势,能够提供更高的能量密度,意味着电池可能具有更长的续航里程或更大的储能容量,从而更好地满足电动汽车、便携式电子设备等对高性能能源存储的需求。例如,电动汽车行业一直在寻求突破续航里程瓶颈,含能材料的应用有望为其提供解决方案。此外,含能材料在超级电容器的研发中也具有重要的应用潜力。超级电容器作为一种新型储能器件,需要具备快速的能量释放和吸收特性,含能材料恰好满足这一要求,从而有效提高电容器的功率密度和充放电效率,为需要瞬间高功率输出的应用场景提供理想的解决方案,如电动汽车的快速充电、工业设备的瞬间启动等。在核能领域,含能材料同样展现出了一定的应用前景。一方面,通过深入研究含能材料与核材料之间的相互作用机制,可以为开发新型的核燃料和核反应控制材料提供重要的理论依据和技术支持。例如,一些含能材料可以作为添加剂或包覆材料应用于核燃料中,通过优化其性能,提高核燃料的能量释放效率,同时增强核反应的安全性和可控性。另一方面,在核废料处理和核反应堆退役等复杂而关键的环节中,含能材料也可能发挥重要作用。利用含能材料独特的化学反应特性,研究人员可以设计出一些创新的处理方法和技术,以降低核废料的放射性和毒性,实现核废料的安全处理和妥善处置,从而最大限度地减少对环境的潜在影响,确保核能产业的可持续发展^[5]。

(4) 科学研究的内在驱动

极端条件下的含能材料研究为科学家们提供了一扇独特而珍贵的窗口,使他们能够深入探索物质的微观结构与宏观性质之间的内在联系。在高温、高压等极端条件下,含能材料内部的原子和分子排列会发生显著变化,化学键的强度、长度以及角度等参数也会相应改变,这种微观结构的变化导致了材料的电子结构、晶体结构以及物理和化学性质的一系列变化。通过深入研究这些变化,科学家们可以逐步揭示物质在极端条件下的基本规律和内在机理,从而进一步丰富和完善材料科学的理论体系^[2]。例如,利用高压技术,研究人员可以精确研究含能材料在不同压力下的晶体结构相变过程,深入了解相变发生的机制和条件,以及相变对材料性能的具体影响。通过光谱学和量子力学计算等先进技术手段,科学家们可以深入探究含能材料在极端条件下的电子结构变化,揭示电子结构与化学反应活性、能量传递等重要性质之间的密切关系^[2]。这些研究成果不仅有助于加深对含能材料本身的理解,还能够为其他材料的研究提供宝贵的借鉴和启示,从而推动整个材料科学领域不断发展。与此同时,随着科学技术的持续进步,极端条件下的实验技术和理论模型也得到了飞速发展,为含能材料研究提供了更为强大的支持。在实验技术方面,金刚石对顶砧(diamond anvil cell, DAC)技术的出现使得实验室能够实现高达几百吉帕甚至更高的压力环境,为研究人员精确控制和测量含能材料在高压下的结构和性质变化提供了有力工具^[2]。同步辐射光源、中子散射等先进技术则能够提供关于含能材料原子和分子结构的详细信息,帮助科学家们深入了解材料在极端条件下的微观行为。在理论模型方面,量子力学计算、分子动力学模拟等方法不断完善和发展,能够从原子和分子水平对含能材料的结构和性能进行精确预测和深入分析^[4]。理论模型与实验技术的紧密结合,使得科学家们能够更加全面、深入地研究极端条件下含能材料的性能和反应机理,为含能材料的设计和 optimization 提供强有力的理论依据和技术手段^[2]。

1.2 含能材料在极端条件下的应用领域

含能材料在极端条件下的应用领域极为广泛,涵盖了众多重要领域,以下将详细阐述其在各领域中的具体应用。

(1) 空间任务领域

火箭推进剂是火箭发射的关键动力源,在火箭发射过程中,推进剂需要在极端的高温和高压环境下稳定燃烧,产生足够强大的推力,以克服地球引力,将火箭送入太空预定轨道,因此,其性能的稳定性和可靠性直接关系到火箭发射的成败。卫星分离装置则在卫星进入轨道后发挥关键作用,利用含能材料制造的分离装置能够精确地释放太阳能板或其他科学仪器,确保卫星在太空中正常运行并开展各项科学探测任务。

(2) 军事应用领域

穿甲弹是现代军事装备中的重要武器之一,其弹芯通常含有高能材料。在击中目标时,这些高能材料能够瞬间产生极高的压力和温度,凭借强大的能量穿透装甲目标,对敌方装备造成严重破坏。地雷和水雷作为防御性武器,其中含有的炸药需要在极端环境下保持稳定性能,无论是在沙土环境还是水下环境,都能够在触发时迅速爆炸,有效地发挥其防御和攻击作用。

(3) 民用爆破领域

在矿山开采过程中,炸药是破碎岩石的主要手段,需要在地下复杂的极端环境中安全且有效地使用^[5]。这要求炸药具有足够高的爆炸力,能够高效破碎岩石,同时还要确保操作过程的安全性,避免发生意外爆炸事故。建筑物拆除工作中,高能材料被用于精确控制建筑物的拆除过程,通过合理设计爆破方案,能够使建筑物按照预定方向倒塌,减少对周围环境的影响,确保拆除工作的安全和高效。

(4) 深海探测领域

在进行海底地质调查或建设海底设施时,海底爆破作业是一项重要技术手段。含能材料被用于海底爆破作业,能够穿透坚硬的海底沉积物,为地质勘探提供必要的的数据支持,同时也为海底设施建设创造有利条件。

(5) 应急救援领域

在地震、山体滑坡等自然灾害发生后,救援通道往往被废墟和障碍物堵塞,此时使用含能材料可以开辟救援通道,为被困人员争取宝贵的救援时间。在极地或冰冻海域,冰层的存在对船只航行构成严重威胁,使用含能材料爆破冰层,能够为船只开辟安全的航道,保障海上救援和物资运输等工作顺利进行。

(6) 科学研究领域

在实验室中,研究人员利用含能材料创造高压环境,研究材料在极端条件下的物理性质,深入理解材料的行为规律。地球物理勘探中,含能材料被用于产生地震波,通过对地震波传播特性的分析,探测地下地质结构或石油资源等,为资源勘探提供重要依据。

1.3 研究极端条件下含能材料的内在原因

截至目前,科学家们深入研究极端条件下的含能材料主要基于以下几个关键方面的考量。

(1) 能量释放机制

在极端条件下含能材料的能量释放机制与常温常压条件下存在显著差异。含能材料在受到高速撞击、高温或高压等极端条件作用时,会迅速发生复杂的化学反应,释放出大量的热能和气体,从而产生强大的爆炸效应^[6]。例如,炸药在引爆瞬间,其内部的化学键会以极快的速度断裂并重新组合,这种化学键的剧烈变化导致能量在短时间内迅速释放。深入了解这些特殊的能量释放机制,对于精确控制含能材料的性能以及确保其使用安全性具有重要意义。

(2) 反应动力学

含能材料在极端条件下的反应动力学涉及反应速率、反应路径以及能量释放速率等多个关键参数。这些参数不仅决定了含能材料在极端条件下的反应速度和方式,还与其内部的应力状态、温度梯度以及化学组成等因素密切相关^[2]。深入研究反应动力学,有助于更好地理解含能材料在极端条件下的行为特性,从而为其合理设计和有效应用提供坚实的理论依据。

(3) 安全性与稳定性

极端条件往往会增加含能材料的不稳定性,使其更容易发生意外爆炸或火灾等危险情况。环境因素如温度、压力和湿度等对含能材料的稳定性有着显著影响。例如,长期储存的炸药可能会因为环境温度、湿度的变化导致感度增加,即对外界刺激的敏感性增强,从而大幅增加了意外引爆的风险^[1]。因此,深入研究含能材料在极端条件下的安全性和稳定性,是保障人员生命安全和设备设施完好的关键所在,从而制定出更加科学合理的储存、运输和使用规范,有效降低潜在风险,确保含能材料在各种应用场景中安全可靠。

(4) 新材料开发

随着科学技术的不断进步,各个领域对含能材料的性能都提出了越来越高的要求。尤其是在一些更为极端的环境中,含能材料需要保持出色的稳定性,并能够实现高效的能量释放。为了满足这些需求,开发新型含能材料成为当前研究的重点和热点。这些新材料将具备更高的能量密度,从而能够在相同体积或质量下释放出更多的能量;这些新材料将具有更好的稳定性,以适应各种复杂恶劣的环境;同时,它们还应具备更低的感度,降低在使用和储存过程中的安全风险。计算材料科学的蓬勃发展为新型含能材料的发现和设计提供了强有力的技术支持和理论指导^[3]。借助先进的计算模拟手段,研究人员可以在虚拟环境中对大量不同结构和组成的材料进行筛选和优化,极大地提高了新材料研发的效率和成功率,为新型含能材料的诞生开辟了新的途径。

(5) 模拟与实验的互补

实验研究极端条件下的含能材料存在诸多挑战,不仅具有一定的危险性,而且成本高昂,实验过程复杂且耗时费力。相比之下,计算机模拟作为一种有效的补充手段应运而生。通过模拟,研究人员可以在不影响实际材料的情况下,对含能材料在极端条件下的行为进行预测和分析。例如,采用分子动力学模拟可以深入研究含能材料在冲击加载下原子级别的结构变化细节,从而为理解含能材料在极端

动态条件下的响应机制提供重要依据^[4]。模拟研究与实验研究相互配合、互为补充,能够更全面、深入地揭示含能材料在极端条件下的特性和规律,加速含能材料领域的研究进展。

1.4 极端条件下的含能材料在国防和民用领域的应用

极端条件下的含能材料在国防和民用领域的应用极为广泛,以下将列举部分应用场景、材料要求及具体示例。

(1) 国防领域

火箭推进剂: 火箭发射需要强大的推力,因此火箭推进剂必须具备在高温高压下稳定燃烧的能力,同时具有高能量密度以提供足够动力、良好的存储稳定性以便长期储存以及在复杂环境下保持性能不变。液体火箭推进剂中的液氧-液氢组合以及固体火箭推进剂等都是常见的选择,它们在导弹、运载火箭等航天装备中发挥着关键作用,相关研究可参考文献^[7]。

装甲穿透弹药: 装甲穿透弹药需要极高的硬度和密度以保证在撞击目标时能够有效穿透装甲,同时还要具备优异的高温抗性以应对撞击瞬间产生的高温。贫铀、钨合金等材料常用于此类弹药,它们在反坦克武器、穿甲弹等装备中展现出卓越的性能,具体可参考文献^[8]。

爆破设备: 爆破设备要求含能材料具有高能量输出,以实现强大的爆破效果,同时反应迅速且具备良好的安全性能,确保操作过程中的安全性。三硝基甲苯(TNT)、C4、塑料炸药等都是常用的爆破材料,广泛应用于军事工程、战场爆破等场景,相关研究可参考文献^[9]。

防空和反导弹系统: 该系统中的含能材料需要高能量输出以保证对来袭目标的有效拦截,并且能够实现时间的精确控制,确保在关键时刻发挥作用。防空导弹弹头、反坦克导弹装药等都对含能材料的性能有着严格要求,其研究成果可查阅文献^[10]。

(2) 民用领域

采矿爆破: 矿山开采中,炸药需要有足够高的爆炸力来破碎坚硬的岩石,同时要确保操作安全,避免对矿工和矿山设施造成伤害。铵油炸药、水胶炸药等是常见的采矿爆破材料,在各类矿山开采作业中广泛应用,相关技术和应用可参考文献^[5]。

建筑拆除: 含能材料用于建筑拆除的关键在于精确控制爆炸范围和力量,使建筑物按照预定方案倒塌,减少对周围环境的影响。预制炸药包、电子雷管等技术和材料在城市建筑拆除、旧设施改造等项目中发挥着重要作用,详细内容可参考文献^[11]。

地震勘探: 地震勘探需要控制爆炸规模和频率,产生合适的地震波,以便准确探测地下地质结构和石油资源等。地震勘探炸药、震源枪等就是为此专门设计的地震勘探材料和设备,其应用原理和效果可参考文献^[12]。

水下爆破: 在水下环境中作业的含能材料必须能够稳定运行并承受水压,确保爆破效果。水下炸弹、水雷等在海洋工程建设、航道疏通等领域有着重要应用,相关技术和案例可查阅文献^[13]。

应急救援: 应急救援场景要求含能材料能够快速响应,提供足够的动力,同时保证操作安全。救援爆破装置、生命线开辟工具等在地震救援、山体滑坡抢险等紧急情况下发挥着关键作用,具体案例和技术可参考文献^[14]。

1.5 模拟研究在含能材料性能预测与优化中的重要性

模拟研究在含能材料性能预测与优化方面具有不可替代的重要意义,具体体现在以下几个关键方面。

(1) 性能预测

燃烧性能预测: 含能材料的燃烧过程复杂且关键,其燃烧速度、燃烧温度以及燃烧产物等参数直接影响其应用效果。模拟研究通过分子动力学模拟等先进技术手段,可以深入分析含能材料分子在不同温度、压力等条件下的运动和相互作用情况,从而精确推断燃烧反应的速率和路径。这对于实际应用中根据具体需求选择合适的含能材料至关重要,例如为火箭推进剂设计提供坚实的理论支持,确保

火箭发动机稳定、高效地工作。相关研究可参考文献 [15]。

爆轰性能预测: 爆轰性能是含能材料的重要性能指标之一, 爆速、爆压等参数对于武器装备的威力和效能起着决定性作用。模拟研究能够基于材料的化学结构、物理性质等因素, 运用数值计算方法如有限元法、有限差分法等模拟爆轰波的传播过程, 准确计算爆速、爆压等关键参数, 为含能材料的设计和应用提供重要参考依据。在新型炸药的研发过程中, 模拟预测爆轰性能能够有效减少实验的盲目性, 显著提高研发效率, 相关研究可查阅文献 [16]。

热稳定性预测: 含能材料在储存和使用过程中必须具备良好的热稳定性, 否则可能引发严重的安全事故。模拟研究可以通过模拟含能材料在不同温度、热辐射等条件下的热分解过程, 深入分析材料的热分解反应机理、反应速率等关键因素, 从而准确评估材料的热稳定性, 并为其储存和使用条件提供科学合理的建议。例如, 对于一些在高温环境下使用的含能材料, 通过模拟研究可以精确确定其能够承受的最高温度和最长使用时间, 有效保障使用安全, 相关研究可参考文献 [17]。

(2) 优化设计

结构优化: 含能材料的结构对其性能有着深远影响。模拟研究可以通过构建不同的分子结构模型, 详细分析分子的空间结构、化学键等因素对性能的影响机制, 进而优化材料的结构设计。例如, 利用密度泛函理论计算, 可以精准优化含能材料分子的电子结构和空间构型, 提高其能量密度和稳定性。在晶体结构方面, 模拟研究能够深入分析晶体的堆积方式、晶格参数等对材料性能的影响规律, 为制备高性能的含能材料提供重要的理论指导, 相关研究可参考文献 [18]。

组分优化: 含能材料通常由多种组分组成, 不同组分之间的相互作用对材料性能有着重要影响。模拟研究可以系统分析不同组分的比例、混合方式等因素对含能材料性能的影响规律, 从而实现组分设计的优化。例如, 在推进剂的配方设计中, 通过模拟研究可以准确确定氧化剂、燃料等组分的最佳比例, 显著提高推进剂的能量输出和燃烧效率, 相关研究可参考文献 [1]。

工艺优化: 含能材料的制备工艺直接关系到其性能表现。通过模拟材料的制备过程, 可以深入分析工艺参数如温度、压力、反应时间等对材料性能的影响机制, 从而优化制备工艺。例如, 在含能材料的合成过程中, 通过模拟研究可以精确确定最佳的反应温度和反应时间, 有效提高材料的产率和纯度, 同时减少副反应的发生, 相关研究可参考文献 [15]。

(3) 安全评估

敏感度分析: 含能材料对外部刺激如撞击、摩擦、静电等较为敏感, 容易引发意外爆炸, 严重威胁人员和设备安全。模拟研究可以通过模拟含能材料在不同刺激条件下的响应过程, 深入分析材料内部的应力分布、能量传递等机制, 从而准确评估其敏感性。例如, 通过模拟撞击过程中含能材料的应力变化和能量传递路径, 预测材料是否会发生爆炸, 为材料的安全储存、运输和使用提供科学依据, 相关研究可参考文献 [19]。

事故模拟: 在含能材料的生产、储存和使用过程中, 可能发生各种安全事故, 如火灾、爆炸等。模拟研究可以模拟事故的发生过程, 详细分析事故的原因和影响范围, 为制定有效的安全防范措施提供重要参考。例如, 通过模拟含能材料仓库的火灾事故, 深入分析火灾的蔓延速度、温度分布等情况, 从而确定最佳的灭火方案和疏散路线, 最大程度减少事故损失, 相关研究可参考文献 [3]。

(4) 成本和效率

减少实验成本: 含能材料的实验研究具有较高的危险性和成本, 而且实验过程复杂、耗时较长。模拟研究在计算机上进行, 无需进行大量的实际实验, 能够有效降低研究成本。同时, 模拟研究可以快速筛选出性能较好的含能材料, 显著减少实验的次数和工作量, 提高研究效率, 相关研究可参考文献 [15]。

缩短研发周期: 通过模拟研究, 能够在短时间内获得含能材料的性能参数和优化设计方案, 为实验研究提供明确的指导方向, 避免盲目地进行实验, 减少研发过程中的失误和重复工作, 有效缩短研发周期。例如, 在新型含能材料研发过程中, 先通过模拟研究确定材料的结构和性能, 再进行实验验证, 可以大大提高研发效率, 加速新型含能材料的应用进程, 相关研究可参考文献 [17]。

(5) 模拟研究在含能材料性能预测与优化中的重要作用

性能预测: 模拟研究借助计算机模拟技术,能够在分子或原子层面上对含能材料的性能进行精准预测。这种预测能力为含能材料的研究及开发提供了极为关键的信息,因为它可以在材料合成和测试之前,提前揭示其潜在性能。例如,通过计算化学反应动力学,准确预测含能材料在燃烧过程中的速率,这对于推进剂和炸药的设计至关重要;利用量子力学和分子动力学模拟,精确预测材料在爆炸时的能量释放情况,从而科学评估其爆炸威力;模拟还可以预测材料在储存和运输过程中的稳定性,帮助识别可能导致意外反应的条件,为保障材料安全提供重要依据,相关研究可参考文献 [20]。

结构-性能关系: 模拟研究有助于深入揭示含能材料的微观结构与宏观性能的内在关系,对于深刻理解材料行为和指导新材料设计具有重要意义。例如,通过模拟,研究不同分子结构如何影响材料的能量密度和反应性,分析晶体结构对材料物理和化学性质的影响,如晶格能和熔点等,还可以探究含能材料与其他材料界面的相互作用,这对于理解混合系统的性能至关重要,相关研究可参考文献 [19]。

安全评估: 模拟研究在含能材料的安全评估中发挥着关键作用,它能够帮助识别和有效控制潜在的风险。例如,通过模拟可以清晰揭示材料在极端条件下的反应机理,从而准确预测材料的安全性;模拟还可以预测材料在高温下的热失控行为,对于防止意外火灾和爆炸至关重要;此外,模拟能够评估含能材料对冲击的敏感性,为设计抗冲击材料提供重要参考,相关研究可参考文献 [21]。

优化设计: 模拟研究为含能材料的优化设计提供了强大的工具,使得在不进行实际实验的情况下,也能够对材料性能进行有效改进。例如,模拟可以帮助研究人员在不实际合成新材料的情况下,测试不同的化学组成对性能的影响,从而筛选出最优组合;模拟可以深入探索不同的材料结构,找到最佳的性能配置;模拟还可以用于评估材料的环境影响,设计出更环保的含能材料,相关研究可参考文献 [3]。

综上所述,极端条件下的含能材料模拟研究是一个充满挑战和机遇的领域。通过持续深入的研究,有望在含能材料性能提升、安全性保障、新型材料开发以及跨学科应用等方面取得重大突破,为国防、航天、能源等领域的发展提供强有力的支撑。

为此,本文将围绕极端条件下含能材料模拟展开全面而深入的探讨。首先,将深入分析极端条件下含能材料的基本性质,包括其分类及特点,以及在高压、高温、强磁场和强辐射等极端条件下物理化学性质的显著变化;然后,系统介绍模拟研究方法及进展,涵盖量子力学、分子动力学、蒙特卡罗和有限元法等多种方法及其在含能材料研究中的应用和发展趋势,通过展示模拟研究的最新案例,展现其在含能材料实际研究中的具体应用和成果;接着,探讨极端条件下含能材料模拟研究的关键问题,如高压下的结构相变、高温下的热分解与燃烧、高温高压的协同影响、激光作用下的响应行为以及界面效应与力学性能等;同时,密切关注含能材料在极端条件下的安全性问题,深入分析可能存在的风险,并提出切实可行的预防措施;最后,对该领域的未来发展进行全面展望,包括高精度模拟技术的持续发展、新型含能材料的发现及设计、实验与模拟的深度融合、安全性与稳定性评估的进一步完善以及跨学科研究的深入推进等,旨在为极端条件下含能材料模拟研究提供全面、系统的参考资料和具有前瞻性的研究指导,推动该领域的研究不断向前发展,为相关领域的技术进步和创新应用提供有力支持。

2 极端条件下含能材料的基本性质

2.1 含能材料的分类及特点

根据用途,含能材料可以分为 5 类。

(1) 炸药^[22]: 包括高炸药(如 TNT)和低炸药(如黑火药),能迅速释放大量能量,产生高温高压气体,通常具有较高的敏感性和爆炸速度。

(2) 推进剂^[23]: 用于火箭和导弹推进,分为固体推进剂和液体推进剂,具有良好的能量密度和稳定性,燃烧过程控制严格,以确保安全性和性能。

(3) 火焰材料^[24]: 用于产生火焰和热量,如烟花和信号弹,通常具有较低的爆炸性,主要用于视觉效果和信号传递。

(4) 自燃材料^[25]: 用于催化和特种燃料, 在特定条件下能自燃, 如某些金属粉末, 具有较高的反应性和能量释放能力。

(5) 超高能材料^[26]: 一种新型材料, 能量密度极高, 具有潜在的军事和航天应用, 目前仍处于研发中, 其安全性和稳定性是主要关注点。

根据材料种类, 含能材料可以分为 5 类。

(1) 有机含能材料^[22]: 主要由碳、氢、氧、氮等元素构成, 包括炸药、推进剂等, 具有较高的能量密度。

(2) 无机含能材料^[27]: 主要由金属和非金属元素构成, 如硝酸铵、氯酸钾等, 通常具有较高的稳定性和较低的敏感性。

(3) 金属含能材料^[25]: 包含金属元素, 常用于增强能量释放效果, 如铝粉、镁粉等, 可用于推进剂和炸药的添加剂。

(4) 高能聚合物^[26]: 由高分子链构成, 具有良好的机械性能和能量释放特性, 包括聚合物基推进剂和聚合物炸药。

(5) 氮基含能材料^[28-30]: 含有多个氮原子的化合物, 如黑索金(RDX)、奥克托今(HMX)以及富氮化合物等, 具有高能量和高密度。

根据分子结构, 含能材料可以分为 8 类^[31]。

(1) 硝基化合物类: 含 $-\text{NO}_2$ 或 $-\text{ONO}_2$ 基团, 能量密度高, 爆热和爆速较高, 感度较高, 如 TNT、硝化甘油。

(2) 叠氮化合物类: 含 $-\text{N}_3$ 基团, 能量高, 分解反应迅速, 感度高, 如叠氮化铅($\text{Pb}(\text{N}_3)_2$)、叠氮甲烷(CH_3N_3)。

(3) 含卤化合物类: 含 $-\text{NX}_2$ (X 为卤素), 可增加密度和能量, 部分燃烧会产生有害气体, 如三氟化氮(NF_3)、二氯异氰尿酸钠($\text{Na}(\text{CNO})\text{Cl}_2$)。

(4) 偶氮化合物类: 含 $-\text{N}=\text{N}-$ 或 $-\text{N}=\text{N}=\text{N}-$ 等偶氮基团, 能量和反应活性高, 稳定性差, 如偶氮二异丁腈(AIBN)、偶氮二甲酰胺(ADC)。

(5) 过氧化物类: 含 $-\text{O}-\text{O}-$ 或 $-\text{O}-\text{O}-\text{O}-$ 等过氧基团, 能量高、氧化性强、稳定性差, 如过氧化氢(H_2O_2)、过氧化苯甲酰(BPO)。

(6) 炔基化合物类: 含碳碳三键($-\text{C}\equiv\text{C}-$), 反应活性和能量高, 稳定性较差, 如乙炔(C_2H_2)、丁炔二酸二甲酯(DMAD)。

(7) 硝胺类: 含硝胺基团, 能量密度高、稳定性好, 爆轰性能良好, 如 RDX、HMX、六硝基六氮杂异伍兹烷(CL-20)。

(8) 杂环类: 含杂环, 具有独特的化学和物理性质, 能量和稳定性较高, 如三唑类化合物、呋喃类化合物等。

2.2 极端条件下的物理化学性质

在极端条件下, 含能材料的物理化学性质会发生显著且复杂的变化, 这些变化对于理解含能材料的性能、安全性以及在特定应用场景中的行为具有重要意义。以下将从高压、高温、强磁场和强辐射 4 种极端条件分别进行详细描述。

2.2.1 高压条件

(1) 晶体结构变化

A. 分子间相互作用改变

在高压环境下, 含能材料分子间的距离显著减小, 分子间的范德华力等相互作用增强。以硝基甲烷为例, 随着压力的增加, 分子间的排列更加紧密, 原本较弱的分子间相互作用变得不可忽视, 从而影响分子的振动模式和转动自由度。分子间距离的压缩可能导致分子间的电荷转移或重新分布, 进而影响整个晶体的电子结构。例如, 在某些含能晶体中, 高压下相邻分子的电子云发生一定程度的重叠, 改变了分子的局部电荷密度, 可能对化学键的性质产生微妙的影响^[2]。

B. 晶格参数和对称性变化

高压通常会导致晶体的晶格参数发生改变。晶格常数可能会减小, 晶胞体积也随之压缩。对于具有特定晶体结构的含能材料, 如立方晶系的 RDX, 高压下晶胞的边长会缩短。

晶体的对称性也可能发生变化。一些原本具有较高对称性的晶体结构, 在高压下可能会降低对称性, 出现结构相变。例如, 某些含能材料在常压下属于正交晶系, 在高压下可能转变为单斜晶系或更低对称性的结构。这种对称性的改变会影响晶体的物理性质, 如光学性质、热导率等^[15]。

C. 化学键的变化

高压会使化学键的键长缩短, 键能增加。对于含能材料中的共价键, 如 C—N、N—O 等键, 键长的缩短会增强原子间的相互作用, 使化学键更加稳定。然而, 这种稳定性的增加是相对的, 在一定程度上也可能影响含能材料的反应活性。分子内和分子间的化学键角度也可能发生变化。例如, 在一些含氮杂环的含能材料中, 高压下环内的键角可能会发生微小的改变, 这会影响分子的几何构型和电子云分布, 进而对其物理化学性质产生影响^[19]。

(2) 状态方程改变

A. 体积-压力关系

含能材料的体积随着压力的增加而减小, 但其压缩率并非线性变化。在较低压力下, 体积变化可能相对较大; 随着压力升高, 材料的压缩变得越来越困难, 压缩率逐渐减小。例如, 对于 TNT 等含能材料, 通过实验测量和理论计算可以得到其体积与压力的关系曲线, 该曲线呈现出非线性特征。状态方程中的参数, 如体弹模量、压缩系数等, 会随着压力的变化而改变。体弹模量在高压下通常会增大, 表明材料抵抗体积压缩的能力增强; 而压缩系数则减小, 反映了材料体积对压力变化的敏感度降低^[3]。

B. 密度-压力关系

高压导致含能材料的密度增加。由于分子间距离的减小和晶体结构的压缩, 单位体积内的分子数增多, 因此密度增大。这种密度的增大对于含能材料的能量密度有重要影响, 因为能量密度与质量及体积相关, 密度的增加可能会提高含能材料的能量释放潜力。不同含能材料的密度-压力曲线有所差异, 这取决于其分子结构和晶体结构的特点。例如, CL-20 在高压下的密度增加幅度可能与 RDX 不同, 这是其分子结构和堆积方式不同导致的^[1]。

(3) 能量密度增大

A. 分子间相互作用能的变化

高压下分子间相互作用增强, 导致分子间的势能增加。含能材料中分子间的静电相互作用、范德华力等在高压下都发生了变化, 使得分子间的结合更加紧密, 储存了更多的势能。这种势能的增加可以看作能量密度增大的一个方面。当含能材料发生化学反应或爆炸时, 这些额外储存的势能会释放出来, 为反应提供更多的能量^[21]。

B. 化学键能的变化及其对能量密度的影响

如前所述, 高压使化学键的键长缩短、键能增加。虽然单个化学键键能的增加相对较小, 但是对于整个含能材料分子来说, 所有化学键键能的总和变化是可观的^[22]。这意味着在高压下, 含能材料分子需要更多的能量来打破化学键, 从而在一定程度上提高了其能量储存能力。当含能材料发生爆炸或分解反应时, 这些更强的化学键在断裂时会释放出更多的能量, 进而提高含能材料的能量密度。例如, 高压下硝基化合物的硝基基团的化学键性质发生改变, 使得爆炸时释放的能量比常压下更高^[19]。

(4) 理论计算与实验验证

通过量子化学计算和分子动力学模拟等理论方法, 可以预测高压下含能材料能量密度的变化趋势。例如, 采用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算含能材料在不同压力下的电子结构和能量状态, 得到能量密度与压力的关系曲线。实验方面, 利用高压实验装置, 如 DAC 等, 直接测量含能材料在高压下的物理化学性质, 包括密度、状态方程等参数, 进而通过计算得到能量密度。实验结果与理论计算相互验证, 进一步揭示了高压下含能材料能量密度增加的机制^[2]。

2.2.2 高温条件

(1) 热分解加速

A. 反应动力学变化

高温显著提高了含能材料的热分解反应速率。根据阿伦尼乌斯方程,反应速率常数与温度呈指数关系,温度升高会使反应速率常数大幅增加。例如,对于常见的含能材料 HMX,常温下其热分解速率较低,但当温度升高到一定程度时,分解速率会迅速加快。

热分解反应的活化能在高温下可能发生变化。一方面,高温可能使一些反应路径的活化能降低,使原本难以发生的反应变得更容易进行;另一方面,随着温度升高,反应体系的复杂性增加,可能出现新的反应路径和中间体,导致整体的热分解动力学行为更加复杂^[17]。

B. 分解产物的变化

高温下含能材料的热分解产物会发生改变。随着温度的升高,分解产物可能更加多样化,并且生成更多的小分子气体产物,如 NO_2 、 CO_2 、 H_2O 等。例如,硝化甘油在不同温度下的热分解产物分布不同,高温时会产生更多的气体产物,这些气体产物的迅速膨胀是含能材料爆炸能量释放的重要因素之一。

高温还可能导致分解产物的进一步反应。一些初级分解产物在高温下具有较高的活性,会继续发生二次反应或相互反应,生成更复杂的产物。例如,含能材料分解产生的自由基在高温下可能相互结合或与其他分子反应,形成新的化合物^[15]。

C. 热分解机理的转变

在常温下,含能材料的热分解可能主要通过一种或几种特定的机理进行,如化学键的均裂或异裂;但在高温下热分解机理可能发生转变。例如,某些含能材料在低温时以分子内的某一化学键断裂为主导的分解机理,在高温下可能会转变为涉及分子间相互作用和协同反应的更复杂的机理。

高温还可能引发含能材料的热失控反应。当热量产生速率大于散热速率时,温度会持续升高,导致热分解反应加速,甚至引发爆炸。这是高温下含能材料安全性面临的重要问题之一^[3]。

(2) 化学反应性增强

A. 与氧气的反应

高温下含能材料与空气中氧气的反应加剧。含能材料中的一些可燃成分,如碳、氢等,在高温下更容易与氧气发生氧化反应。例如,含能材料中的有机基团在高温有氧环境下会迅速燃烧,释放大量的热量和气体产物。氧化反应速率随着温度的升高而加快,并且可能引发连锁反应。一旦氧化反应开始,释放的热量会进一步提高含能材料的温度,使反应更加剧烈。同时,氧化反应生成的氧化物可能影响含能材料的后续分解反应和能量释放过程^[32]。

B. 与其他物质的相互作用

在高温下,含能材料还可能与其他添加剂、杂质或周围的材料发生相互作用。例如,在含能材料的制备过程中,可能会添加一些稳定剂或催化剂,这些添加剂在高温下可能与含能材料发生化学反应,改变含能材料的性能。含能材料与杂质的相互作用不容忽视。杂质可能会作为催化剂或引发剂,加速含能材料的热分解或其他化学反应。例如,含能材料中微量的金属离子杂质在高温下可能催化分解反应,降低含能材料的稳定性。

此外,高温下含能材料与周围材料的热传导和热辐射相互作用也会增强。如果含能材料与导热性良好的材料接触,热量会更快地传递,可能导致含能材料局部温度升高,加速化学反应。而热辐射在高温下也会更加显著,影响含能材料与周围环境的能量交换^[3]。

2.2.3 强磁场条件

(1) 电子结构改变

A. 电子轨道变化

强磁场会对含能材料中电子的轨道运动产生影响。根据量子力学原理,电子在磁场中受到洛伦兹

力作用,使轨道发生偏转和量子化。例如,对于含能材料中的 π 电子体系,强磁场会改变其电子云的分布和轨道形状。电子轨道的变化会影响电子的能量状态。在磁场作用下,电子的能级发生分裂,形成不同的塞曼能级。这种能级分裂会改变电子的跃迁概率和光谱特性,进而影响含能材料的光学、电学等性质^[19]。

B. 自旋状态变化

电子的自旋在强磁场下也会受到影响。含能材料中的未成对电子具有自旋磁矩,在磁场中会发生取向变化。例如,一些含氮自由基的含能材料,其电子自旋状态在强磁场下会发生改变,可能导致分子的磁性和化学反应性发生变化。

自旋-轨道耦合作用在强磁场下也会增强。这种耦合作用影响电子的跃迁和能量转移过程,对于含能材料的光吸收、光发射等过程具有重要意义。例如,在强磁场下,含能材料的荧光光谱可能发生位移和强度变化,这是由于自旋-轨道耦合作用改变了电子的激发态和弛豫过程^[33]。

C. 电荷分布与化学键性质变化

强磁场引起的电子结构变化会导致电荷分布改变。电子云在磁场作用下会重新分布,使得分子中的电荷密度发生变化。这种电荷分布的改变会影响分子内和分子间的静电相互作用,进而对化学键的性质产生影响。例如,在含能材料分子中,强磁场可能改变化学键的极性,影响化学键的键长、键能等参数。对于一些具有共轭结构的含能材料,磁场对电荷分布的影响更为显著,可能改变其共轭体系的电子传输性质和化学反应活性^[19]。

(2) 能量吸收和释放变化

A. 磁场对能量吸收过程的影响

含能材料在吸收外界能量(如光、热等)时,强磁场会影响其吸收效率和吸收方式。在光吸收过程中,磁场可以改变电子的跃迁选择规则,使含能材料对不同波长的光的吸收能力发生变化。例如,某些含能材料在强磁场下的吸收光谱出现红移或蓝移现象,即吸收峰向长波或短波方向移动。对于热吸收过程,磁场可能影响含能材料的热传导和热容量。由于磁场对电子和分子运动的作用,热传导过程中热量的传递方式可能发生改变,热容量也可能有所不同。这会影响含能材料在加热过程中的温度分布和能量积累速度^[15]。

B. 磁场对能量释放过程的影响

在含能材料发生反应甚至爆炸而释放能量时,强磁场可能影响能量的释放方式和速率。例如,对于一些基于电爆炸原理的含能材料装置,强磁场可以改变电流分布和电子运动轨迹,从而影响电爆炸过程中的能量释放特性。磁场还可能对含能材料爆炸产生的冲击波传播和能量分布产生影响。冲击波在磁场中传播时,会与磁场相互作用,导致冲击波的形态、速度和能量分布发生改变。这对于理解含能材料的爆炸威力和作用范围具有重要意义^[15, 34]。

C. 磁致能量变化的理论解释与实验研究

理论上,通过量子力学和电磁学的相关理论可以对强磁场下含能材料的能量吸收和释放变化进行解释。例如,利用微扰理论计算磁场对电子能级和跃迁概率的影响,进而分析光吸收和发射过程的变化。实验上,采用磁共振技术(如核磁共振、电子顺磁共振等)可以研究含能材料在强磁场下的电子结构和自旋状态变化。同时,通过测量含能材料在不同磁场强度下的光吸收、热传导等物理量,以及观察其在爆炸或反应过程中的能量释放特性变化,可以进一步验证理论模型、理解磁场对含能材料能量变化过程的影响机制^[15, 18]。

2.2.4 强辐射条件

(1) 分子损伤

A. 化学键断裂及自由基的产生

强辐射(如高能射线、紫外线等)具有较高的能量,能够使含能材料分子中的化学键断裂。例如,

γ 射线等高能辐射可以直接打断含能材料分子中的 C—N、N—O 等化学键, 产生自由基和离子等活性中间体。自由基的产生会引发一系列连锁反应。含能材料分子中的自由基具有较高的反应活性, 可以与其他分子或自由基发生反应, 进一步破坏含能材料的分子结构。例如, 硝基自由基可以与相邻的分子发生反应, 导致硝基的脱落或分子的分解, 降低含能材料的稳定性和性能^[35]。

B. 晶体结构破坏

对于晶状含能材料, 强辐射还可能破坏其晶体结构。辐射能量可以使晶体中的晶格缺陷增多, 甚至导致晶格坍塌。例如, 在长时间的辐射作用下, 含能材料晶体的 X 射线衍射(X-ray diffraction, XRD)谱会发生变化, 衍射峰变宽或消失, 表明晶体的有序结构受到破坏。晶体结构的破坏会影响含能材料的物理性质, 如密度、硬度、热导率等, 同时, 也会对其化学性质产生影响, 使得含能材料更容易发生分解反应或与其他物质发生化学反应^[36]。

C. 性能下降与失效机制

分子损伤和晶体结构破坏最终会导致含能材料性能下降甚至失效, 如爆炸性能受到影响, 爆速、爆压等参数可能降低。辐射导致的化学键断裂和结构破坏会使含能材料爆炸时能量释放不完全或不均匀。对于一些在特殊环境下使用的含能材料, 如太空环境中的含能材料, 强辐射的影响更为显著。辐射可能使含能材料在储存和使用过程中逐渐失效, 从而影响相关设备或系统的正常运行^[37]。

(2) 相态变化

A. 熔化与蒸发过程

含能材料在高温下会经历熔化过程。随着温度升高, 当达到其熔点时, 含能材料从固态转变为液态。在熔化过程中, 分子间的作用力逐渐减弱, 分子运动的自由度增加。例如, TNT 的熔点相对较低, 在一定温度下会熔化, 其液态下的流动性和扩散性增强。当温度继续升高到沸点以上时, 含能材料会发生蒸发变为气态。在蒸发过程中, 分子需要克服液体的表面张力和分子间的吸引力进入气相。一些挥发性较强的含能材料, 如硝化甘油, 在高温下容易蒸发, 其气态分子在空气中的扩散速度较快^[5]。

B. 相态转变对物理化学性质的影响

相态的变化会显著影响含能材料的密度。固态时密度相对较大, 液态时密度有所减小, 气态时密度则变得非常小。这种密度的变化会影响含能材料的能量传递和爆炸性能。例如, 在炸药的爆炸过程中, 与固态相比, 液态或气态含能材料的能量释放更加迅速和均匀, 因为分子的扩散速度更快, 能够更有效地与周围介质相互作用。

相态转变还会影响含能材料的比热容、热导率等热物理性质。液态含能材料的比热容通常比固态大, 意味着在吸收相同热量时, 液态含能材料的温度升高幅度相对较小。不同相态下的热导率也有所不同, 固态时, 热导率较高, 有利于热量在材料内部传导, 液态和气态时, 热导率则相对较低^[3]。

此外, 温度也会改变含能材料的原子堆积方式, 形成固固相变, 最终影响含能材料的物理性能。当然, 相态变化对含能材料的化学反应性也有影响。液态和气态含能材料分子间的接触更加充分, 反应活性通常比固态时更高, 更容易与其他物质发生化学反应。

(3) 能量传递和激发

A. 辐射能量的吸收与转移

含能材料可以吸收辐射能量, 辐射的光子或粒子与含能材料分子相互作用, 将能量传递给分子。例如, 紫外线辐射被含能材料分子吸收后, 电子会从基态跃迁到激发态, 实现能量吸收。吸收的能量在分子内和分子间转移, 能量可以通过分子内的振动、转动等方式在分子内部传递, 也可以通过分子间的相互作用(如氢键、范德华力等)在分子间传递。这种能量转移过程会影响含能材料的局部温度分布和化学反应活性。

对于晶状含能材料, 能量转移还可能涉及晶格振动和电子-声子耦合等机制。辐射能量激发的电子可以与晶格振动相互作用, 将能量传递给晶格, 导致晶格温度升高。在强辐射条件下这种电子-声子耦合可能对含能材料的热稳定性和热分解过程产生重要影响。

B. 激发态分子的性质与反应活性

处于激发态的含能材料分子具有更高的能量和反应活性。激发态分子的电子结构和化学键性质与基态分子不同,可能导致分子的几何构型、电荷分布等发生变化。例如,激发态的硝基化合物分子中,硝基的电子云密度可能会发生改变,使得硝基的反应活性增强。激发态分子更容易发生化学反应。它们可以与周围的分子发生碰撞,进行能量转移或化学反应。例如,激发态的含能材料分子可能与空气中的氧气发生反应,生成氧化产物,或者与其他含能材料分子相互作用,引发连锁反应。激发态分子的寿命通常较短,它们会通过各种方式回到基态,释放出吸收的能量。该过程可能伴随着光发射、热释放或化学反应等。例如,激发态的含能材料分子可以通过荧光或磷光发射释放能量,也可以通过热分解反应将能量转化为化学能。

C. 辐射对含能材料光学性质的影响

强辐射可以改变含能材料的光学性质。辐射能量的吸收和激发会导致含能材料的吸收光谱、发射光谱等发生变化。例如,紫外线辐射可能使含能材料的吸收边向长波方向移动,即红移,意味着含能材料对更长波长的光具有吸收能力。辐射还可能引起含能材料的荧光增强或猝灭。激发态分子的荧光发射强度和寿命会受到辐射的影响。例如,在某些情况下,辐射可以促进激发态分子的荧光发射,使荧光强度增强;而在另一些情况下,辐射可能导致荧光猝灭,即荧光强度减弱或消失。

含能材料的光学性质变化可以用于辐射检测和监测。通过测量含能材料在辐射前后的光学性质变化,判断含能材料是否受到辐射以及辐射的强度和类型。例如,利用含能材料的荧光变化可以设计辐射传感器,用于检测环境中的辐射水平。

3 模拟研究方法及进展

含能材料模拟研究已经有很长的历史,目前,已经有非常成熟的方法,下面将介绍这些方法。

3.1 量子力学方法

3.1.1 理论基础

量子力学从微观角度出发,以薛定谔方程等基本原理为基础,精确地描述了含能材料分子中电子的运动状态和相互作用。通过求解这些方程,可以得到分子的电子结构、能级、轨道等信息,这些信息对于理解含能材料的化学性质、反应活性、稳定性等至关重要。例如,通过量子力学计算可以确定含能材料分子中化学键的强度、电子的分布等,从而预测分子的反应活性位点和可能的反应路径。

3.1.2 常用技术

(1) Hartree-Fock 方法

Hartree-Fock 方法将多电子体系的波函数用单电子波函数的乘积近似表示,每个电子在其他电子所产生的平均势场中运动。其优点是计算相对简单,能够在一定程度上考虑电子之间的平均相互作用,对于一些简单的分子体系可以给出较为合理的结果。例如,对于小分子含能材料的初步电子结构计算,Hartree-Fock 方法可以提供基础信息。但是,该方法忽略了电子间的关联效应,对于电子之间相互作用较强的含能材料体系来说是一个重要的缺陷,可能导致计算结果不准确。例如,在一些含能材料的激发态计算中,Hartree-Fock 方法往往无法准确描述电子的激发过程^[38]。

(2) DFT

DFT 将体系的能量表示为电子密度的函数,避免了直接求解复杂的多电子波函数,大大降低了计算难度。它通过引入各种交换关联泛函来近似描述电子间的相互作用,在计算效率与准确性之间取得了较好的平衡。DFT 可以准确地预测含能材料分子的几何结构、电子结构、能量等性质。例如,通过 DFT 计算可以研究含能材料分子的前线轨道能级、电荷分布等,从而分析其反应活性和稳定性。常用的交换关联泛函有局域密度近似(local-density approximation, LDA)、广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)等,不同的泛函对于不同的含能材料体系可能具有不同的适用性^[18]。

3.1.3 研究进展

近年来,量子力学方法在含能材料研究中的应用不断发展。一方面,随着计算机硬件性能的不断提升,能够处理的含能材料体系规模越来越大,计算精度也不断提高。例如,对于一些复杂的含能材料大分子或团簇体系,可以通过高性能计算机进行精确的量子力学计算。另一方面,新的量子力学计算方法和技术不断涌现。例如,多尺度量子力学方法将量子力学与其他模拟方法相结合,如量子力学/分子力学(*quantum mechanics/molecular mechanics*, QM/MM)方法在研究含能材料的界面反应、与周围环境的相互作用等方面具有很大的优势,可以在保证计算精度的前提下扩大模拟体系的规模和复杂度^[15]。

3.1.4 量子力学方法在含能材料结构优化中的应用

以新型含能材料聚合氮为代表的全氮化合物为例,在极高的压力和温度下,氮分子间的距离被缩短,致使双原子分子离解,原子重排而形成带有双键或单键的聚合氮。由于分子键能的差异,如果在环境条件下稳定并分离出聚合氮,则外部刺激会引发从单键材料向双原子氮的逆向转化,能量水平达 10 倍以上 TNT 当量^[39]。与传统的 C、H、O、N 含能材料相比,聚合氮的理论爆速在 14 km/s 以上,爆炸产物主要为氮气,不会对环境造成污染,而且用在军事上也不易被检测到,具有低信号的优点。因此,聚合氮是最渴望获得应用的新一代含能材料。科学家们正持续深入研究,以提高其能量密度和稳定性。通过 DFT 计算,可深入分析聚合氮的分子结构。2020 年,预测出由 N_{10} 分子组成的芳香族多氮晶体,其能量优于先前提出的 N_8 和 N_6 分子晶体,并且在环境条件下具有稳定性^[40-42]。这种在环境压力下稳定的多氮环状结构预测可能为寻找全氮芳香分子晶体开辟新的领域,有助于指导新的聚合氮合成。

近年来,量子蒙特卡罗方法被应用于含能材料的电子结构计算。该方法结合了量子力学和蒙特卡罗方法的优点,能更准确计算电子结构,尤其适用于具有强电子关联效应的含能材料体系。例如,在对新型含能材料的研究中,采用量子蒙特卡罗方法准确计算出电子分布和能级情况,揭示了其特殊的化学反应活性位点,为进一步优化材料性能提供了理论依据^[43-44]。

3.2 分子动力学方法

3.2.1 理论基础

基于牛顿力学定律,将含能材料体系中的每个分子看作一个粒子,通过跟踪粒子的位置、速度、加速度等随时间的变化,来研究体系的宏观性质和微观行为。分子之间的相互作用通过力场描述,力场函数通常包含化学键的伸缩、弯曲、扭转等能量项以及非键相互作用(如范德华力、库仑力等)能量项^[45]。

3.2.2 常用技术

(1) 经典分子动力学

经典分子动力学使用经验性的力场来描述分子间的相互作用,这些力场参数通常是通过拟合大量实验数据得到的。例如,用 Lennard-Jones 势函数描述非键相互作用,用简单的谐波势函数描述化学键伸缩等。经典分子动力学方法的计算效率高,可以模拟较大规模的含能材料体系和较长时间尺度的过程,如模拟含能材料在不同温度、压力条件下的结构变化、热传导、扩散等过程,研究含能材料的热稳定性、力学性能等^[45]。

(2) 从头算分子动力学

从头算分子动力学(*ab initio* molecular dynamics, AIMD)基于量子力学的第一性原理计算分子间的相互作用力,不依赖经验力场,因此具有较高的准确性。它可以更准确地描述分子间化学键的形成和断裂过程以及电子结构变化。然而,AIMD 的计算成本非常高,只能模拟较小规模的体系和较短时间尺度的过程。AIMD 通常与经典分子动力学方法结合使用,例如在研究含能材料的反应机理时,先使用 AIMD 方法研究反应的初始阶段,然后使用经典分子动力学方法模拟后续的反应过程^[36]。

(3) 深度势能分子动力学

深度势能分子动力学是一种结合了机器学习和分子动力学的方法,通过大量的第一性原理计算数据训练深度神经网络,得到能够准确描述含能材料体系中原子间相互作用的势函数,这种势函数可以

在保持较高精度的同时, 大幅提高计算效率。深度势能分子动力学方法在处理复杂的含能材料体系时具有很大的优势, 可以快速准确地模拟含能材料的结构演化、反应过程等^[46]。

3.2.3 研究进展

在含能材料的热分解研究方面, 分子动力学模拟可以揭示热分解过程中的微观机制, 如化学键的断裂顺序、中间产物的生成和演化等。通过模拟不同温度、压力条件下的热分解过程, 可以预测含能材料的热稳定性和分解速率, 为含能材料的设计和应用提供理论指导。在冲击响应研究中, 分子动力学模拟可以模拟含能材料在冲击作用下的结构变化、应力分布、能量传递等过程, 帮助理解含能材料的冲击敏感性和爆轰性能。例如, 通过分子动力学模拟研究含能材料在冲击作用下的相变、缺陷形成等过程, 对于提高含能材料的安全性和可靠性具有重要意义^[15]。

3.2.4 分子动力学方法在含能材料冲击响应研究中的应用

采用分子动力学方法可以模拟冲击作用下含能材料原子级结构变化、应力分布和能量传递过程。结果表明, 材料中某些化学键(如 N—N 键、C—N 键以及硝酸酯键等)在冲击时易断裂, 导致能量释放不均, 影响爆轰性能。基于此, 添加稳定剂(如高分子黏结剂)后重新模拟, 能量释放将更均匀, 爆轰性能显著提高。经实际冲击实验验证, 爆轰速度得到提高, 爆轰压力也有所增加^[47–50]。

新开发的极化力场模型可用于含能材料模拟研究。该模型能更准确地描述分子间相互作用, 尤其适用于极性分子的含能材料体系。在对含能材料热分解研究中, 使用该模型模拟的分解温度和速率^[51–52]与实验结果更接近, 误差很小, 说明该新力场模型具有更高的准确性, 能更好地预测含能材料性能。

3.3 蒙特卡罗方法

3.3.1 理论基础

蒙特卡罗方法是一种基于随机抽样的数值计算方法, 通过对含能材料体系的随机抽样和统计分析, 研究体系的性质和行为。它利用随机数生成器产生大量的随机样本, 根据样本的统计结果估计体系的各种性质^[53]。

3.3.2 常用技术

(1) Metropolis 算法

Metropolis 算法是蒙特卡罗方法中常用的一种抽样算法, 用于在给定的温度和能量条件下随机生成含能材料体系的构型, 并根据一定的接受准则决定是否接受该构型。接受准则通常基于体系能量变化和玻尔兹曼分布, 即如果新构型的能量低于当前构型的能量, 则接受新构型, 如果新构型的能量高于当前构型的能量, 则以一定的概率接受新构型, 这个概率与能量差及温度有关。通过不断重复这个过程, 可以得到含能材料体系在不同条件下的构型分布和热力学性质。例如, 可以使用 Metropolis 算法研究含能材料的相平衡、构象变化等问题^[54]。

(2) 重要性抽样

对于一些复杂的含能材料体系, 某些构型的出现概率可能非常低, 直接抽样效率很低。重要性抽样方法通过对抽样过程进行加权, 增加重要构型的抽样概率, 提高计算效率和准确性。例如, 在研究含能材料的反应路径时, 可以使用重要性抽样方法重点抽样反应过程中的关键中间体和过渡态构型^[4]。

3.3.3 研究进展

在含能材料的相平衡研究中, 蒙特卡罗方法可以模拟含能材料在不同温度、压力和组成条件下的相态变化, 确定相图和相变规律。例如, 通过蒙特卡罗模拟可以研究含能材料在固态、液态和气态之间的相变过程, 以及含能材料与其他物质的混合相行为。在结构优化方面, 蒙特卡罗方法可以搜索含能材料分子的最优构象和晶体结构。通过随机生成大量的构象, 并根据能量和其他约束条件进行筛选, 找到具有最低能量的构象和最稳定的晶体结构^[4]。

3.3.4 蒙特卡罗方法在含能材料相平衡研究中的应用

采用蒙特卡罗方法, 结合 Metropolis 算法和重要性抽样技术, 可以模拟大量构型变化, 研究含能材

料体系在不同温压条件下的相平衡状态, 确定相图和相变规律。依据模拟结果, 在某高温高压环境下, 准确预测材料相变, 据此调整储存条件, 避免因相变导致的性能下降或安全事故^[55-56]。

基于机器学习的蒙特卡罗抽样方法在不断开发中。该方法通过学习已知含能材料体系的构型分布和热力学性质, 高效抽样重要构型, 从而提高计算效率和准确性, 可用于含能材料体系相平衡研究, 更快速准确地确定相图和相变规律^[57]。

3.4 有限元方法

3.4.1 理论基础

有限元方法是将材料体系离散为有限个小单元, 通过对每个小单元的力学、热学等性质进行分析, 将这些小单元的结果进行组合, 得到整个体系的宏观性质。有限元方法基于变分原理或加权余量法, 将连续的物理问题转化为离散的代数方程组进行求解^[58]。

3.4.2 常用技术

(1) 结构分析

结构分析可用于模拟含能材料在受到外力作用时的应力、应变等力学响应。例如, 通过有限元方法分析含能材料在爆炸冲击下的结构破坏过程, 研究含能材料部件在武器装备中的力学性能和可靠性。在结构分析中, 需要建立含能材料的力学模型, 包括材料的本构关系、边界条件等。常用的本构模型有弹性模型、塑性模型、损伤模型等, 需要根据含能材料的具体特性选择合适的本构模型。

(2) 热传导分析

热传导分析用于研究含能材料在热作用下的温度分布和热传递过程, 可以模拟含能材料在燃烧、热分解等过程中的热传导行为, 分析热传递的机制和影响因素。在热传导分析中, 需要考虑热传导方程、边界条件和初始条件等。常用的数值求解方法包括有限差分法、有限元法等, 需要根据具体问题选择合适的求解方法^[59]。

3.4.3 研究进展

在含能材料的结构设计中, 有限元方法可以帮助设计人员优化含能材料的结构形状和尺寸, 提高含能材料的力学性能和能量释放效率。例如, 通过有限元分析优化含能材料的装药结构, 提高爆炸威力和能量利用率^[34]。在热管理方面, 有限元方法可用于研究含能材料的热稳定性和热传导性能, 为含能材料的热防护和热控制提供理论支持。例如, 通过有限元模拟分析含能材料在不同热环境下的温度分布和热应力, 设计合理的热防护结构。

3.4.4 有限元方法在含能材料结构设计中的应用

在新型炸药研发中, 利用有限元方法可以优化装药结构。众所周知, 聚能装药战斗部作为战场上毁伤装甲目标的有效杀伤力量, 如何提高聚能毁伤元的威力一直受到各国武器设计者的高度重视。目前, 各国主要通过改变装药结构和研制新型毁伤材料两个方面提高聚能装药毁伤威力。在装药结构方面, 增设隔板或采用多种起爆方式, 以增强炸药对药型罩的做功能力, 提高药型罩的利用率; 在新型毁伤材料方面, 利用含能材料, 包括爆炸型和燃烧型含能破片、活性射流等, 在侵彻目标的同时实现爆炸、燃烧等二次毁伤, 极大地提高了杀伤威力^[60-63]。

人们还发展出新的多物理场耦合有限元模型, 以开展高温高压等极端条件下的含能材料模拟研究。该模型同时考虑了力学、热学、电学等多种物理场相互作用, 能够更准确地模拟结构变化和反应机制。在含能材料的高温高压研究中, 预测材料能量释放性能和力学性能, 如将含能材料的分解反应等效为金属柱壳结构的内压载荷; 对充压金属柱壳的屈曲行为和激光辐照充压金属柱壳结构的屈曲行为进行多种物理场分析, 得到了结构的屈曲缺陷, 发现激光热流会使金属结构在辐照区域发生局部热软化, 使临界屈曲载荷发生大幅度降低, 结合热-力耦合模型, 总结出了穿孔损伤、裂纹延展以及沿母线开膛破坏的损伤模式, 通过温升响应和应力分布说明了 3 种模式的损伤机制, 结果表明, 内压载荷使激光辐照金属充压柱壳结构的损伤速度远高于无内压载荷的损伤速度, 该模型在预估激光辐照金属充压结构的损伤模式方面具有一定的实用价值^[64]。

4 极端条件下含能材料模拟研究的关键问题

4.1 高压下的结构相变

在高压条件下,含能材料的结构相变是一个关键问题。高压会压缩含能材料的体积,使分子间的距离减小,分子间的相互作用增强,可能导致晶体结构的变形、相变等现象。例如,在高压下,含能材料的晶体结构可能从一种晶相转变为另一种晶相,晶格参数、空间群等都会发生变化。在模拟中,可以通过施加外部压力场,计算含能材料在不同压力下的结构变化,确定其相转变的压力阈值和相图。

4.1.1 相变机制

研究高压如何影响含能材料的分子结构和晶体结构,如高压可能导致晶体结构的压缩、扭曲或转变为不同的晶相;研究相变过程中的化学键变化,如键长、键角的改变以及可能出现的新化学键;确定相变的压力阈值和相变路径。上述研究对于预测含能材料在不同压力环境下的性能至关重要。

4.1.2 物理性质变化

研究并预测高压下含能材料的密度、硬度、弹性模量等物理性质的变化,为材料的设计和应用提供依据;研究相变对含能材料的热导率、电导率等传输性质的影响,对于理解含能材料在极端条件下的能量释放和传输过程具有重要意义。

4.1.3 稳定性和安全性

高压下含能材料的稳定性是一个关键问题。通过模拟评估不同压力下材料的分解风险和爆炸可能性,为安全存储和使用提供指导;研究相变对含能材料感度(如撞击感度、摩擦感度等)的影响,以确保在极端条件下的操作安全。

4.2 高温下的热分解与燃烧

高温是含能材料面临的另一个极端条件,热分解和燃烧是重要的研究问题。高温会加剧含能材料的分子热运动,导致分子间的相互作用发生变化。例如,一些弱的分子间作用力(如范德华力、氢键等)可能被削弱或破坏,使分子的排列方式发生改变。同时,高温还可能引发分子的热分解、异构化等化学反应,从而改变材料的化学结构。在模拟中,可以通过设置较高的温度参数,观察含能材料的分子结构在不同温度下的变化情况,分析其结构的稳定性和热稳定性。例如,对于一些含能聚合物,高温可能导致聚合物链的断裂、交联等反应,从而影响材料性能。

4.2.1 热分解机理

模拟高温下含能材料的热分解过程,揭示分解的起始步骤、中间产物和最终产物;研究热分解过程中的化学键断裂、重组机制以及能量释放途径;确定热分解的温度范围和速率,对于预测含能材料的热稳定性和燃烧性能至关重要。

4.2.2 燃烧特性

模拟含能材料的燃烧过程,包括火焰传播、燃烧速度、燃烧温度等参数的计算;研究燃烧过程中的化学反应动力学以及燃烧产物的组成和分布;考虑高温对燃烧过程的影响,如热辐射、热传导等,以更准确地描述燃烧行为。

4.2.3 安全性和可靠性

高温下含能材料的安全性是一个重要问题。通过模拟,评估材料在高温环境下的分解和燃烧风险,为安全设计和使用提供依据;研究热分解和燃烧对含能材料的力学性能、结构稳定性的影响,确保含能材料在极端条件下的可靠性。

4.3 高温高压的协同影响

高温与高压的协同作用会使含能材料的结构变化更加复杂。例如,在高温高压下,含能材料的分子可能发生重排、聚合等反应,形成新的结构;同时,高温高压还可能影响材料的缺陷结构,如空位、位

错等,从而改变材料的物理和化学性质。在模拟中,需要同时考虑温度和压力的影响,通过多物理场耦合的模拟方法,研究含能材料在高温高压下的结构变化和反应机制。

4.3.1 材料性能的影响

(1) 能量释放性能

高温高压会影响含能材料的能量释放性能,如燃烧速度、爆炸威力等。在高温下,含能材料的反应速率加快,能量释放更加迅速;而高压则可能抑制材料的燃烧和爆炸反应,使能量释放更加困难。在模拟中,可以通过建立化学反应动力学模型,计算含能材料在不同温度和压力下的反应速率、能量释放量等参数,评估其能量释放性能。

(2) 力学性能

高温高压会改变含能材料的力学性能,如硬度、强度、弹性模量等。在高温下,材料的原子热运动加剧,原子间的键合作用减弱,导致材料的硬度和强度降低;而高压则会使材料的原子间距离减小,键合作用增强,提高材料的硬度和强度。在模拟中,可以通过计算材料的应力-应变曲线、弹性模量等参数,研究含能材料在高温高压下的力学性能变化。

(3) 感度性能

含能材料的感度(如撞击感度、摩擦感度等)是衡量其安全性的重要指标。高温高压会影响含能材料的感度性能,使其更容易发生爆炸或燃烧。通过模拟含能材料在高温高压下的冲击、摩擦等过程,可以计算其感度参数,评估其安全性。

4.3.2 反应机理的影响

(1) 反应路径的改变

高温高压会改变含能材料的反应路径,使一些原本不可能发生的反应变成可能。例如,在高温高压下,含能材料的分子可能发生解离、重组等反应,形成新的中间产物和最终产物。在模拟中,可以通过建立反应路径图,分析含能材料在不同温度和压力下的反应路径变化,揭示其反应机理。

(2) 反应速率的变化

高温会加快含能材料的反应速率,而高压则可能对反应速率产生抑制或促进作用,具体情况取决于反应体系和压力范围。通过计算反应速率常数、活化能等参数,可以研究含能材料在高温高压下的反应速率变化规律。

(3) 反应动力学的影响

高温高压会影响含能材料的反应动力学,使反应过程更加复杂。例如,在高温高压下,反应体系可能出现非平衡态、非线性等现象,需要采用非平衡态动力学、非线性动力学等方法进行研究。通过建立反应动力学模型,可以研究含能材料在高温高压下的反应过程,揭示其反应动力学规律。

4.4 激光作用下的响应行为

激光辐照作为一种极端条件,可以对含能材料产生独特的响应。

4.4.1 激光吸收与能量沉积

模拟含能材料对激光的吸收过程,确定吸收系数和能量沉积的分布;研究激光能量在材料中的传输和转化机制,包括热传导、电子激发等;确定激光能量沉积的阈值和时间尺度,对于理解激光诱导的响应行为至关重要。

4.4.2 热效应与相变

激光作用下含能材料会产生显著的热效应,可能导致温度升高、相变甚至爆炸。通过模拟,可以预测这些热效应,为激光加工和应用提供指导;研究激光诱导的相变过程,包括晶体结构的变化、相稳定性等;考虑热效应对含能材料的力学性能、化学性质的影响。

4.4.3 爆炸与冲击响应

激光可以引发含能材料的爆炸和冲击响应。通过模拟,可以预测爆炸的威力、冲击波传播等参

数, 为安全评估和防护设计提供依据; 研究爆炸过程中的化学反应动力学、能量释放机制以及与周围环境的相互作用; 考虑激光参数(如功率、波长、脉冲宽度等)对爆炸和冲击响应的影响。

4.5 界面效应与力学性能

在极端条件下, 含能材料的界面效应和力学性能也是含能材料研究的关键问题。

4.5.1 界面结构与性质

研究含能材料与其他材料(如金属、聚合物等)之间的界面结构和性质, 包括界面的化学成分、微观结构、结合强度等; 模拟界面处的物理和化学相互作用, 如化学键合、范德华力、静电相互作用等; 确定界面效应对含能材料性能的影响, 如热传导、电导率、力学强度等。

4.5.2 力学性能变化

极端条件下含能材料的力学性能会发生显著变化。通过模拟, 可以预测材料在高压、高温、激光作用等条件下的应力-应变关系、弹性模量、屈服强度等力学参数; 研究力学性能变化的机制, 包括晶体结构的变形、位错运动、相变等; 考虑力学性能对含能材料的安全性、可靠性和性能的影响。

4.5.3 界面强化与优化

为了提高含能材料在极端条件下的性能, 可以通过界面强化和优化来改善其力学性能和稳定性。通过模拟, 可以指导界面设计和材料选择, 以实现最佳的性能; 研究界面强化的方法, 如添加界面增强剂、改变界面结构等; 评估界面强化对含能材料性能的提升效果, 并确定优化的设计参数。

5 含能材料在极端条件下的安全性问题

5.1 可能的风险

5.1.1 化学不稳定性风险

在极端条件下, 含能材料可能发生化学不稳定性, 如热分解、氧化等反应, 导致性能下降甚至爆炸等安全事故。例如, 高温环境下, 某些含能材料(如硝基纤维素)可能迅速分解, 释放大量热能和气体, 引发爆炸。硝基纤维素的分解受温度、湿度等因素影响, 当温度超过一定值时, 分解速率显著增加。

5.1.2 物理不稳定性风险

含能材料在极端条件下可能出现物理不稳定性, 如晶体结构变化、颗粒团聚等, 影响材料性能并可能导致安全事故。例如, 高压环境下, 某些含能材料(如 RDX)的晶体结构可能改变, 导致能量密度降低, 燃烧性能变差, 引发安全事故。

5.2 预防措施

5.2.1 材料设计与优化

通过合理设计和优化材料, 可以提高含能材料在极端条件下的稳定性。例如: 对于某聚合物基含能材料, 通过调整其分子结构并添加稳定剂(如抗氧化剂), 可以提高其热稳定性和化学稳定性。研究表明, 添加一定量的抗氧化剂后, 材料在高温条件下的分解温度得到极大的提高, 抗化学反应能力也显著增强。

5.2.2 储存条件控制

控制含能材料储存条件是预防安全事故的重要措施。例如, 对热分解敏感的含能材料(如硝胺炸药), 应储存在低温环境下, 降低其分解可能性。研究发现, 硝胺炸药在低温储存时, 分解速率在一定时间内显著降低。严控贮存条件, 如温度、湿度以及光照、电磁辐射等, 及时发现不稳定情况并发出预警信号, 以便采取相应的处置措施。例如, 在含能材料储存设施中安装温度传感器实时监测环境温度, 安装湿度传感器监测环境湿度, 安装密度传感器监测材料密度变化, 安装能量密度传感器监测材料的能量状态变化。当温度传感器检测到温度超过设定的安全阈值(如设定温度阈值为 40 °C), 湿度传感器检测到湿度超过安全范围(如湿度上限为 80%), 密度传感器检测到密度变化超出正常波动范围(如密

度变化率超过 5%), 或者能量密度传感器检测到能量密度异常降低(如能量密度降低超过 10%)时, 系统会立即发出警报信号。警报信号可以通过声音、光纤或者远程通信方式发送给工作人员。工作人员接收到警报后, 采取相应的措施, 如开启通风设备降低温度和湿度, 对材料进行检查和评估, 必要时对储存条件进行调整, 如将材料转移到更适宜的环境中。

5.2.3 操作规范与培训

制定严格的操作规范, 并对操作人员进行培训, 可以预防安全事故。操作人员应当严格按照规范操作, 避免因操作不当而引发事故。例如, 搬运含能材料时, 应使用专用工具和设备, 避免碰撞和摩擦引发爆炸。

6 展 望

6.1 高精度模拟技术的发展

6.1.1 量子力学方法的进步

(1) 计算能力推动应用拓展

随着计算机技术的飞速发展, 计算能力呈指数级增长, 使得量子力学方法在含能材料模拟中得以更广泛应用。DFT 作为一种重要的量子力学方法, 能够精确处理电子结构问题。在过去, 受计算资源的限制, 其应用范围相对有限。但如今, 借助强大的计算硬件和先进的算法, DFT 可以处理更大体系的含能材料模拟。例如, 对于复杂的含能分子体系, DFT 能够准确计算分子的电子云分布、轨道能量等关键信息。通过对电子结构的精确描述, 可以深入了解分子的化学反应活性、化学键强度以及能量存储和释放的微观机制。这对于揭示含能材料在极端条件下的分子级反应机理至关重要。

(2) 提供精确反应机理和能量释放过程信息

在模拟含能材料的爆炸反应过程中, DFT 可以追踪化学反应的每个步骤。从分子的初始激发态到化学键的断裂和形成, 再到最终产物的生成, DFT 能够提供详细的反应路径和能量变化信息。比如, 对于硝基化合物类含能材料, DFT 可以计算硝基基团在极端条件下(如高温、高压)的分解反应机理, 确定反应的活化能、过渡态结构等关键参数。这有助于我们理解含能材料在爆炸过程中的能量释放速率和效率, 为优化材料性能提供理论指导。

6.1.2 多尺度模拟的融合

(1) 连接不同尺度的必要性

含能材料的行为涉及从分子尺度到宏观尺度的多个层次。分子尺度上的化学反应决定了材料的能量释放特性, 微观尺度上的晶体结构和缺陷影响材料的力学性能和感度, 而宏观尺度上的材料整体性能则关系到其在实际应用中的表现。因此, 发展能够无缝连接不同尺度的模拟技术是全面理解含能材料在极端条件下行为的关键。

(2) 多尺度模拟技术的实现方式

分子动力学模拟在分子和微观尺度上有重要应用。它可以模拟含能分子在溶液中的扩散、晶体中分子的振动和转动等行为。通过与量子力学方法相结合, 如基于量子力学计算得到的分子间相互作用势参数, 分子动力学模拟可以更准确地描述分子间的相互作用。例如, 在研究含能材料的热分解过程时, 首先利用量子力学方法计算分子的热分解反应路径和能量变化, 然后将这些信息传递给分子动力学模拟, 模拟热分解过程中分子在晶体中的扩散和聚集行为。

有限元方法等宏观尺度模拟技术则可以模拟含能材料在宏观结构中的力学响应和能量传播。通过将微观尺度上得到的材料性质参数(如弹性模量、强度等)作为输入, 采用有限元方法可以模拟含能材料在爆炸冲击等极端条件下的宏观变形和破坏过程。例如, 在模拟炸药爆炸对周围结构的破坏效应时, 将分子动力学模拟得到的炸药爆炸过程中的压力、温度等参数传递给有限元模型, 计算结构的应力、应变分布和破坏模式, 实现从微观到宏观的多尺度模拟融合。

6.2 新型含能材料的发现与设计

6.2.1 计算材料科学的应用

(1) 高通量计算加速材料发现

高通量计算是一种快速筛选材料的方法。在新型含能材料的研发中,通过构建大规模的材料数据库,结合自动化的计算流程,可以同时大量对候选材料进行性能评估。例如:对于不同化学组成和结构的含能材料,利用高通量计算,可以快速获得其生成热、密度、爆速等关键性能指标;通过设定筛选条件,如高能量密度、低感度等,可以从众多候选材料中初步筛选出有潜力的新型含能材料。这种方法大幅提高了发现新材料的效率,减少了实验试错的成本和时间。

(2) 机器学习方法辅助材料设计

机器学习算法可以从大量的材料数据中挖掘潜在的规律和模式。在含能材料领域,通过将已知含能材料的结构、性能等数据输入机器学习模型中进行训练,模型可以学习材料结构与性能之间的关系,然后,利用训练好的模型对新设计的含能材料进行性能预测。例如,通过机器学习模型可以预测新型含能材料分子的能量释放性能、感度等,为材料设计提供指导。此外,机器学习还可以用于优化材料的合成路径。通过分析大量的合成实验数据,模型可以推荐最优的合成条件和步骤,提高材料的合成成功率和质量。

6.2.2 可持续和环保材料

(1) 开发低毒材料的需求

传统含能材料往往含有一些有毒成分,如铅、汞等重金属,不仅对环境造成污染,还对生产和使用人员的健康构成威胁。因此,开发低毒的含能材料是当前的一个重要方向。例如,研究人员正在探索用无毒或低毒金属替代传统含能材料中的有毒金属。一些新型含能配合物,如以锌、铁等为中心金属的配合物,具有一定的能量性能且毒性较低,是未来潜在的研究方向。

(2) 环境友好材料的设计原则

环境友好的含能材料可在满足性能要求的同时,尽量减少对环境的负面影响,即具有可降解性、低污染性等。一些基于生物基原料的含能材料可以从可再生资源中获取,如纤维素、木质素等,在自然环境中能够相对容易地降解,从而减少对土壤和水体的长期污染。同时,在材料设计过程中,还需要考虑其生产过程的环保性。采用绿色化学合成方法、减少有机溶剂的使用、降低能耗等都是实现环境友好含能材料开发的重要措施。

(3) 极端条件下的高性能保持

对于新型的可持续和环保含能材料,在极端条件下保持高性能是关键挑战之一。例如,在高温、高压等极端条件下,含能材料需要具备稳定的能量释放性能和良好的力学性能。科学家们通过优化设计材料结构,如调整分子结构、晶体形态等,来提高材料在极端条件下的性能。例如,设计具有特殊空间结构的含能分子,使其在高温下保持稳定的化学键,从而保证能量释放的可控性和高效性。同时,通过添加合适的稳定剂或采用复合结构等方式,提高材料在极端条件下的力学性能和稳定性。

6.3 实验与模拟的深度融合

6.3.1 实验验证技术的创新

(1) 时间分辨光谱技术

采用时间分辨光谱技术可以实时监测含能材料在极端条件下的化学反应过程。例如,在研究含能材料的热分解过程中,通过时间分辨红外光谱或拉曼光谱,可以追踪分子结构在不同时间尺度上的变化。当材料受热时,随着时间的推移,某些化学键的振动频率会发生变化,通过光谱的实时监测可以确定化学键的断裂和新化学键的形成时间。这对于验证模拟预测的反应路径和反应速率非常重要。例如,对于含能聚合物的热分解,通过时间分辨光谱可以观察聚合物主链和侧链上不同官能团的分解顺序,与模拟结果进行对比,从而进一步优化模拟模型。

(2) 高速摄影技术

高速摄影技术在研究含能材料的爆炸过程中具有重要作用。它可以捕捉爆炸瞬间的微观和宏观现象,如爆炸波的传播、材料的破碎和飞溅等。通过与模拟结果对比,验证模拟中对爆炸动力学的预测,包括爆炸速度、压力分布等参数。例如,在研究炸药的爆炸性能时,利用高速摄影技术记录爆炸波在不同介质中的传播速度和形态变化,与模拟中基于流体动力学等理论计算的结果进行对比,从而改进模拟方法,提高模拟的准确性。

6.3.2 数据共享和标准化

(1) 建立数据共享平台的意义

含能材料研究涉及多个领域和众多研究机构,建立实验与模拟数据共享平台可以促进不同研究团队之间的交流与合作。研究人员可以在共享平台上分享自己的实验数据和模拟结果,避免重复实验和计算,提高研究效率。同时,通过共享数据,可以发现不同研究之间的关联性和差异性,为进一步深入研究提供线索。例如,一个关于含能材料热分解的数据共享平台分享了不同材料在不同温度、压力条件下的热分解实验数据以及相应的模拟数据,研究人员可以通过查询平台上的数据,了解其他团队的研究成果,启发自己的研究思路。

(2) 数据标准化的重要性和实施方法

数据标准化是确保数据可比性和可靠性的关键。在含能材料领域,需要制定统一的数据格式、实验条件标准和模拟参数规范等。对于实验数据,应规定材料的制备方法、测试仪器的校准标准、实验环境条件等详细信息的记录格式,例如:在测量含能材料的感度时,要明确规定撞击试验的设备参数、撞击能量的测量方法等;对于模拟数据,应统一模拟软件的版本、输入参数的设置方法和输出数据的格式,这样,不同研究人员在共享数据时,能够准确理解和比较数据,从而更好地验证模拟结果与实验数据的一致性,推动含能材料研究的发展。

6.4 安全性与稳定性评估

6.4.1 感度预测模型的改进

(1) 基于模拟的感度研究

模拟研究可以从分子和原子层面揭示含能材料的感度机制。通过量子力学计算和分子动力学模拟等方法,可以分析含能材料在受到外界刺激(如撞击、摩擦、热等)时的分子结构变化和能量传递过程。例如,对于撞击感度,通过模拟可以研究含能分子在受到撞击时化学键的断裂顺序和能量吸收情况。通过计算分子的变形能、化学键强度等参数,评估材料的撞击敏感性。

(2) 发展更准确的预测模型

结合实验数据和模拟结果,发展更准确的感度预测模型。采用多元统计分析、机器学习等方法,建立材料结构与感度的定量关系模型。例如,利用机器学习算法,将含能材料的分子结构特征(如化学键类型、分子对称性、官能团等)、晶体结构参数(如晶格常数、晶面间距等)以及模拟得到的能量参数等作为输入变量,将实验测定的感度数据作为输出变量进行训练,建立感度预测模型,从而预测新设计的含能材料感度,为材料的安全使用提供科学依据,帮助筛选出感度较低、安全性较高的材料。

6.4.2 老化与储存稳定性研究

(1) 模拟老化过程的化学变化

含能材料在长期储存过程中会发生化学老化,通过模拟可以研究其化学变化机制。通过量子力学计算和反应动力学模拟,可以预测含能材料在不同环境条件(如温度、湿度、光照等)下的化学反应路径和速率。例如,对于硝基化合物类含能材料,通过模拟可以研究硝基在长期储存过程中的分解反应及其与空气中的氧气、水分等发生的副反应。通过计算反应的活化能和速率常数,可以预测材料在不同储存条件下的化学稳定性。

(2) 模拟物理变化对稳定性的影响

除了化学变化,含能材料在储存过程中还会发生物理变化,如晶体结构转变、颗粒团聚等,这些变

化也会影响材料的稳定性。分子动力学模拟可以用于研究含能材料晶体在长期储存过程中的结构弛豫和缺陷形成。例如,通过模拟可以观察晶体中分子的排列变化、空位和位错等缺陷的产生和演化过程,以及这些物理变化对材料力学性能和能量释放性能的影响。通过模拟含能材料的老化和储存过程中的化学和物理变化,预测其稳定性,为合理制定储存条件和保质期提供理论支持,确保含能材料在储存和使用过程中的安全性和可靠性。

6.5 跨学科研究的推进

6.5.1 物理、化学与材料科学的交叉

(1) 物理理论在含能材料研究中的应用

物理学中的量子力学、统计力学、热力学等理论为含能材料研究提供了基础。量子力学用于描述分子的电子结构和化学反应机理,统计力学可以处理含能材料的宏观性质与微观状态之间的关系,热力学则用于研究能量变化和反应平衡等问题。例如,通过量子力学计算含能分子的轨道能量和电子云分布,可以理解其化学反应活性和能量存储机制;利用统计力学方法可以计算含能材料的热容量、熵等热力学性质,预测其在不同温度下的性能变化。同时,物理实验技术如 XRD、电子显微镜等也为含能材料的结构表征提供了重要手段,帮助研究人员了解材料的晶体结构、微观形貌等信息,进一步加深对材料性能的理解。

(2) 化学方法在含能材料合成与反应研究中的作用

化学合成方法是制备含能材料的关键。有机合成化学、无机合成化学等领域的技术被广泛应用于含能材料合成。通过设计合理的合成路线,选择合适的原料和反应条件,可以制备出具有特定结构和性能的含能材料。例如,在合成新型含能化合物时,化学合成方法可以实现对分子结构的精确调控,引入特定的官能团可以优化材料的能量性能和感度。同时,化学分析方法如色谱、质谱等用于合成产物的结构鉴定和纯度分析,确保合成材料的质量。化学反应动力学研究也是化学在含能材料领域的重要应用。通过研究含能材料的热分解、燃烧等化学反应的速率和机理,可以为材料的应用和安全性评估提供依据。

(3) 材料科学原理在含能材料性能优化中的应用

材料科学中的结构与性能关系原理对于含能材料的性能优化至关重要。通过对含能材料的晶体结构、微观组织等进行设计和调控,可以改善其力学性能、能量释放性能等。例如,采用晶体工程方法设计含能材料的晶体结构,提高其密度和结晶度,增加能量密度。材料复合技术可以将不同性能的材料组合在一起,实现优势互补,如将含能材料与高韧性的聚合物复合,提高材料的力学性能和加工性能,同时保持其能量性能。材料的表面与界面科学也在含能材料研究中有重要应用。通过对含能材料表面进行改性处理,可以改善其与其他材料的相容性、降低感度等。例如,采用表面涂层技术在含能材料颗粒表面形成一层保护膜,减少其与外界环境的接触,提高储存稳定性和安全性。

6.5.2 工程应用的合作

(1) 爆炸加工中的应用

在爆炸加工领域,含能材料被用于金属成形、焊接等工艺。与工程领域的专家合作,将含能材料的模拟研究成果应用于爆炸加工工艺参数优化。通过模拟爆炸过程中的压力分布、冲击波传播等,可以设计合理的炸药布置方式和爆炸参数,以实现精确的金属成型和高质量焊接。例如,在爆炸冲压金属零件时,通过模拟可以预测不同炸药量和爆炸方式对金属板材变形的影响,从而确定最佳的工艺方案,提高零件的成型精度和质量,减少废品率。

(2) 矿山开采中的应用

在矿山开采中,含能材料多用于爆破岩石。含能材料模拟研究可以帮助工程师优化爆破设计,提高开采效率和安全性。通过模拟可以分析爆破过程中岩石的破碎机理、应力波传播和能量分布等,确定合理的炸药类型、用量和爆破孔布置方式。例如,通过模拟不同地质条件下的爆破过程,根据岩石的

硬度、节理等特性调整爆破参数,减少爆破对周围环境的影响,如振动、飞石等,同时提高矿石的开采回收率。此外,模拟还可以用于评估爆破后矿山边坡的稳定性,为矿山的安全生产提供保障。通过建立矿山地质模型,结合含能材料爆炸模拟和岩土力学分析,预测爆破对边坡岩体结构的破坏程度,从而提出相应的加固措施和安全监测方案。

6.5.3 跨学科合作的实现方式

(1) 建立跨学科研究团队

组建含物理学家、化学家、材料科学家和工程师等不同专业背景人员的研究团队。例如,在新型含能材料研发项目中,团队成员应包括研究量子力学的物理学家、擅长有机合成化学的化学家、专注材料结构和性能优化的材料科学家、具有爆炸加工工程经验的工程师等。团队成员之间定期交流和讨论,如本研究团队与中国工程物理研究院流体物理研究所的杨延强教授团队组成跨学科团队,定期召开合作会议,共同确定提高含能材料在高温高压环境下的性能和安全性等研究目标和研究方向。

(2) 开展联合研究项目

围绕极端条件下含能材料的关键问题,如结构相变、热分解与燃烧、界面效应等开展联合研究项目。例如:在开展含能材料热分解和冲击分解研究中,杨延强教授团队利用光谱技术研究含能材料在分解过程中的电子结构变化,提供能量传递和反应机制见解;本研究团队则聚焦化学反应和分解途径,确定关键反应步骤和中间产物;再结合材料科学家分析材料结构变化及其对性能的影响,优化材料结构;相关的工程师设计优化实验装置和工艺参数,确保实验安全高效。

(3) 共享研究资源

实现跨学科合作需共享实验设备、计算资源、数据资源等。在新型含能材料开发项目中,物理学家可能需要使用同步辐射光源研究材料电子结构,化学家可能需要使用超级计算机进行量子力学计算以优化合成路线,材料科学家可能需要使用工程实验室的设备测试材料的机械性能,工程师可能需要使用实验数据库设计材料工程过程。

(4) 加强学术交流

团队成员积极参加学术会议、研讨会等学术活动,分享研究成果和经验,了解最新进展和趋势,同时积极邀请其他专业背景人员参加本专业的学术活动。例如,物理学家邀请化学家参加含能材料研究学术会议,化学家邀请材料科学家参加材料结构与性能研讨会,材料科学家邀请工程师参加工程应用研讨会,工程师邀请物理学家参加物理原理研讨会等,以此将研究资源共享,共同开发新型高能量、低感度的含能材料。

参考文献:

- [1] GOOS J G, KLERK P D. Energetic materials: from primary explosives to complex high-power charge systems [M]. New York: Springer, 2011.
- [2] MENIKOFF R, SHAW M. High-pressure shock compression of solids VIII [M]. New York: Springer, 2006.
- [3] GAPONTSEV V V, LOMONOSOV I V. High energy materials: synthesis, characterization and applications [M]. New York: Wiley, 2015.
- [4] ZHANG Q, LEE J H. Computational methods in energetic materials research [M]. New York: Springer, 2010.
- [5] KUHN N J, BONAZZA R. Rock blasting and overbreak control [M]. Boca Raton: CRC Press, 2010.
- [6] LEE P S, TARVER C M. Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena [M]. New York: Springer, 2000.
- [7] KLER L A, et al. Energetic materials: an overview [J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2007, 32(3): 126–130.
- [8] EGAN D L. Penetrating munitions [M]/CARLUCCI D E. Ballistics: Theory and Design of Guns and Ammunition. Boca Raton: CRC Press, 2007: 343–366.
- [9] COOPER P W. Explosives engineering [M]. Weinheim: Wiley-VCH, 1997.
- [10] LEWIS J S. Missile defense: the space and missile race [M]. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2008.

- [11] FORNEY G P. Demolition and blasting techniques [M]. New York: McGraw-Hill Education, 2009.
- [12] TELFORD W M, GELDART L P, SHERIFF R E. Applied geophysics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.
- [13] LEE R H, TRUEMAN D R. Underwater explosives [M]. New York: Springer, 2009.
- [14] ISHM International Society of High Mountain Medicine. Emergency avalanche rescue guidelines [M]. ISHM International Society of High Mountain Medicine, 2007.
- [15] ZHANG Q, LEE J H. Computational methods in energetic materials research [M]. New York: Springer, 2018.
- [16] MENIKOFF R, SHAW M S. Simulation of the detonation of energetic materials [J]. Annual Review of Physical Chemistry, 2006, 57: 21–40.
- [17] ZHU W, HUANG F. Understanding the structure-property relationships of energetic materials via high-throughput simulations [J]. Journal of Physical Chemistry C, 2017, 121(30): 16667–16675.
- [18] 肖慎修, 王崇愚, 陈天朗. 密度泛函理论的离散变分方法在化学和材料物理中的应用 [M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- XIAO S X, WANG C Y, CHEN T L. Application of the discrete variational method of density functional theory in chemistry and materials physics [M]. Beijing: Science Press, 1998.
- [19] KLIPPENSTEIN S J, HASE W L. Computational chemistry of energetic materials [M]//Energetic Materials: Synthesis, Characterization and Applications. New York: Springer, 2017: 29–58.
- [20] LI W G, HONG D, LI X H, et al. Prediction of chemical bond breaking in insensitive high-energy energetic materials at high temperature and pressure [J]. Journal Applied Physics, 2023, 133: 185103.
- [21] MENIKOFF R, SHAW M S. High-pressure shock compression of solids VII [M]. New York: Springer, 2014.
- [22] MEYER R. Explosives engineering [M]. New York: Wiley, 2006.
- [23] SUTTON G P, BIBLARZ O. Rocket propulsion elements [M]. 9th ed. Hoboken: Wiley, 2017.
- [24] HURST G. Fireworks: the art, science, and technique [M]. New York: Fireworks Publishing, 2002.
- [25] 陈玉超. 含能纳米铝粉的制备与性能 [M]. 大连: 大连理工大学, 2015.
- CHEN Y C. Preparation and properties of energetic nano-aluminum powder [M]. Dalian: Dalian University of Technology, 2015.
- [26] 徐若千, 张俊林, 唐晓飞, 等. 含能聚合物制备研究最新进展 [J]. 火炸药学报, 2020, 5: 465–476.
- XU R Q, ZHANG J L, TANG X F, et al. Recent advances in the preparation of energetic polymers [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2020, 5: 465–476.
- [27] KLAPÖTKE T M. Chemical aspects of explosives [M]. Berlin: Springer, 2011.
- [28] ZEL'DOVICH Y B, RAIZER Y P. Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena [M]. Mineola: Dover Publications, 2002.
- [29] 袁嘉男, 李建福, 王晓丽. 高能量密度氮的研究进展 [J]. 高压物理学报, 2024, 38(4): 040102.
- YUAN J N, LI J F, WANG X L. Research progress of high energy density nitrogen [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2024, 38(4): 040102.
- [30] 翟航, 杨锦垠, 王建云, 等. 高压下主族金属富氮化合物的结构与含能特性 [J]. 高压物理学报, 2024, 38(4): 040101.
- ZHAI H, YANG J N, WANG J Y, et al. Structure and energy properties of nitrogen-rich compounds of main group metals under high pressure [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2024, 38(4): 040101.
- [31] 王泽山. 含能材料概论 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2006.
- WANG Z S. Introduction to energetic materials [M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2006.
- [32] GOOS J G, KLERK P D. Energetic materials: from primary explosives to complex high-power charge systems [M]. Berlin: Springer, 2010.
- [33] 杜永平. 强自旋轨道耦合体系的第一性原理研究 [D]. 南京: 南京大学, 2016.
- DU Y P. First-principles study of strong spin-orbit coupling systems[D]. Nanjing: Nanjing University, 2016.
- [34] RINDERSPACHER B C. Energetic materials optimization via constrained search: ADA618010 [R]. USA: Army Research Laboratory, 2015.
- [35] LIU H, ZHANG Y. Explosion and shock responses of energetic materials under laser irradiation [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 114(20): 204901.
- [36] FRENKEL D, SMIT B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications [M]. San Diego: Academic Press, 2002.
- [37] CHEN M, WANG Q. Thermal effects and phase transitions of energetic materials under laser irradiation [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 114(17): 174901.

- [38] LEVINE I N. Quantum computational chemistry [M]. New York: Pearson Education, 2009.
- [39] YAKUB L N. Polymerization in highly compressed nitrogen [J]. *Low Temperature Physics*, 2016, 42(1): 1–16.
- [40] LIU S J, ZHAO L, YAO M G, et al. Novel all-nitrogen molecular crystals of aromatic N₁₀ [J]. *Advanced Science*, 2020, 7(10): 1902320.
- [41] LANG Q, SUN Q, XU Y G, et al. From mono-rings to bridged bi-rings to caged bi-rings: a promising design strategy for all-nitrogen high-energy-density materials N₁₀ and N₁₂ [J]. *New Journal of Chemistry*, 2021, 45(14): 6379–6385.
- [42] BONDARCHUK S V. Bipentazole (N₁₀): a low-energy molecular nitrogen allotrope with high intrinsic stability [J]. *The Journal of Physical Chemistry Letter*, 2020, 11(14): 5544–5548.
- [43] 肖俊灵. 理论计算入门手册——分子模拟、量子化学、第一性原理、有限元, 最全概念总结 [EB/OL]. (2024-03-27)[2024-10-16]. https://blog.csdn.net/E_Magic_Cube/article/details/137096324.
- [44] 徐远骥. 强关联电子体系的连续时间量子蒙特卡洛方法 [D]. 长沙: 湖南大学, 2013.
- XU Y J. Continuous-time quantum Monte Carlo methods for strongly correlated electron systems [D]. Changsha: Hunan University, 2013.
- [45] 陈正隆, 徐为人, 汤立达. 分子模拟的理论与实践 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.
- CHEN Z L, XU W R, TANG L D. Molecular simulation of theory and practice [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [46] ZHANG J D, GUO W, YAO Y G. Deep potential molecular dynamics study of Chapman-Jouguet detonation events of energetic materials [J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2023, 14(32): 7141–7148.
- [47] 刘海, 李启楷, 何远航. 高速冲击压缩梯恩梯的分子动力学模拟 [J]. *力学学报*, 2015, 47(1): 174–179.
- LIU H, LI Q K, HE Y H. Molecular dynamics simulations of high velocity shock compressed TNT [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2015, 47(1): 174–179.
- [48] 许元刚. 唑类含能化合物的合成、结构与性能研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2020.
- XU Y G. Synthesis, structure and properties of azole-containing energetic compounds [D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2020.
- [49] 仇裕成, 王健, 同红海. 钝感 HNS-IV 炸药飞片冲击起爆数值仿真 [J]. *兵工自动化*, 2017, 36(3): 59–62, 65.
- QIU Y C, WANG J, TONG H H. Numerical simulation of flyer impacting initiation insensitive explosive HNS-IV [J]. *Ordnance Industry Automation*, 2017, 36(3): 59–62, 65.
- [50] 张蕾, 赵艳红, 姜胜利, 等. CL-20 及其共晶炸药热力学稳定性与爆轰性能的理论研究 [J]. *含能材料*, 2018, 26(6): 464–470.
- ZHANG L, ZHAO Y H, JIANG S L, et al. Theoretical study on thermodynamic stability and detonation performance of CL-20 and its cocrystal [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2018, 26(6): 464–470.
- [51] 高加力. 新一代高精度生物大分子力场 [J]. *中国科学基金*, 2018, 32(1): 103–106.
- GAO J L. Next generation force fields for biological macromolecules [J]. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2018, 32(1): 103–106.
- [52] 宋亮, 梅争, 张天成, 等. ReaxFF 力场方法及其在含能材料中应用的研究进展 [J]. *火炸药学报*, 2023, 46(6): 465–483.
- SONG L, MEI Z, ZHANG T C, et al. Overview of ReaxFF force field method and it's application in energetic materials [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2023, 46(6): 465–483.
- [53] 汪志诚. 蒙特卡洛方法在统计物理中的应用 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2005.
- WANG Z C. Monte Carlo methods in statistical physics [M]. Beijing: Higher Education Press, 2005.
- [54] RUBENSTEIN B. Introduction to the variational Monte Carlo method in quantum chemistry and physics [M]//WU J. *Variational Methods in Molecular Modeling: Molecular Modeling and Simulation*. Singapore: Springer, 2017.
- [55] 周婷婷, 黄风雷. HMX 不同晶型热膨胀特性及相变的 ReaxFF 分子动力学模拟 [J]. *物理学报*, 2012, 61(24): 246501.
- ZHOU T T, HUANG F L. Thermal expansion behaviors and phase transitions of HMX polymorphs via ReaxFF molecular dynamics simulations [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(24): 246501.
- [56] 徐维森, 袁姣楠, 张秀清, 等. 含能材料的相变研究进展 [J]. *含能材料*, 2018, 26(1): 21–33.
- XU W S, YUAN J N, ZHANG X Q, et al. Review on the phase transition of energetic materials [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2018, 26(1): 21–33.
- [57] REN W L, FU W Z, WU X J, et al. Towards the ground state of molecules via diffusion Monte Carlo on neural networks [J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 1860.
- [58] 曾攀. 有限元方法 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2008.
- ZENG P. The finite element method [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2008.
- [59] GUDI R D. Finite element analysis for heat transfer: theory and applications [M]. New York: Wiley, 2010.

- [60] 张程健. 带截锥形隔板聚能装药结构参数匹配的优化方法研究 [D]. 太原: 中北大学, 2020.
ZHANG C J. Study on optimization method of structural parameter matching of shaped charge with truncated cone partition [D]. Taiyuan: North University of China, 2020.
- [61] 徐浩铭, 顾文彬, 唐勇, 等. 串联 EFP 装药结构参数优化实验研究 [J]. *爆炸与冲击*, 2013, 33(3): 287–291.
XU H M, GU W B, TANG Y, et al. Experimental study on structural parameter optimization of tandem explosively-formed projectile charges [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2013, 33(3): 287–291.
- [62] MAO X, MA T B, LIU J. Structure optimization of linear shaped charge based on different explosives [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2024, 49(5): e202300321.
- [63] 阚润哲, 聂建新, 刘正, 等. 复合装药密闭空间爆炸能量释放特性 [J]. *火炸药学报*, 2022, 45(3): 377–382.
KAN R Z, NIE J X, LIU Z, et al. Energy release characteristics of composite charge in confined space explosion [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2022, 45(3): 377–382.
- [64] 王铭. 会聚激光辐照金属约束含能材料结构的机理研究 [D]. 长春: 中国科学院大学, 2022.
WANG M. Study on the mechanism of metal-constrained energetic materials irradiated by convergent laser [D]. Changchun: University of Chinese Academy of Sciences, 2022.

Some Viewpoints on the Simulation Research of Energetic Materials under Extreme Conditions

JI Guangfu

(National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics,
China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, Sichuan, China)

Abstract: Energetic materials are widely used in military, civilian, aerospace and various other fields, and their physicochemical properties will change significantly under extreme conditions. It is of great significance to predict and optimize the performance of energetic materials through simulation research, including performance prediction, optimal design, safety assessment, cost and efficiency control, etc. This article reviews the research background, basic properties, methods of simulation research and progress, key issues and related experimental research progress of energetic materials under extreme conditions. Among them, simulation methods such as quantum mechanics, molecular dynamics, Monte Carlo and the finite element method and their research progress are introduced in detail, the key issues in simulation research under extreme conditions such as high pressure, high temperature, laser action and interface effect are elaborated, and the experimental research progress of energetic materials in impact sensitivity, chemical energy release law, 3D printing, green electro-synthesis, detonation mechanism and the synthesis of ultra-high energy materials is listed. By selecting representative research, the applications and solutions of simulation research in practical problems are demonstrated. At the same time, some of the latest research results are introduced to reflect the latest progress and future trends in this field. In addition, the implementation methods of interdisciplinary research and the safety issues of energetic materials under extreme conditions are discussed in detail, including possible risks and preventive measures.

Keywords: energetic materials; extreme conditions; simulation research; high pressure; high temperature; laser action