

文章编号:1006-9941(2025)09-0961-20

# 大科学装置在含能材料研究中的应用

黄 辉<sup>1</sup>,田均均<sup>2</sup>

(1. 中国工程物理研究院, 四川 绵阳 621999; 2. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621999)

**摘 要:** 含能材料的多尺度结构与刺激动态响应机制研究存在非均质特性及跨时空演化带来的实验诊断难题,制约了对其安全性和能量释放特性的深入科学认识。以中子源、同步辐射光源及大型激光为代表的大科学装置,凭借深穿透性、极端加载条件与高时空分辨能力,为解决这些问题提供了关键手段。综述了国内外大科学装置在含能材料的多尺度微结构、药柱残余应力、冲击加载物性、细观结构演化、爆轰反应特性等方面的研究进展,中子散射技术通过深穿透特性与轻元素灵敏性,实现了炸药内部微纳结构及残余应力的无损定量表征;高亮度X射线相衬成像和动态X射线衍射技术,以亚微米级分辨率揭示了冲击加载下缺陷动态演化过程,并原位捕捉了爆轰波阵面结构及纳米碳产物的动力学特征;强激光加载结合超快光谱技术,获取了炸药在高压下的Hugoniot数据和起爆反应机理。未来需开发多场耦合加载诊断平台,进一步提升装置时空分辨率,贯通多装置数据融合分析,为炸药动静态安全与反应特性认识、炸药结构设计与性能提升提供技术支撑。

**关键词:** 含能材料;中子源;大型激光装置;同步加速器辐射;高亮度X射线

**中图分类号:** TJ55;O64

**文献标志码:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2025138

## 0 引言

含能材料是武器装备实现远程投送和高效毁伤的做功能源,其性能直接关系到武器的效能与安全性。这类亚稳态物质涉及从分子、晶体到混合炸药及装药的多尺度复杂结构与非均质特性<sup>[1-3]</sup>,常规手段难以准确表征炸药微裂纹扩展、界面脱粘与残余应力等,缺乏多尺度微结构贯通分析技术<sup>[4]</sup>。含能材料的力-热-化耦合作用下的动态响应时间跨度大,涉及从皮秒级化学键断裂到小时级烤燃反应的跨时空尺度过程<sup>[5]</sup>,这种多尺度、非均质特性使得其冲击/非冲击起爆、热点形成、爆轰化学反应动力学等反应机理的研究极具挑战<sup>[6]</sup>。传统实验手段在时空分辨率、穿透深度及原位表征能力方面存在显著局限,难以直接观测微介观尺度的关键动态过程,导致理论模型缺乏充分的实验验证,制约了对其能量释放规律和安全性能的深入理解和精准预测。因此,亟需借助具有高时空分辨、极端条件加载和深穿透诊断能力的大科学装置来突破研究瓶颈。

以中子源、同步辐射光源和大型激光为代表的大科学装置,为解决上述挑战提供了基础研究平台。中子凭借其深穿透性、对轻元素(尤其是氢)的高灵敏性及非破坏性特点,适合解析含能材料残余应力分布、晶体结构演变、孔隙网络及多相界面特性<sup>[7]</sup>。同步辐射光源、大型激光产生的高亮度、高相干性的X射线(波长0.01~10 nm),形成先进成像(如X射线相衬成像XPCI)、衍射(如动态X射线衍射DXRD)等技术,能够实现对炸药内部裂纹、冲击压缩下物态相变、孔洞等缺陷动态演化、爆轰波阵面前沿和反应产物的高时空分辨原位观测;并集成大型激光提供的高压加载和超快光谱条件,为研究材料在极端动态载荷下的压缩响应及起爆化学反应路径提供了重要实验能力<sup>[8]</sup>。这些装置的主要优势是提供的极端环境、跨尺度透视诊断和高时空分辨能力,能够直接量化含能材料在真实或模拟服役条件下的微介观结构演化与物理化学响应。

本研究系统综述了近年来国内外利用上述大科学

收稿日期: 2025-06-23; 修回日期: 2025-08-23

网络出版日期: 2025-09-25

基金项目: 国家自然科学基金(12272359, 22275177)

作者简介: 黄辉(1961-),男,中国工程院院士,研究员,主要从事含能材料及安全弹药研究。e-mail: huanghui@caep.cn

通信联系人: 黄辉(1961-),男,中国工程院院士,研究员,主要从事含能材料及安全弹药研究。e-mail: huanghui@caep.cn

引用本文: 黄辉,田均均. 大科学装置在含能材料研究中的应用[J]. 含能材料, 2025, 33(9): 961-980.

HUANG Hui, TIAN Jun-jun. Application of Large Scientific Devices in the Research of Energetic Materials[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2025, 33(9): 961-980.

装置在含能材料关键科学问题研究方面取得的重要进展。重点涵盖以下几方面内容:(1) 多尺度微结构研究:利用中子散射(SANS/USANS)和衍射(ND)表征炸药晶体结构、粉末孔隙率/表面特征、单质炸药压制体的微观结构演化以及聚合物粘结炸药(PBX)的界面/孔隙结构,实现炸药跨尺度微结构定量分析及演化机制认识;(2) 炸药件残余应力研究:基于中子衍射技术实现装药内部三维应力场的无损测量,初步揭示工艺参数与残余应力的关联机制;(3) 冲击加载下炸药压缩物性研究:利用强激光加载和动态X射线衍射等手段,获取炸药在宽区冲击压力下的精密 Hugoniot 数据及相变行为;(4) 刺激下细观结构演化研究:借助高能X射线相衬成像等技术,原位捕捉冲击或非冲击加载下微孔洞塌缩、裂纹扩展等细观失效过程,为热点理论提供直接实验证据;(5) 爆轰反应特性研究:应用X射线相衬成像、动态X射线衍射及超快激光光谱等技术,原位探测爆轰波阵面结构、固体产物(如纳米碳)的动力学演化以及初始化学断键与反应路径。这些研究深化了对含能材料刺激下微介观结构-宏观性能关联、反应起始与传播机制的认识,为优化炸药设计与制造工艺、建立实证物理模型、提升安全与反应特性预测能力提供了关键技术支撑。

1 国内外大科学装置简介

1.1 大型中子科学装置

大型中子科学装置是研究物质微观结构、核反应

机制及技术应用的重要科学基础设施,凭借中子束流特有的深穿透性、氢元素敏感性及非破坏性检测优势,为材料科学、生命科学、环境能源等领域提供了多维度研究手段<sup>[9]</sup>(表1)。其核心功能体系包括:(1)物质结构精准解析——中子散射技术可穿透金属并精准识别氢同位素(<sup>1</sup>H/<sup>2</sup>D),解析多组分结构特征,定位氢原子及氢键网络,实现晶体结构、磁性序列和生物大分子动态行为的原子级表征;(2)极端环境模拟——依托强流氦中子源构建聚变堆14MeV中子辐照场,评估核材料辐照损伤机理;大气中子谱仪通过高能中子加速模拟宇宙射线环境,测试高精度电子元器件的抗辐照性能;(3)跨尺度无损检测——覆盖1 nm至20 μm的检测范围,中子振动谱宽域扫描(0~2000 cm<sup>-1</sup>),中子成像技术可检测金属构件内部缺陷与残余应力(应变分辨率达10<sup>-6</sup>量级),并实现材料服役过程的原位动态追踪<sup>[10]</sup>。

根据激发源类型,大型中子装置主要分为3类:散裂中子源(如中国散裂中子源CSNS、美国SNS、日本J-PARC、英国ISIS)、研究堆中子源(中国绵阳研究堆CMRR、美国HFIR、德国FRM-II)及加速器驱动白光中子源(欧洲n\_TOF、比利时GELINA、美国LANSCE/WNR)<sup>[11-14]</sup>。其中散裂中子源聚焦量子材料、核物理等基础研究领域(学术研究占比超70%),而研究堆中子源主要为核废料处理、聚变堆设计提供工程验证数据。我国CSNS装置束流功率(目前为170 kW,二期将升级至500 kW)和CMRR的20MW束流功率均已达到国际先进水平<sup>[15-17]</sup>。其中,CMRR已建成15台国

表1 国内外大型中子科学装置对比  
Table 1 Comparison of large neutron scientific devices

| 装置类型   | 代表装置          | 关键参数                                                                                                                      | 技术特色                                                  |
|--------|---------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------|
| 研究堆中子源 | 绵阳研究堆(CMRR)   | 热中子通量:2.4×10 <sup>14</sup> /cm <sup>2</sup> /s;堆功率:20 MW                                                                  | 核燃料辐照测试主力平台,支撑第三代核电材料研发,中子散射技术综合平台。                   |
| 散裂中子源  | 中国散裂中子源(CSNS) | 束流功率:一期100 kW(二期规划500 kW);质子能量:1.6 GeV;<脉冲中子通量:>2.4×10 <sup>16</sup> /cm <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ;谱仪数量:一期3台,二期规划20台 | 国产化率超90%,靶站中子效率国际先进;支持锂电池动态演化、文物无损检测等。                |
| 散裂中子源  | 美国SNS         | 束流功率:1.4 MW(设计值);中子通量峰值:10 <sup>17</sup> /cm <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ;谱仪数量:20台                                      | 全球首个兆瓦级装置,极端条件材料研究(如超导高压相变)。                          |
| 散裂中子源  | 日本J-PARC      | 质子能量:3 GeV;束流功率:1 MW;专用束线(ANNRI):低能中子(0.0015 eV~1.1 keV)                                                                  | 核天体物理元素合成模拟,氢存储材料动力学研究。                               |
| 散裂中子源  | 英国ISIS        | 束流功率:升级后300 kW;中子通量:8×10 <sup>15</sup> /cm <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ;谱仪数量:27台                                        | 工程材料残余应力分析(分辨率达10 <sup>-6</sup> 应变),运行效率高(年实验超2000项)。 |
| 白光中子源  | 欧洲n_TOF(CERN) | 能谱范围:热中子-GeV级;时间分辨率:1 ps                                                                                                  | 核废料嬗变截面测量精度比研究堆高3个量级,支持超新星爆发模拟。                       |
| 白光中子源  | 比利时GELINA     | 脉冲宽度:1 ns(全球最优);能谱范围:0.001 eV~20 MeV                                                                                      | 高精度核反应截面测量基准装置,镅-252自发裂变中子标定平台。                       |

际先进谱仪(包括6台热中子谱仪和9台冷中子谱仪),集成中子自旋回波谱仪、超小角散射系统及应力-织构综合测量平台,并配备温度( $-268\sim 1500\text{ }^{\circ}\text{C}$ )、压力(真空10 GPa)、磁场( $\pm 8\text{ T}$ )等多物理场原位加载系统,支撑物理、化学、生物等交叉学科的前沿探索<sup>[18-19]</sup>。

## 1.2 高亮度X射线光源

产生高亮度X射线光源的大科学装置主要分为同步加速器辐射光源(Synchrotron Radiation Source, SRS,主要为第三代和第四代光源)和大型激光装置(又称强激光装置)两种。

### 1.2.1 同步加速器辐射光源

第三代同步辐射光源对通过加速器设计的进步(更低的发射度)和插入件设备优化,最大限度的利用同步辐射源固有亮度来提高光源亮度,该种光源在全球主要发达和发展中国家广泛分布<sup>[20]</sup>。第四代同步辐射光源以自由电子激光(Free Electron Laser, FEL)为代表,其主要特征是高度相干的辐射,其亮度远高于第三代光源,同时还具有脉冲极短、平均功率高等优点,目前具备第四代光源国家包括美国、德国、瑞士、意大利、日本、韩国、中国等<sup>[20]</sup>。同步辐射是速度接近于光速的带电粒子在偏转磁场中运动时,沿着运动曲线的切线方向释放出的电磁辐射,能够提供从红外到硬X射线连续可调的宽波谱,具有高通量、高亮度、窄脉冲、高偏振等优异性能。

位于美国阿贡国家实验室(Argonne National Laboratory)的先进光源(Advanced Photon Source, APS)是第三代同步辐射光源,APS包括35个扇区,每个扇区包括一个或多个线站。其中,位于第16号扇区的高压协同访问团队(High Pressure Collaborative Access Team, HPCAT)以及位于第35号扇区的动态压缩区(Dynamic Compression Sector, DCS)是与美国能源部国家核安全委员会(National Nuclear Security Administration, NNSA)的合作研究束线,常用于开展含能材料的研究<sup>[21-22]</sup>。另外,APS第32号扇区搭建了一个名为“用于超快同步辐射实验的冲击系统(IMPact System for Ultrafast Synchrotron Experiments, IMPULSE)”的实验平台,也可用于含能材料相关研究<sup>[23]</sup>。

### 1.2.2 大型激光装置

大型激光装置是将多路激光组合使用获取更高能量、更高强度激光的典型大科学装置,需要对不同链路输出的激光进行严格的同步控制,是集中了激光、精密仪器、多种光机电控制及计算机控制系统为一体的综合高科技工程系统,其作为集加载(脉冲激光)和诊断

能力(X射线源、超快光谱等)为一体的综合性实验平台,为高温、高压、高应变率等极端条件下材料动力学性能的微介观尺度研究提供了重要支撑。大型激光装置通过激光束聚焦后与靶相互作用产生高亮度、微焦点X射线辐射源。国内外建成了很多大型激光装置<sup>[24]</sup>,包括美国劳伦斯利弗摩尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)的国家点火装置(National Ignition Facility, NIF,目前是世界上最大的激光器,1.8 MJ,3 ns),英国原子能武器机构(Atomic Weapons Establishment, AWE)的“猎户座”(Orion)激光装置(500 J,500 fs),法国原子能和替代能源委员会(Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, CEA)的LMJ(Laser Megajoule)激光装置(1.4 MJ,3.5 ns),俄罗斯联邦核中心-全俄实验物理研究所(VNIIEF)的大型激光装置,中国的大型激光装置(主要分布在上海、北京和绵阳等地)等。

依托中国工程物理研究院(CAEP,以下简称中物院)激光聚变研究中心(绵阳)建成的神光-III(SG-III)激光装置,是亚洲最大、世界第二的高功率激光装置。SG-III具备输出48路激光、三倍频激光能量为60 kJ/1ns与180 kJ/3ns<sup>[25]</sup>。此外,激光聚变研究中心的星光-III(XG-III)激光装置是国际首台具备“零抖动”同步输出纳秒、皮秒和飞秒三种脉冲宽度、三种波长激光束的多功能大型科学研究装置,具备三类光束的多组合、多角度配置协同打靶能力,能量为100 J级<sup>[26]</sup>。装置配备了光学、带电粒子、X射线辐射、电磁辐射、核物理等方面的先进诊断设备,同时装置依托单位可提供不同特征尺度和类型实验用靶的设计和制备,从而形成体系化的前沿物理实验研究能力。以星光-III激光装置纳秒束为泵浦源,激光聚变研究中心于2017年建成全光参量啁啾脉冲放大技术路线的PW级超高峰值功率激光实验平台SILEX-II。该装置激光中心波长800 nm,脉冲宽度约30 fs,信噪比大于1010:1(50 ps之外),聚焦功率密度大于 $1020\text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ ,具备开展PW级超短脉冲激光与物质相互作用实验研究能力<sup>[27]</sup>。

## 2 含能材料应用实例

面向含能材料结构与性能的多尺度关系认知需求,多尺度微结构的准确、全面、高精密表征是基本前提;面向含能材料安全机理和放能过程的科学认知需求,多尺度微结构反应动力学过程的动态捕捉是基本前提。

## 2.1 多尺度微结构研究

PBX(聚合物黏结炸药)是由炸药晶体与高分子粘结剂经压制形成的多相复合材料,其微结构具有纳米-微米-毫米多尺度特征,包含孔隙、界面、裂纹及织构等缺陷。在长期力-热载荷耦合作用下,这些微结构会发生动态演化,导致材料力学性能衰退和起爆特性改变,成为制约武器系统可靠性的关键因素<sup>[28]</sup>。传统表征手段存在显著局限性:宏观层面通过密度法测定平均孔隙率,但无法反映多相分布特性;微介观层面依赖扫描电镜(SEM)的局部形貌观察、CT的微米级裂纹检测及X射线衍射(XRD)的晶体结构分析,这些方法仅能提供定性或有限尺度的信息,且受限于样品的空间分辨率与统计代表性<sup>[29-30]</sup>。

基于中子大科学装置的散射技术(小角中子散射SANS、中子反射NR、中子衍射ND)为PBX多层级结构解析提供了革命性解决方案(表2),其核心优势体现在:(1)统计性定量分析能力,通过中子与核素特异性作用-可测定孔隙率、比表面积、分形维度等微结构统计特征参数;(2)原位动态追踪特性,利用中子穿透性优势结合温度(-268~1500℃)、压力(真空至10 GPa)等极端环境加载装置,实时解析热循环、机械应力等工况下微结构演化规律;(3)跨尺度覆盖范围,通过SANS(1~300 nm)与超小角中子散射USANS(300 nm~20 μm)联用,实现从微观分子链团到介观缺陷的跨尺度表征,精确捕捉炸药晶体相变、粘结剂相分离、孔隙演化等关键过程;(4)同位素标记技术,通过氘代粘结剂或特定组分替换,增强散射对比度,实现多相界面与缺陷类型的特异性识别<sup>[31]</sup>。

表2 中子衍射谱仪的性能对比

Table 2 Performance comparison of neutron scattering spectrometers

| 类型    | 检测尺度范围      | 特色功能               |
|-------|-------------|--------------------|
| SANS  | 1nm~300nm   | 孔隙分形分析、界面面积、原位温控加载 |
| USANS | 300nm~20μm  | 大尺寸孔隙网络表征、原位温度加载   |
| NR    | 0.1nm~100nm | 界面粗糙度、多层膜结构解析      |
| 高分辨ND | 原子尺度        | 氢原子定位、晶体相变、残余应力测量  |

当前中子散射技术已系统应用于PBX体系的五个核心研究方向:(1)炸药晶体相变与晶格畸变机制,通过ND解析HMX等晶体在热-力载荷下的 $\delta \rightarrow \beta$ 相变路径及残余应力分布;(2)粘结剂网络动态行为,利用SANS定量分析高分子链构象演变与孔隙率关联性;(3)界面失效机理,结合NR测定炸药-粘结剂界面粗糙

度、扩散层厚度及其环境响应特性;(4)微缺陷演化动力学,通过原位SANS/USANS揭示湿度/温度诱导的HMX逆相变、温度诱导的PBX损伤与孔洞衍生现象;(5)多尺度建模和构效关联探究,将散射数据与宏观性能实验、理论模拟等研究结合,建立微结构参数-宏观性能的定量构效关系<sup>[32]</sup>。随着中国绵阳CMRR、CSNS等中子装置谱仪性能的提升,PBX微结构表征正从静态分析向动态多场耦合研究转型(图1),为含能材料服役寿命预测与性能优化提供多尺度表征实验支撑<sup>[33]</sup>。

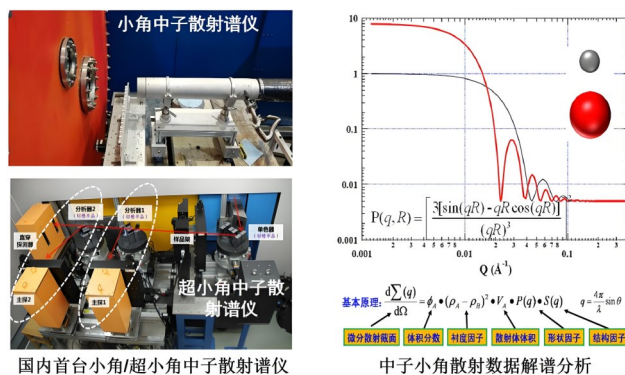


图1 绵阳CMRR研究堆的中子小角/超小角散射谱仪<sup>[33]</sup>

Fig.1 Neutron small/ultra small angle scattering spectrometer of Mianyang CMRR research reactor<sup>[33]</sup>

### 2.1.1 炸药晶体结构研究

固态含能材料的性能受多重因素制约,包括对刺激引发爆轰的敏感性、爆轰速度、化学反应性、热稳定性、晶体密度和形态等,而这些性能本质上由含能材料的固态结构所决定。作为分子晶体,含能材料分子间相互作用较弱,导致其相变能垒较低,多晶型现象显著。不同晶型会直接影响物理性质(如形态、感度、能量密度),进而决定材料整体性能。因此,通过中子衍射等技术精确表征晶体结构及其在热/机械过程中的演变尤为重要。

中子衍射凭借其对于氢原子的高灵敏性,成为含能材料氢原子定位的首选技术。早在1970年,单晶中子衍射技术已成功解析 $\beta$ -HMX的氢原子空间分布<sup>[34]</sup>:通过551个反射点数据测定了分子内所有原子的位置和各向异性参数,最终获得R值低至0.059的高精度结构模型。该研究不仅完整呈现了键长、键角等几何参数,还揭示了分子内氢键(C—H...O)和分子间氢键(N—H...O)的三维网络,其中分子间氢键沿晶体c轴形成链状排列,这对理解其热稳定性具有重要意义。

在高压相变研究领域,X射线与中子衍射的联用

揭示了RDX的复杂相行为。 $\alpha$ -RDX在3.9 GPa压力下直接转变为 $\gamma$ 相,此过程几乎不受温度影响,但转变速率与温度压力耦合相关<sup>[35]</sup>。中子粉末衍射证实, $\gamma$ -RDX中分子通过硝基取向差异形成两种重排模式,这与早期振动光谱推测的 $\beta$ 相假说存在本质区别(2009年Millar<sup>[36]</sup>团队通过中子数据修正了这一认知)。值得注意的是,相变过程中分子构象的显著改变可能影响材料冲击感度,这为后续感度调控研究提供了结构基础。

FOX-7的多晶型研究同样受益于中子衍射突破。2015年发现的高压新相推翻了此前基于X射线的 $\gamma$ 相假说<sup>[37]</sup>;尽管两者在层状结构反射特征上相似,但中子数据揭示新相的分子堆积模式与 $\gamma$ 相存在显著差异(如层间距压缩率和氢键角度变化)。由于缺乏单晶数据,该高压相的完整结构尚未解析,但其发现标志着FOX-7相变机理研究的重要进展,后续研究可通过原位高压中子衍射追踪动态转变过程(图2)。

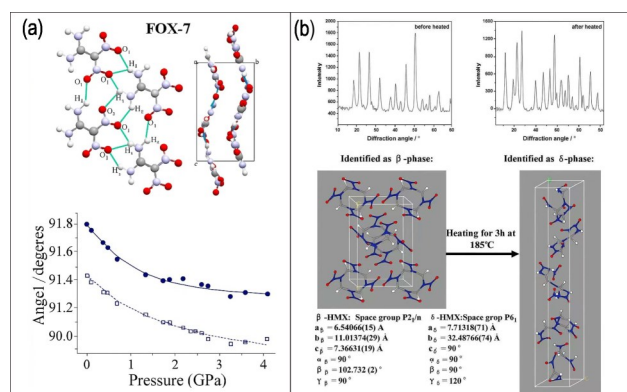


图2 (a)  $\alpha$ -FOX-7的 $\beta$ 角与静水压力的函数关系。方形:实验;圆形:DFT-D;(b) HMX不同物相的中子衍射实验结果和理论图像<sup>[38-39]</sup>

Fig.2 (a)  $\beta$  angle as a function of hydrostatic pressure for  $\alpha$ -FOX-7. Square: experiment; circle: DFT-D. (b) Experimental results of neutron diffraction and theoretical patterns of different phases of HMX<sup>[38-39]</sup>

对于HMX的多晶型体系,中子衍射结合湿度控制实验揭示了相变路径的特殊性。 $\delta$ 相向 $\beta$ 相转变时,潮湿环境通过水分子介入加速相变并诱发晶体缺陷,但并未观察到 $\gamma$ 相中间态<sup>[38]</sup>。这一现象与理论计算结果吻合: $\gamma \rightarrow \beta$ 相变的能垒(约120 kJ·mol<sup>-1</sup>)显著高于 $\delta \rightarrow \beta$ 相变(约80 kJ·mol<sup>-1</sup>),使得 $\delta$ 相更倾向于直接转变。值得注意的是, $\gamma$ 相作为水合物的亚稳态特性,解释了其在非溶剂环境中难以稳定存在的实验现象,这对炸药储存条件优化具有指导价值。

## 2.1.2 炸药晶体粉末的孔隙率和表面特征研究

炸药晶体粉末的孔隙率与表面特征研究在含能材料领域具有重要价值。聚合物粘结炸药(PBX)通常以高含量炸药晶体作为主要能量载体,尽管其制造过程中可能改变晶体初始结构,但全面表征晶体粉末的微观参数仍是建立构效关系的基础。炸药晶体粉末的结构特征涵盖粒径分布、晶型、形貌、比表面积及孔隙网络,这些参数通过小角中子散射(SANS)技术可实现系统性解析。该技术利用中子对氢/氘同位素散射截面的显著差异,通过匹配氘代溶剂与炸药晶体的中子散射长度密度(SLD),可精准分离孔隙与表面信号,同时结合统计便捷性和动态对比度调节优势,成为比表面积、分形维数、孔径分布等核心参数的首选表征手段。

2000年Joseph等<sup>[36]</sup>开创性地采用对比度匹配SANS(CV-SANS)技术研究HMX晶体粉末的机械变形效应。实验显示:粗颗粒HMX(初始比表面积0.28 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>)经压缩后表面粗糙度增加(0.65 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>),而细颗粒HMX(初始3.61 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>)在压缩后表面趋于致密化(2.64 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>),该趋势与压汞法结果一致。通过多分散球形孔隙的高斯分布模型拟合发现,粗颗粒压缩后内部孔隙呈现双峰分布,表明晶体破碎与裂纹扩展主导其变形;细颗粒则表现为大孔隙塌陷与小孔隙尺寸收缩,揭示压缩过程存在孔隙融合与分支裂纹形成机制。同年在TATB粉末中的类似研究进一步验证<sup>[40]</sup>,研磨过程可显著降低内部孔隙平均尺寸,凸显CV-SANS在炸药粉末孔隙演化表征中的普适性。

2010年Chad等<sup>[41]</sup>突破SANS的Q值范围限制,通过联合超小角中子散射(USANS)技术对五家厂商RDX晶体进行对比研究。跨尺度分析(50 nm~20  $\mu$ m)显示所有样品均呈现表面分形特征(分形维数2.4~2.9),其分形行为源于晶体生长过程中缺陷的层级累积,由散射数据表征的微观孔隙含量与大隔板试验的冲击敏感性数据高度相关。该研究首次建立微观孔隙含量与宏观冲击感度的定量关联,为炸药性能预测提供了介观尺度理论依据(图3)。

2019年Song等<sup>[42]</sup>将CV-SANS与Beaucage模型结合,系统解析微米/纳米级TATB的分形特性。微米级晶体外表面光滑且内部孔隙呈单一表面分形结构,而纳米级晶体则表现出外表面分形与内部双级体积分形的复合特征。该发现突破传统单一分形模型的局限性,揭示纳米化处理对含能材料孔隙层级结构的重构效应,为高能低感炸药设计提供了新视角。

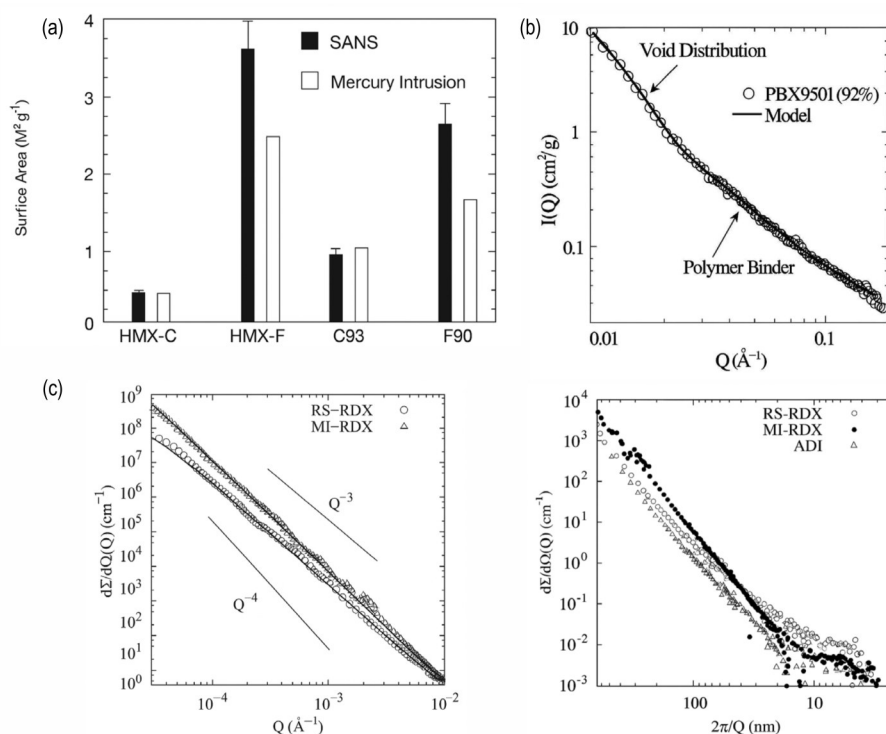


图3 (a) 采用对比度匹配SANS(CV-SANS)技术研究HMX晶体粉末的机械变形效应;(b) PBX9501在匹配点的SANS曲线;(c) 不同厂家生产RDX晶体的SANS和USANS数据<sup>[39-41]</sup>

Fig.3 (a) SANS(CV-SANS) contrast variation analysis technique was used to study the mechanical deformation effect of HMX powder; (b) SANS curve of PBX 9501 at match point; (c) SANS and USANS data in normal and high-Q range for different quality RDX crystal<sup>[39-41]</sup>

### 2.1.3 单质炸药压制体的微观结构研究

单质炸药压制体的微观结构研究聚焦于压制炸药晶体的孔隙演化与力学响应机制。作为聚合物粘结炸药(PBX)的简化模型体系,压制单质炸药片体系可通过小角中子散射(SANS)与超小角中子散射(USANS)联用技术实现跨尺度结构表征,其晶间孔隙网络的分形特征与压制工艺参数密切关联。2013年Joseph团队<sup>[43]</sup>针对TATB压制颗粒的研究显示:松散粉末的晶间孔隙呈随机分布(表面特征平均尺寸 $0.66\ \mu\text{m}$ ),而压制样品则形成具有粗糙界面的分形网络。当压制密度从 $1.65\ \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 升至 $1.80\ \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 时,孔隙表面平均尺寸与体积分形维数呈现先增后减的非单调变化,临界密度约为 $1.72\ \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。此现象揭示了TATB颗粒的压制相变机制——低密度区( $<1.72\ \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ )以脆性断裂主导,晶间孔隙通过裂纹扩展形成多级分形结构;高密度区( $>1.72\ \text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ )则转向塑性流动主导,孔隙界面因晶体滑移而趋于平滑。

在DAAF压制体系的研究中,Joseph团队<sup>[44]</sup>观察到与TATB截然不同的演化规律:三种不同粒径DAAF

颗粒的孔隙平均尺寸( $0.059\sim 0.195\ \mu\text{m}$ )随压制密度增加呈单调递减,而体积分形维数( $2.13\sim 2.78$ )则同步递增。值得注意的是,当压制密度达到阈值时,不同体系的孔隙参数均收敛于统一值(平均尺寸 $0.08\ \mu\text{m}$ ,分形维数 $2.6$ ),这表明DAAF晶体的各向异性力学响应在高压下趋于均质化。这种收敛行为可能源于DAAF分子独特的氧化偶氮呋喃环结构,其层间 $\pi$ - $\pi$ 堆叠作用在高压下产生协同变形,使得晶间孔隙的闭合路径具有普适性。相较之下,TATB的层状氢键网络在压制过程中表现出更强的方向依赖性,导致孔隙参数演变呈现体系特异性(图4)。

微观结构差异的本质可追溯至炸药晶体的本征特性<sup>[45]</sup>:TATB的层间弱相互作用(范德华力主导)允许大尺度滑移,形成分形特征显著的多孔网络;而DAAF的刚性共轭体系与分子间强偶极作用则限制塑性变形范围,促使孔隙结构在高压下快速均质化。这些发现为PBX炸药配方设计提供了关键指导——通过匹配炸药晶体力学特性与压制工艺参数,可精准调控装药体系的孔隙拓扑结构,进而优化其冲击波传播路径与能量释放效率。

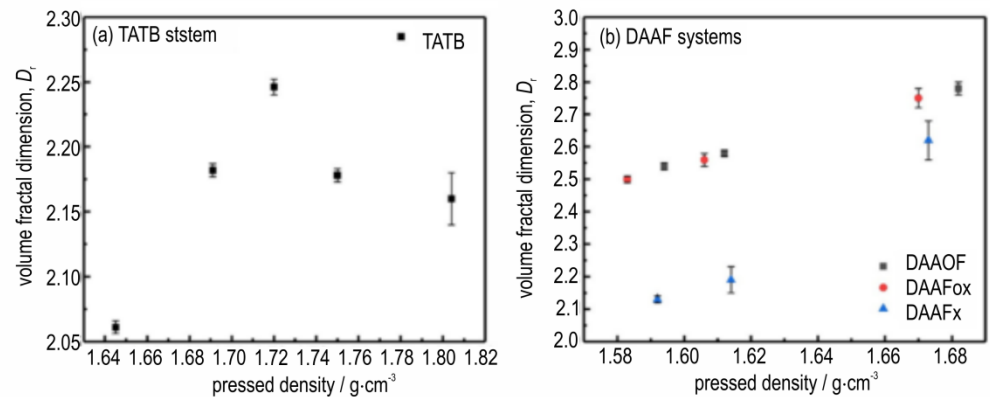


图4 孔隙体积分形维数对压制密度的依赖性(a)TATB体系和(b)通过不同合成路线制备的三种不同平均粒径的DAAF粉末<sup>[27-28]</sup>  
Fig.4 Dependence of the void volume fractal dimension on the pressed density. (a) TATB system, and (b) three types of DAAF powders with different mean particle sizes prepared through different synthesis routes<sup>[27-28]</sup>

2.1.4 PBXs的界面/表面结构研究

PBXs的界面/表面结构研究聚焦于炸药晶体-粘结剂、炸药晶体-孔隙及粘结剂-孔隙三类界面,这些界面通过调控应力传递路径和冲击热点形成机制,深刻影响复合材料的力学响应与爆轰特性。对比度匹配小角中子散射(CV-SANS)凭借其区分不同界面散射信号的独特能力,成为量化界面面积的核心技术。该技术通过调控样品中子散射长度密度(SLD),采用全氘代/非氘代溶剂或粘结剂混合物的浸润策略,实现三界面积参数联立方程的精确求解。

2006年Joseph等<sup>[46]</sup>通过甲苯溶胀PBX9501的CV-SANS实验,首次解析了HMX-粘结剂( $S_{HB}$ )、HMX-孔隙( $S_{HV}$ )及粘结剂-孔隙( $S_{BV}$ )的界面面积动态变化。尽管溶胀可能轻微扰动界面结构,但实验数据仍揭示压力作用下 $S_{HB}$ 与 $S_{BV}$ 的竞争性演变规律。2011年该团队进一步采用氘代粘结剂混合体系,发现热压压力升至200 MPa时 $S_{HB}$ 增加7.2%,而 $S_{HV}$ 下降4.5%,此现象

归因于HMX晶体脆性断裂产生的微裂纹界面。与之形成对比的是,2019年白亮飞等<sup>[47]</sup>在冷压(64~382 MPa)研究中首次提出界面结合率( $S_{HB}/(S_{HB}+S_{HV})$ ):当压力从64 MPa增至382 MPa时,结合率从28%跃升至76%,表明粘结剂在高压下通过流动填充晶体表面缺陷,形成更紧密的物理互锁结构。这种冷压与热压机制的差异(前者以粘结剂流动主导,后者以晶体断裂为主)为PBX成型工艺优化提供了关键依据(图5)。

多技术联用策略推动了界面表征的突破。Trevino团队<sup>[48]</sup>于2008年结合SANS与SAXS技术,通过X射线/中子散射截面差异实现四类PBX复合材料的界面损伤评估。轴向应变实验表明,仅当应变超过临界值(如PBX9404的12%应变)时,填料-粘结剂比表面积因晶体断裂和粘结剂重分布显著增加。这种跨尺度损伤演化机制与聚多巴胺改性界面中观察到的“互锁块”效应形成呼应——表面粗糙度的增加通过增强机械咬合作用抑制裂纹扩展。中子反射技术(NR)在亚纳米

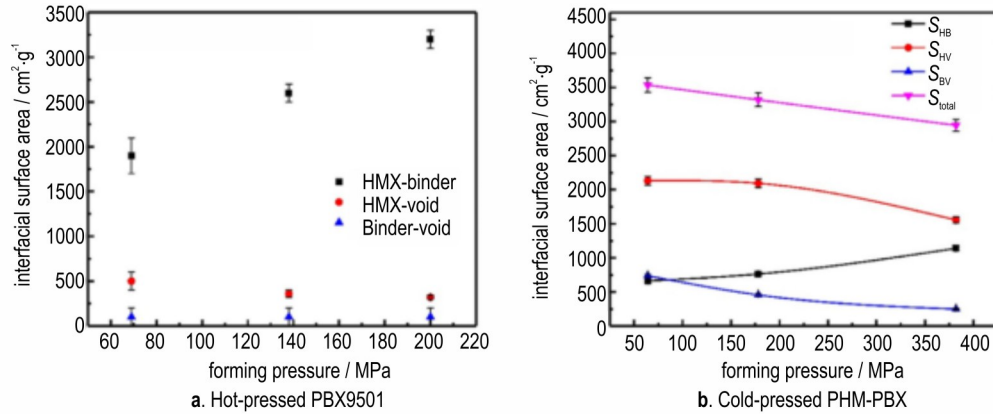


图5 从成型压力下PBXs的SANS结果中提取的各类界面面积的变化(a)热压PBX9501和(b)冷压HMX基PBX<sup>[47]</sup>  
Fig.5 Changes in various types of interface areas extracted from the SANS results of the PBXs under the forming pressure (a) Hot-pressed PBX 9501 and (b) cold-pressed HMX-based PBX<sup>[47]</sup>

级界面解析中展现出独特优势。Yeager 团队<sup>[49]</sup>2018 年对比原始、热处理及老化 PBX9404 的界面结构,发现增塑剂迁移导致粘结剂层厚度减少 3.2 nm(热处理)和 5.7 nm(老化),同时界面粗糙度从 0.8 nm 增至 1.5 nm。这种微观结构退化与巴西试验中界面剥离率上升 23% 的现象直接相关。结合分子动力学模拟, $\varepsilon$ -HNIW/F2311 界面在 348K 时体积模量( $K$ )下降 18%、形状模量( $G$ )提升 12%,表明温度诱导的粘结剂链段运动可优化界面应力分散能力。这些发现为建立"界面参数-环境条件-宏观性能"定量模型奠定了基础。当前研究已形成多尺度表征技术体系:CV-SANS 量化介观界面面积(1~100 nm)、中子反射解析分子级界面厚度(0.5 nm 精度)、结合同步辐射 X 射线荧光(SR-XRF)定位元素分布特征。例如,在 PDA 改性 LLM-105 基 PBX 中,界面氢键密度增加 2.3 倍可使抗压强度提升 52%<sup>[50]</sup>。这种跨尺度关联分析方法为新型高能低感炸药设计提供了理论框架,未来可通过机器学习整合介观参数数据库,实现界面结构的逆向设计。

### 2.1.5 PBXs 的孔隙率和微观结构研究

PBXs 的孔隙率与微观结构研究揭示了含能材料性能调控的关键机理。作为热点模型中影响起爆敏感性的核心参数,100 nm~1  $\mu$ m 尺度孔隙的演化规律通过 SANS/USANS 联用技术得以系统解析。基于 HMX 的 PBX 体系在热处理过程中的多尺度孔隙重构尤为复杂:2016 年 Yan 等<sup>[51]</sup>的原位 SANS 实验发现,200  $^{\circ}$ C 加热导致界面面积骤降 60%,证实熔融 F2314 粘结剂对初始孔隙的填充效应。但随后的室温储存阶段(3 h 内)15~35 nm 孔隙体积反常增加,这与  $\delta \rightarrow \beta$  相变引发的晶格畸变和晶粒重排有关;而 60% 湿度环境下孔隙体积增速提升至干燥条件的 2.3 倍,凸显环境因素对相变动力学的强化作用。

对比度匹配技术的创新应用拓展了孔隙表征维度。Joseph 等<sup>[52]</sup>通过代粘剂体系实现 PBX9501 多组分解耦,这种"自愈合"机制与 TATB 基 PBX 的棘轮生长现象形成鲜明对比——后者在热循环中因片层分子各向异性膨胀产生定向孔隙网络,导致不可逆体积增长达 0.8%/cycle。Thompson<sup>[53]</sup>的 USANS 研究揭示,经历 -55~80  $^{\circ}$ C 循环的 PBX9502 中 0.1~10  $\mu$ m 孔隙体积较新压制样品增加 37%,直接导致其压缩模量下降 28%。跨尺度表征技术的融合革新了孔隙拓扑分析手段。Trevor 团队<sup>[54]</sup>结合 FIB-XRCT 与 USAXS/USANS,构建了纳米至毫米级的全尺度孔隙分布图谱,这些孔隙在热应力下沿(001)晶面优先扩展形成分支网络(图 6。)Joseph 等<sup>[55]</sup>通过压制方向依赖性 SANS 实验,解析出 PBX9502 中椭球孔隙的取向分布:平行压制面方向长径比达 1.35,而垂直方向仅为 0.87,这种各向异性导致冲击波传播速度差异达 12%。热-力耦合作用下的孔隙动态演化机制研究取得突破。Christopher 团队<sup>[56]</sup>在 25~220  $^{\circ}$ C 原位实验中,通过修正 Ornstein-Zernike 模型量化孔隙回转半径与冲击感度的关联性:当温度升至 180  $^{\circ}$ C 时,对应冲击感度阈值下降 43%。Lin 等人开发的 PDA 涂层技术使 TATB 基 PBX 在室温至 120  $^{\circ}$ C 升温过程中的纳米微结构稳定性获得显著提升,其关键在于聚多巴胺的  $\pi$ - $\pi$  堆叠作用抑制了分子层滑移。新型理论模型与实验数据的深度融合推动性能预测精度提升。Perry 团队<sup>[57]</sup>将双峰对数正态分布的 USANS 数据导入 SURF 燃烧模型,使爆速预测误差从传统模型的 15% 降至 5.2%。在纳米复合体系研究中,Sanjay<sup>[58]</sup>发现 RDX/SiO<sub>2</sub> 干凝胶的 3~5 nm 介孔被炸药晶体占据后,比表面积从 350 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup> 骤降至 82 m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>,显著延缓了燃烧转爆轰过程。这些发现为"孔隙工程"调控含能材料性能提供了新范式。

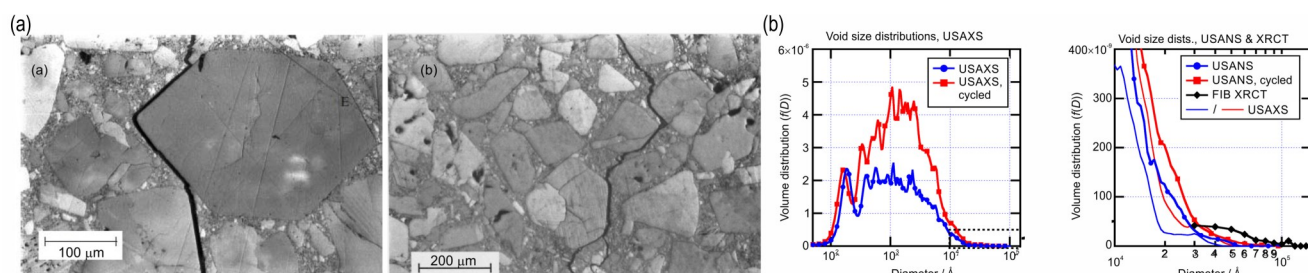


图 6 (a)突出显示裂缝的PBX 9501显微图和(b)USAXS数据中LX 17的最大熵孔洞大小分布(左),聚焦于USANS和FIB-XRCT结果的左窗格的内嵌视图(右)<sup>[54]</sup>

Fig.6 (a) Micrographs of PBX 9501 with cracks highlighted and (b) Left pane: maximum-entropy derived void size distributions of LX 17 from the USAXS data. Right pane: an inset view of the left pane that focuses on the USANS and FIB-XRCT results<sup>[54]</sup>

## 2.2 炸药件残余应力研究

PBX 药柱在注装、压制、时效及加工过程中,由于温度梯度分布不均与挤压应力场非均匀性,会形成复杂的残余应力网络。这种应力场不仅是裂纹萌生的潜在诱因,更会与外部热机械载荷耦合作用,引发颗粒断裂(粒径 $>200\ \mu\text{m}$ 时断裂概率增加 47%)、界面脱粘(界面结合能下降至  $0.8\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )、粘结剂基体开裂(裂纹扩展速率达  $0.15\ \text{mm}\cdot\text{s}^{-1}$ )等多尺度损伤模式,导致材料弹性模量下降达 35%。传统检测手段面临多重挑战:磁性法受多组分干扰信噪比不足,超声法虽能穿透深度达 50 mm,但受微观孔隙(孔隙率 $>2\%$ 时声速偏差达 8%)和晶界散射影响,测量精度局限在  $\pm 20\ \text{MPa}$  量级;X 射线衍射法基于布拉格方程虽可实现  $\pm 5\ \text{MPa}$  高精度表征,但其穿透深度仅  $10\sim 35\ \mu\text{m}$ ,难以捕捉体应力分布特征,雍志华团队<sup>[59]</sup>发现 TATB 基 PBX 边缘拉应力(3.2 MPa)较中心区域(1.8 MPa)高 78% 的梯度特征,却无法解释跨尺度应力传递机制。

中子衍射技术的突破性应用解决了上述难题。中国工程物理研究院开发的中子应力检测系统,利用中子深穿透特性(6 mm 深度衰减率 $<15\%$ )和高通量统计优势(单点测量时间缩短至 30 分钟),实现了 1 MPa 级精度的三维应力场重构。通过双丝杆拉伸台原位实验,发现 TATB 晶体(002)晶面在  $29^\circ$  衍射角的晶格应变与外

加应力呈线性响应( $R^2=0.96$ )。徐尧等<sup>[60]</sup>的热压工艺研究表明:当压力升至 140 MPa 时,TATB 晶体(002)面取向集中度提高至 82%,压缩强度相应提升 45%,这源于粘结剂在  $120\ ^\circ\text{C}$  时的粘流态促进了晶体重排(界面结合能增加至  $1.2\ \text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ )。与美国 LANL 实验室<sup>[53]</sup>的对比研究显示,疏松 TATB 粉末在热循环中晶格膨胀系数( $\alpha=2.3\times 10^{-5}/\text{K}$ )较压制样品( $\alpha=1.7\times 10^{-5}/\text{K}$ )高 35%,证实了压制工艺对残余应力的调控作用。(图 7)

跨尺度应力演化模型的建立标志着检测技术的理论突破。通过巴西实验与中子衍射的联用,发现宏观裂纹萌生阈值(0.8 MPa)与介观晶格应变突变点(0.75 MPa)高度吻合,验证了"晶界滑移-孔隙连通-宏观开裂"的损伤演化路径。分子动力学模拟揭示:TATB 层间范德华作用能( $0.25\ \text{eV}/\text{\AA}^2$ )在压应力下转化为氢键重构能(转化效率达 68%),这为设计应力耗散型 PBX 提供了理论依据。当前技术已实现工艺参数-晶格应变-宏观性能的定量关联,例如压制压力每增加 50 MPa,(002)面取向角分布半高宽减小  $12^\circ$ ,对应爆速提升 3.2%。该研究为 TATB 基聚合物炸药的热压工艺优化提供了实验依据和理论指导。

## 2.3 冲击加载下炸药压缩物性

含能材料在极端条件(高压数十 GPa、高温数千 K)下物质发生化学断键、晶体相变等复杂反应,状态参数

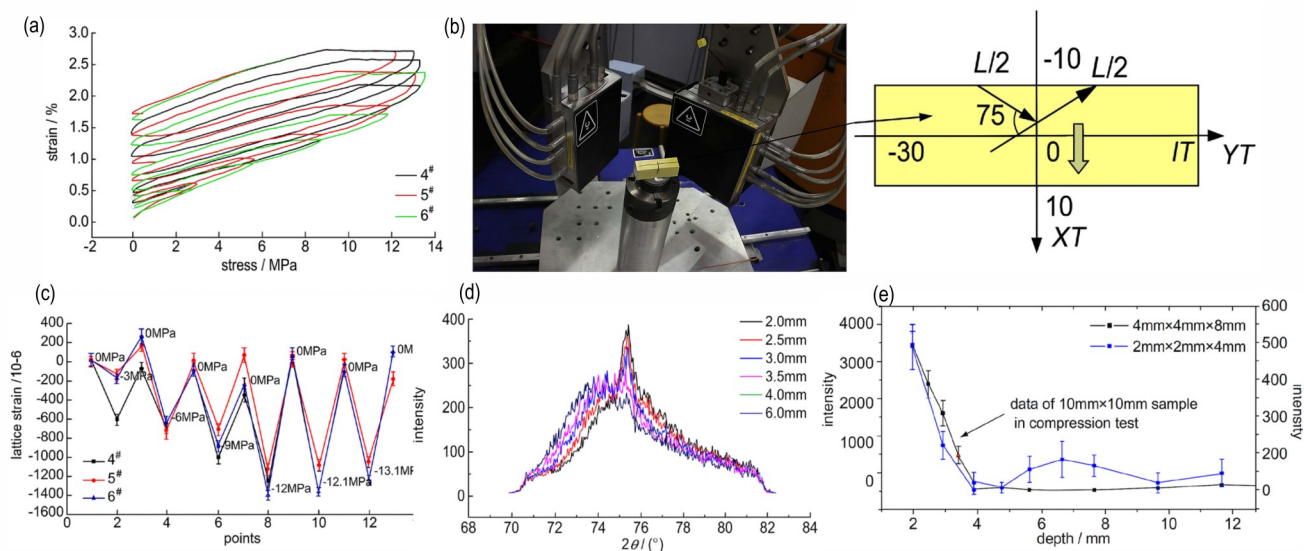


图 7 (a)原位压缩加载/卸载实验过程中的应力-应变曲线;(b)中子衍射深度实验;(c)原位压缩加载/卸载实验过程中的中子衍射应力检测的晶格应变结果;(d) 300 s 计数条件下采样体积为  $4\ \text{mm}\times 4\ \text{mm}\times 8\ \text{mm}$  时不同穿透深度的衍射强度;(e)不同采样体积下衍射强度随衍射深度的变化情况<sup>[60-61]</sup>

**Fig.7** (a) Stress-strain curves in in-situ compression loading /unloading test process; (b) Neutron diffraction depth test; (c) Lattice strain results of neutron diffraction stress test in in-situ compression loading /unloading test process; (d) Diffraction intensities of different diffraction penetration depth at the sampling volume of  $4\ \text{mm}\times 4\ \text{mm}\times 8\ \text{mm}$  under the condition of 300 s counting; (e) The change situation of diffraction intensity with diffraction depth under different sampling volume<sup>[60-61]</sup>

等主要认知来源于间接测量和唯像描述,导致的性能预测与应用需求存在较大差距。如何精确测量极端条件下的状态参数等是含能材料研究的挑战性问题。冲击压缩物性是理解含能材料动态行为的基础。获取冲击波导致的高温、高压、化学耦合条件下的精细物性参数,才能实现含能材料的性能预测和可靠模型构建。单晶与混合炸药冲击起爆机制差异明显,受限样品尺度和实验能力,实验上一直缺乏宽区的冲击压缩数据。基于激光装置的精密实验能力,可用于含能材料晶型、晶面冲击响应特性研究。含能材料同一晶型不同晶面表现出各向异性的感度,在控制晶型的同时关注优势晶面的定向控制,可获得低感度。

2009年起,内华达大学等单位研究人员在布鲁克海文国家实验室(Brookhaven National Laboratory, BNL)的国家同步辐射光源(National Synchrotron Light Source, NSLS)的U2A线站使用金刚石压砧(diamond anvil cell, DAC)开展了TATB(1,3,5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene)<sup>[62]</sup>、HMX<sup>[63]</sup>、FOX-7<sup>[64]</sup>、DAAF<sup>[65]</sup>等炸药的高压相变研究,采用线站束流提供的红外和拉曼振动光谱、XRD等技术对氢键、分子键和相态等进行了研究<sup>[66]</sup>。

2019年美国LLNL等开展了TATB在压力诱导下的相变研究<sup>[67]</sup>,使用APS的16-IDB(HPCAT)线站进行单晶XRD发现TATB在4 GPa以上压力时转变为单晶结构,体积没有发生突变但压缩性发生了变化。通过与结构预测算法紧密配合,可以阐明高压相的结构。

2020年美国LLNL实验室Marshall等报道了在Omega激光设施上进行的为期两年的TATB单晶冲击雨贡纽数据测量<sup>[68]</sup>。实验中,2或3束波长为351 nm、10 ns的激光束在时间上堆叠,产生20 ns或30 ns脉

冲来支持对TATB稳定的冲击,照射到靶上的激光总能量范围在151~799 J。实验使用了任意反射面速度速度干涉仪(velocity interferometer system for any reflector, VISAR)记录界面速度和冲击爆发时间(图8)。结果发现激光加载下的单晶TATB在5~83 GPa范围内表现出更具可压缩性的Hugoniot响应(约3%差异),且在35 GPa以下几乎未发生化学反应(图9)。这种差异源于激光加载的超短时间尺度抑制了热扩散与空隙诱导的热点反应,而传统方法中含空隙的配方炸药因空隙闭合产生额外熵增,导致更高的Hugoniot数据。同时指出现有理论模型(如Cheetah)因未充分考虑晶体结构、高压相变及非平衡动力学,在预测单晶TATB的高压区Hugoniot行为时存在系统性偏差。2024年法国CEA也报告了TATB基炸药(97%TATB, 3%苯氧基粘结剂)类似的实验结果并开展了分子动力学计算<sup>[69]</sup>。

2021年美国LLNL开展了TATB在爆轰加载下的结构响应行为<sup>[70]</sup>,使用APS的DCS线站进行时间分辨XRD测试,结果表明在爆轰波前沿通过TATB后,在

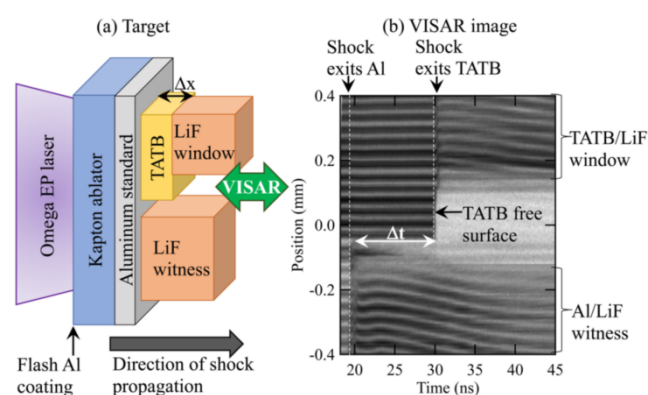


图8 (a)靶示意图和(b)s30097发次的VISAR图像<sup>[68]</sup>

Fig.8 (a) Schematic of the target and (b) VISAR image from shot s30097<sup>[68]</sup>

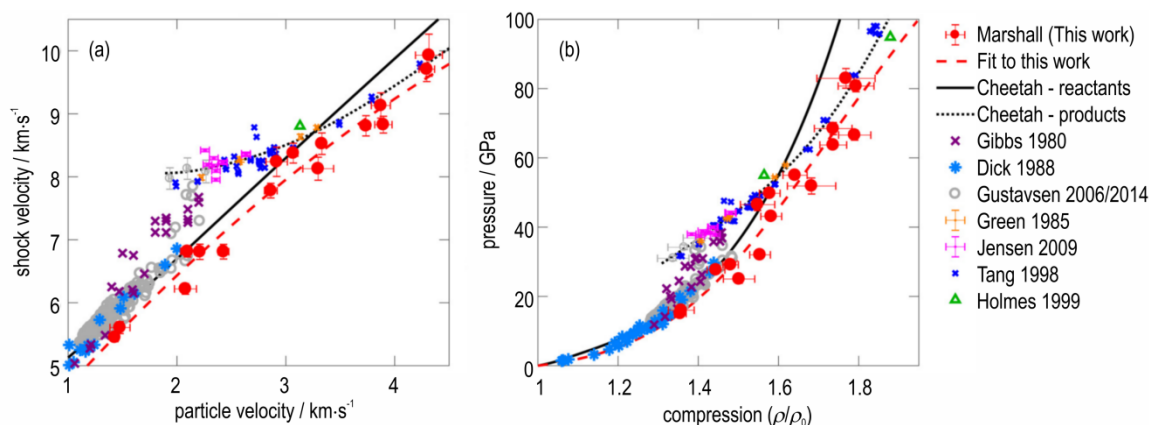


图9 新单晶TATB的Hugoniot数据(a)  $U_s-u_p$ 坐标图和(b)  $P-(\rho/\rho_0)$ 坐标图<sup>[68]</sup>

Fig.9 New single-crystal TATB Hugoniot data in the (a)  $U_s-u_p$  plane and (b)  $P-(\rho/\rho_0)$  plane<sup>[68]</sup>

30 GPa以上压力仍能观察到一部分TATB的压缩,之后几百纳秒伴随着泄压和分解过程。而在爆轰对碰加载TATB单晶时,相当一部分晶体TATB在60 GPa以上压力时仍保持稳定。而同样爆轰加载LLM-105基PBX时,则很快出现分解。这些结果表明TATB在高压、温度和冲击条件下具有惊人的弹性,为理解TATB的钝感性提供了基线。这些结果还为TATB的扩展反

应区以及这种独特的钝感炸药起爆和传播爆轰的热点机制提供了有趣的信息。

中物院激光聚变研究中心通过解决mm级TATB晶粒制备与精密加工等问题,国内率先突破TATB单晶冲击压缩实验技术,在SG-III获得10~60 GPa下冲击Hugoniot数据<sup>[71]</sup>,支撑了TATB性能预测及精细化建模。

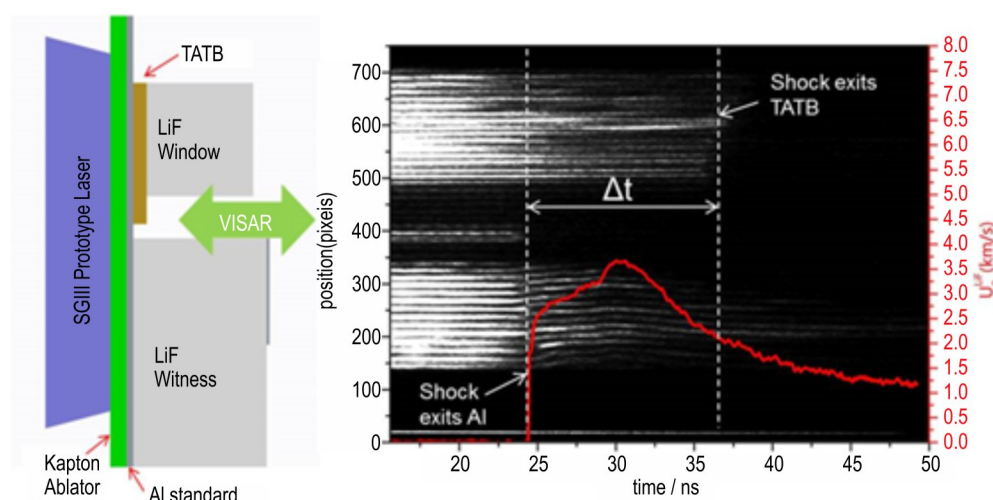


图10 中物院的TATB靶示意图和VISAR实验结果<sup>[71]</sup>

Fig.10 Schematic of the TATB target and VISAR results from CAEP<sup>[71]</sup>

## 2.4 刺激下含能材料细观结构演化研究

刺激下的冲击/非冲击起爆机理是深入了解含能材料安全可靠性的根本,一直是领域研究的难点。冲击起爆“热点”概念自1952年首次提出,目前是被广泛认可的一种冲击起爆理论。但热点点火的主导机制仍不明确,洞悉热点形成与缺陷、刺激条件的内在关联仍是国际难题。热点形成、增长、点火及燃烧甚至爆炸,呈现多尺度演化与多物理耦合发展特征;跨尺度反应演化受炸药本身和外部环境共同作用,是炸药安全性能和起爆性能研究的核心内容。孔洞塌缩是目前比较公认的主要机制,但其形成热点的尺寸通常在微米级别,持续时间在纳秒级别,缺乏实验验证。而仅靠数值模拟的结论,很难让人对热点形成机理信服。炸药的非冲击点火也是一个热积累过程,其点火过程与炸药的弹性失效、塑形变形机理、相变和状态方程(equation of state, EOS)等相关,这些点火模型的建立和验证均需要实验验证。

2013年,美国在IMPULSE上开展了首次涉及炸药的实验<sup>[72]</sup>。该实验使用气炮驱动飞片撞击老化的PBX 9501(95% HMX, 2.5% Estane, 2.5% BDNPA/BDNPF),旨在通过XPCI原位成像直接在微观结构尺度上探索环境因素和结构力学响应之间的联系。

2014年LANL首次使用X射线自由电子激光(XFEL)实时拍摄到的受冲击炸药的孔洞塌缩动态图像<sup>[20]</sup>,实验在MEC-LCLS(Materials in Extreme Conditions hutch at the Linac Coherent Light Source)上进行。样品为PETN单晶,其被加工成150 μm厚的薄片(110晶向)并被夹在熔融石英板间,使用激光微机械加工在PETN薄片上开直径10 μm的通孔。如图11所

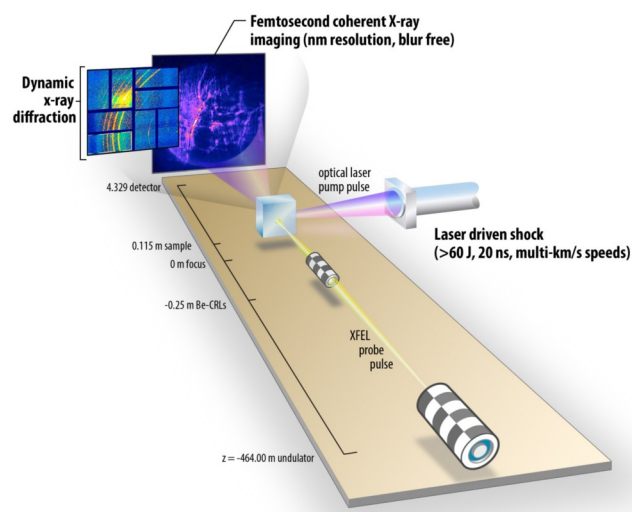


图11 冲击成像和衍射的实验布置<sup>[20]</sup>

Fig.11 Experimental layout of shock imaging and diffraction<sup>[20]</sup>

示,激光驱动平面冲击波从垂直孔洞方向加载,XFEL光束方向与孔洞方向一致,实验可实现飞秒相干X射线成像和动态X射线衍射(DXRD)。图12给出了使用单发相干X射线衍射成像(Coherent X-ray Diffractive Imaging, CXDI)技术获得的孔洞塌缩图像,单发CXDI技术可以实现超快时间和纳米空间分辨。这项研究实现了冲击作用下炸药微观结构演化观测的第一步,为炸药细观模型预测能力提供实验验证。

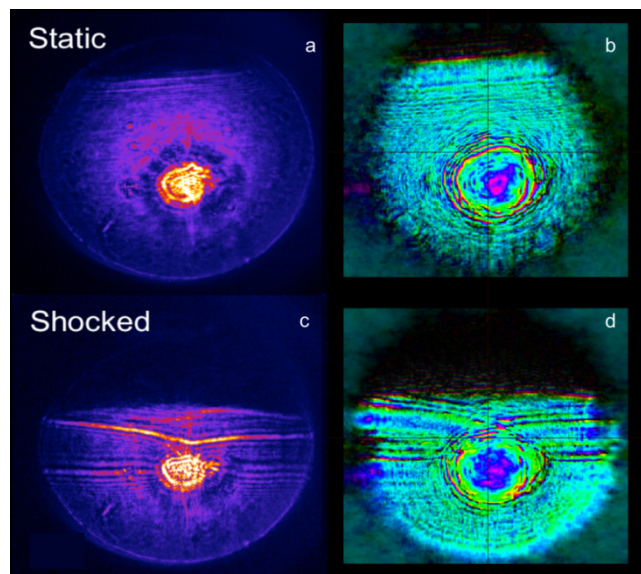


图12 采用稀疏字典学习法进行的CXDI重建过程结果(左为80  $\mu\text{m}$ 视场拍摄的PETN样品Gabor全息图,(a)带有10  $\mu\text{m}$ 孔洞的静态样品图,(c)冲击图。右为相位恢复图像,(b)静态图,(d)冲击图,亮度是波幅(与透射率成比例),颜色是波的相位延迟<sup>[20]</sup>)

**Fig. 12** Results of progress in CXDI reconstruction through sparse dictionary learning methods (The left one shows the raw Gabor holograms of the PETN samples with an 80  $\mu\text{m}$  field of view. (a) is the static image of the sample with a 10  $\mu\text{m}$  void. (c) shows the shocked image. The right column shows the phase retrieved images of the static (b) and shocked images (d), where brightness is the amplitude of the wave (proportional to transmission) and the color is the phase delay of the wave<sup>[20]</sup>)

2016年,美国普渡大学在APS的32线站开展了HMX基高聚物粘结炸药(polymer-bonded explosive, PBX)在分离式Hopkins杆(又称Kolsky杆)撞击下的破碎试验<sup>[73]</sup>,通过XPCI获得了样品破碎和失效情况(图13),这为热点形成预测的宏观和介观数值模拟提供了试验依据。

2019年,美国普渡大学在APS的32线站开展了超声激励下炸药分解实验,使用在线同时XPCI和XRD对HMX基PBX的受力和分解过程进行了研究<sup>[74]</sup>。通

过XPCI获得了粘结剂的移动、晶体的破碎、熔化、长大、气化和粘结剂损伤等现象(图14),而通过XRD观察到了由于热膨胀导致的HMX特征峰位移,以此根据热膨胀系数计算得到了相应的温升。

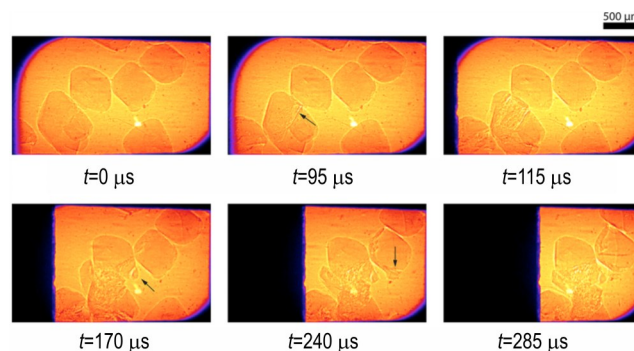


图13 典型PBX压缩试验的图像序列<sup>[73]</sup>

**Fig. 13** Image sequence from a representative PBX compression experiment<sup>[73]</sup>

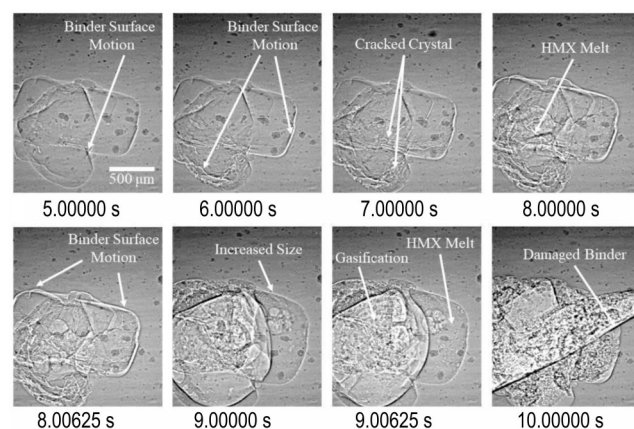
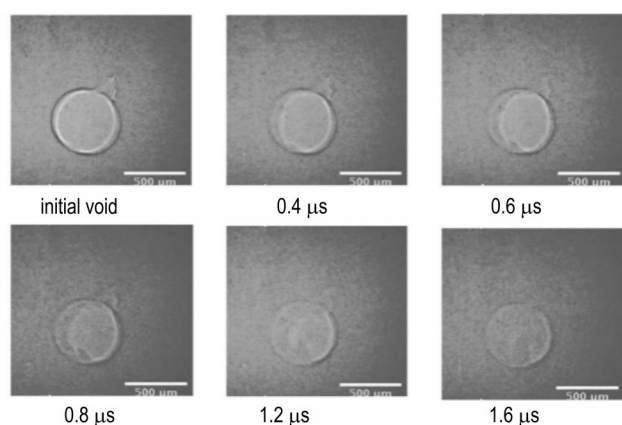
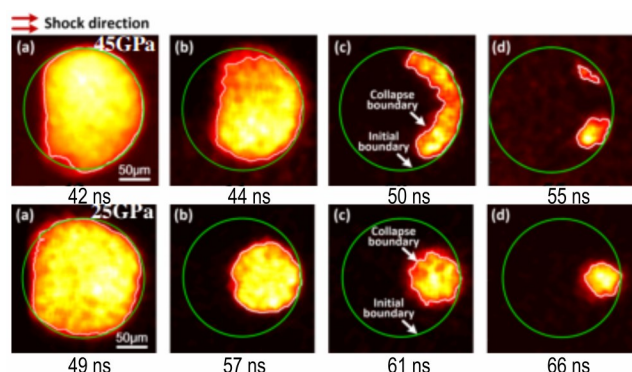


图14 样品在超声激励下的X射线相衬成像帧选<sup>[74]</sup>

**Fig. 14** Select frames of the X-ray phase contrast imaging of sample under ultrasonic excitation<sup>[74]</sup>

2020年美国普渡大学在APS的32号线站使用气炮加载结合X射线相衬成像(X-ray Phase Contrast Imaging, XPCI)研究了 $\beta$ -HMX单晶的500  $\mu\text{m}$ 直径孔洞演化过程<sup>[75]</sup>,气炮加载速度为0.5  $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$ ,从图15中可以看到孔洞左边界的移动过程,但是并未观察到射流的产生,意味着并未发生粘塑形孔洞塌缩过程。

中物院激光聚变研究中心<sup>[76]</sup>基于SG-III激光装置提出了孔洞塌缩动力学高分辨实验的方法,攻克了X射线光学的透射带通、多画幅成像系统研制、微米级显微成像、高速摄像等难点,突破了皮秒级X射线追踪成像技术。首次获得孔洞塌缩过程的高清演化图像(图16),实现了缺陷演化动力学的可视化,在基于物理的细观模型预测含能材料点火响应上迈出重要一步。该实验的

图 15 500  $\mu\text{m}$  圆形孔洞的演化过程截图<sup>[75]</sup>Fig.15 Snapshots of the evolution of the 500  $\mu\text{m}$  cylindrical void<sup>[75]</sup>图 16 中物院获得的孔洞塌缩原位全息图像<sup>[76]</sup>Fig.16 In-situ holographs of void collapse from CAEP<sup>[76]</sup>

加载压力和多幅追踪照相国际领先,首次揭示射流形成、均匀塌缩等不同模式,优于美国同行结果。通过突破间接测量瓶颈,揭示力-热-化耦合作用下热点分布、反应起源、反应诱发等动力学过程。获得微细观结构与宏观性能变化耦合机制直接实验证据,指导安全性设计与评价。

## 2.5 含能材料爆轰反应特性研究

含能材料的爆轰物理和化学动力学理论/模型先于实验出现,描述爆轰的CJ和ZND理论出现在20世纪前半叶。现在,通过多种动力学、反应流和热化学程序可以预测爆轰温度和压力、能量释放、气相/固相产物的特性和热点形成等。通过分子动力学模拟可以预测更早时间和更小尺度上的机械响应和化学反应。实验上,爆轰宏观特性如爆速、猛度等在几十年前就很容易测量。相反,具备与爆轰化学、爆轰反应区、气体/固体产物演化和热点形成相关的时间/空间尺度实验测量技术却仍处于发展初期。探测原子和分子需要埃到纳米尺寸的分辨,产物生成(特别是爆轰纳米金刚石等)需要

$\sim 5\text{ nm}$  尺寸分辨,孔洞塌缩和热点需要 $\sim 100\text{ nm}$ 到 $\sim 10\text{ }\mu\text{m}$ 的尺寸分辨。X射线波长为 $\text{\AA}$ 量级,可以探测这些现象。通过X射线衍射可以获得晶体和分子结构,通过散射可以获得微观形貌,通过光学成像还可以具备亚微米到几纳米的分辨。更重要的是,10 keV或更高能量的X射线,可以较深地穿透低Z值的CHNO材料,这样就可以探测到厘米尺度炸药的爆轰波阵面前沿。而如何在超快环境中使用X射线技术就成了含能材料爆轰物理研究的关键。从时间尺度上来说,化学反应动力学通常发生在亚纳秒尺度,炸药爆轰反应区时间可达 $\sim 100\text{ ns}$ ,而诸如TATB则会有更大和更长的反应区。爆轰波前沿穿过一个微米级孔洞需要几百皮秒时间,而形成的热点温度和压力会持续更长的时间。碳颗粒凝聚被认为发生在爆轰波阵面后的 $\sim 100\text{ ns}$ 甚至微秒时间尺度。因此对应大多数快速化学反应,需要皮秒甚至亚纳秒的X射线脉冲,而更长的化学反应和之后的碳凝聚过程需要纳秒级脉冲<sup>[77]</sup>。

### 2.5.1 固体产物动力学演化研究

俄罗斯科学院西伯利亚分部2001年最先使用同步辐射加速器(SR)产生的X射线研究爆轰和冲击波现象<sup>[78]</sup>,进行了反应区密度测试并使用SAXS研究了富碳炸药50/50 TNT/RDX的爆轰过程产物演化,包括超分散金刚石的生成。指出基于SR的高时空分辨为凝聚相爆轰的毁伤特性机理和结构(包括晶体)动态演化提供了新的测试手段。之后俄罗斯科学院西伯利亚分部又基于SR开展了TNT、TATB等含能材料的爆轰产物密度和爆轰过程碳产物相态变化研究<sup>[79-82]</sup>,产物散射信号随时间的变化基本相同,但是TNT和TATB的信号积分强度相对较弱,认为TNT和TATB中产物颗粒处于低密度状态,可能是石墨态。

2017年美国LANL、LLNL、华盛顿州立大学和ANL合作,在APS的DCS上利用时间分辨小角度X射线散射(TR-SAXS)研究了PBX 9502(95% TATB,5% Kel-F 800)爆轰时碳簇的动力学特性,获得爆轰产物碳颗粒的尺寸时间演化过程。之后LANL又在DCS上采用TR-SAXS开展了不同加载强度下PBX 9502产物碳的相态变化过程,发现过驱爆轰加载下仅有无定型碳的生成(图17)<sup>[83]</sup>。

2022年LLNL报道了在NIF的TARDIS(Target Diffraction In Situ)平台(图18)通过激光加载TATB和两路X射线探测,对TATB起爆后50 ns内的固态碳产物时空演化过程进行了观测<sup>[84-86]</sup>,将约500  $\mu\text{m}$ 厚的TATB粉末样品冲击压缩至70~135 GPa,并利用

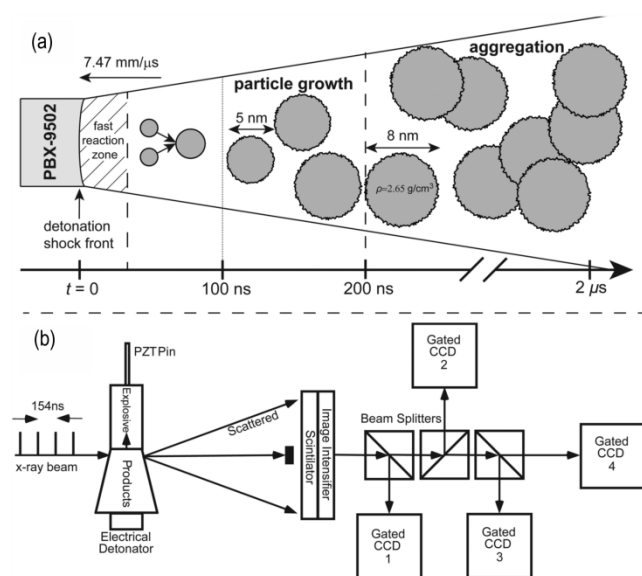


图 17 (a)碳团簇生成和聚集过程示意图和(b)TR-SAXS实验示意图<sup>[83]</sup>

Fig. 17 (a) Scheme of carbon clustering and aggregation process and (b) schematic of TR-SAXS experiments<sup>[83]</sup>

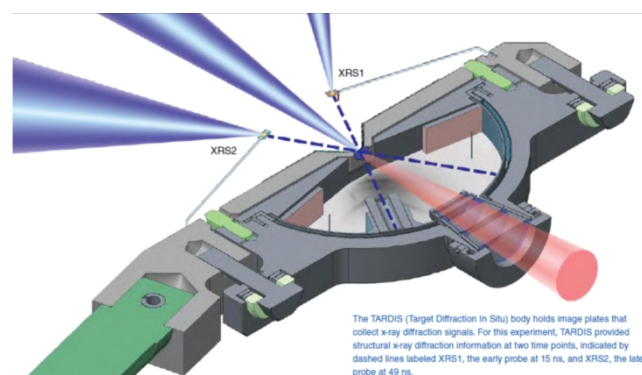


图 18 TARDIS 试验平台示意图<sup>[85]</sup>

Fig.18 Schematic of TARDIS experimental platform<sup>[85]</sup>

DXRD 获得的原位结构数据(图 19),虽然信噪比较低,但反应前 50 纳秒内的衍射图谱与非晶产物和晶体六方金刚石混合最为吻合,实验结果可为 Cheetah 热力学和其他动力学程序提供校验和改进依据,增强未来的实验预测和分析能力,预测高能炸药的能量输运过程。

中物院激光聚变研究中心与化工材料研究所合作,近年来建立了 DXRD 技术观测 HNS、TATB 等炸药爆轰产物固体碳的演化<sup>[87]</sup>,通过优化实验布局,调控炸药厚度、加载激光能量/脉冲以及诊断延时等,给出了实现 TATB 等炸药可靠起爆的激光加载条件和适用于相态演化的动态衍射测试条件,逐步构建了基于 DXRD 用于爆轰固体产物的瞬态、痕量捕捉技术,为深入理解含能材料的爆轰过程奠定基础(图 20)。

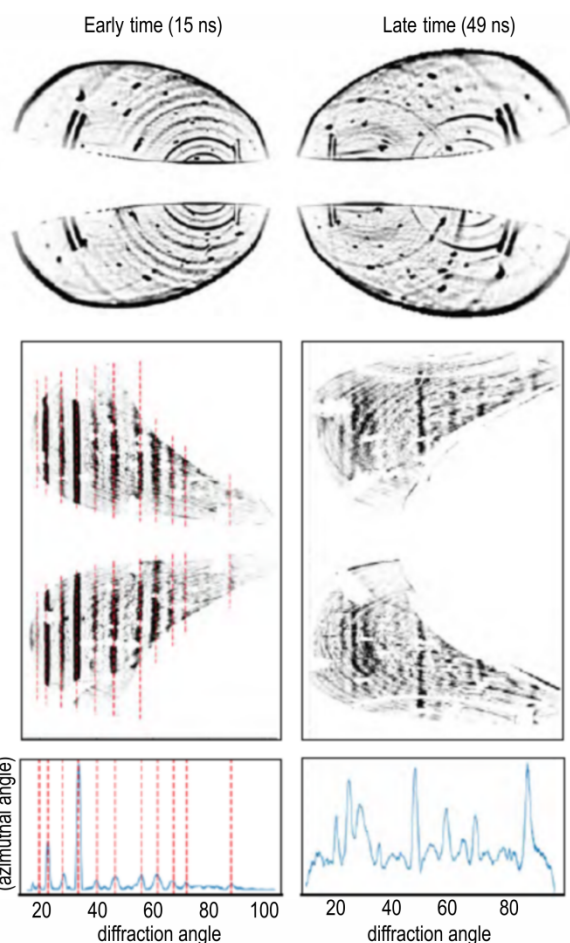


图 19 不同时刻的 XRD 数据<sup>[85]</sup>

Fig.19 XRD data at different time points<sup>[85]</sup>

## 2.5.2 冲击起爆波阵面研究

冲击起爆模型描述含能材料内部冲击波引起温度和压力阶跃诱发的化学反应过程。目前缺乏介观尺度上炸药热点生成、反应增长、爆轰建立过程实证;点火唯像模型在初始温度、孔隙率模拟上偏离较大,复杂条件下冲击起爆预测结果往往出现巨大偏差。冲击起爆过程发生在药柱内部,难以透视且速度快,原位观测一直是挑战性难题。

2016 年,美国 LLNL 和 LANL 报道了在 APS 的 IMPULSE 上开展的雷管动态起爆试验结果,其通过 XPCI 获得了冲击片雷管的高聚物飞片飞行形貌(图 21)和与 PETN 撞击后的炸药起爆过程(图 22)<sup>[88-89]</sup>。

中物院激光聚变研究中心与化工材料研究所合作,提出基于超快激光 X 射线的动态照相方法,攻克了穿透性增强、二维空间分辨提升等难点,突破了 5 μm、10 ps 分辨透视照相技术。国内首次展示了冲击片雷管的飞片飞行形貌(图 23)<sup>[90]</sup>和 φ5 mm 药柱冲击起爆过程高分辨透视图像(图 24)<sup>[91]</sup>,在起爆及爆轰精细化

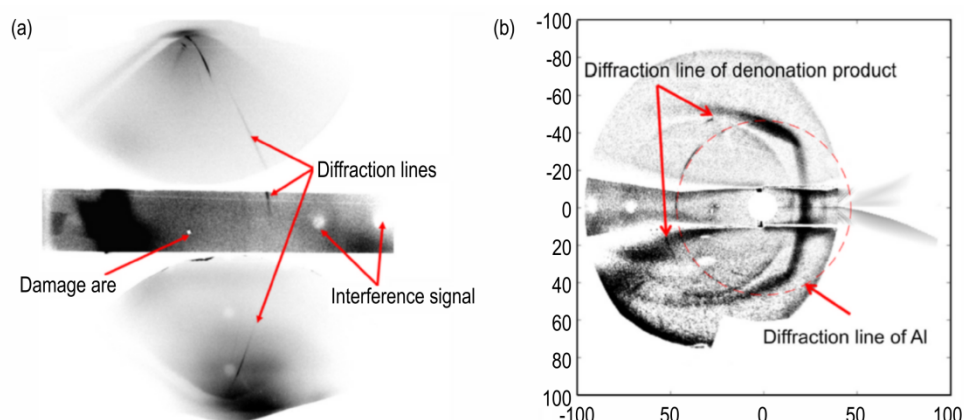


图 20 中物院开展的 HNS 爆轰产物 XRD 平面和立体投影图<sup>[87]</sup>

Fig.20 (a) Flat and (b) stereographic projection images for the XRD of detonated HNS from CAEP<sup>[87]</sup>

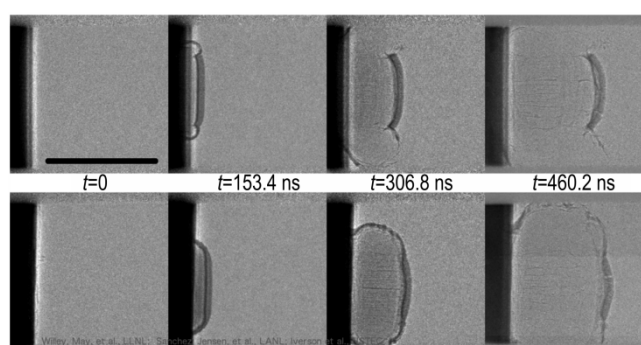


图 21 使用 80 ps X 射线脉冲以 153.4 ns 间隔获得的垂直于电流方向(上图)和平行于电流方向(下图)飞片图像<sup>[88]</sup>

Fig.21 Flyer images acquired perpendicular to the current direction (top) and parallel to the current direction (bottom) at 153.4 ns intervals using 80 ps X-ray pulses<sup>[88]</sup>

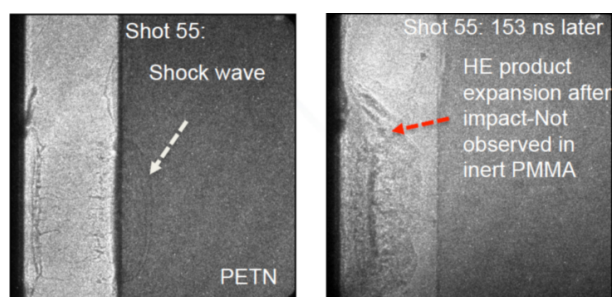


图 22 飞片撞击下 PETN 炸药内部冲击波特征<sup>[89]</sup>

Fig.22 Interior shock wave characteristics of slapper impact on PETN<sup>[89]</sup>

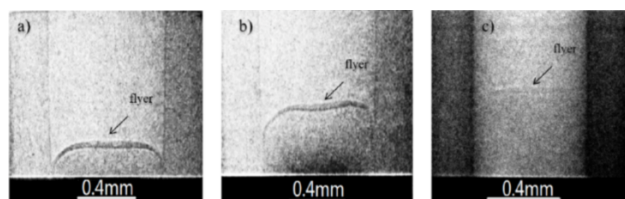


图 23 不同时间间隔下飞片在(a)塑料炮筒,(b)塑料炮筒和(c)铝合金炮筒中的成像<sup>[90]</sup>

Fig.23 Imaging of the flyer inside (a) plastic barrel, (b) plastic barrel and (c) Al alloy barrel captured at various intervals<sup>[90]</sup>

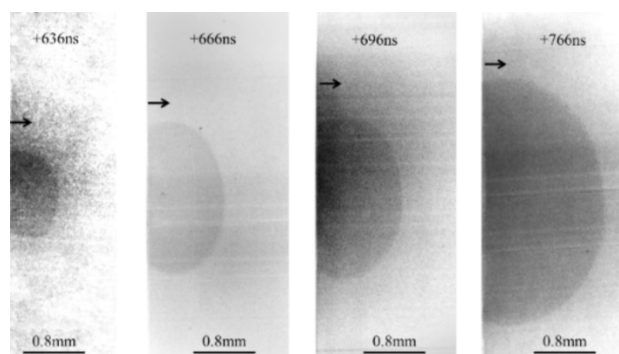


图 24 中物院获得的药柱起爆过程高分辨透视图像<sup>[91]</sup>

Fig.24 High-resolution transmission images of charge initiation obtained by CAEP<sup>[91]</sup>

实验研究迈出重要一步,达到国际先进水平。通过微介观跨尺度演化模拟,耦合超高时空分辨实验观测,预期在爆轰传播机制认识和模型发展方面取得新的成果,支撑建立新一代预测性模型。

### 2.5.3 爆轰反应化学研究

要获取炸药在高压冲击加载下的爆轰反应释能机理,需要深入洞察炸药受冲击后的化学反应路径,初始化学反应在炸药受冲击之后迅速发生,这是炸药化学反应释能过程重要的第一步。超快激光光谱采用泵浦探测实验方法,可以在超快时间尺度研究炸药的爆轰反应化学。电子激发态分解产物部分反映了爆轰瞬态产物,在能量转换中起着至关重要的作用。在这个意义上,含能材料激发态下的非绝热单分子分解路径对理解爆轰机理很重要。冲击能量如何点燃含能材料仍是一个谜。飞秒激光多声子散射已用于研究门模式向上泵浦机制,揭示了单个声子模式被激发,然后能量被重新分配到其他模式。例如,已经提出了 RDX 能量向上泵浦的 3 声子理论分析,有助于展示能量转移如何占主导地位<sup>[92]</sup>。超快激光光谱是研究电子或振动激

发下的结构、几何和化学变化的有力工具。从分子水平上揭示含能材料的内在物理和化学机制至关重要,这可能有助于理解超快和复杂的光引发反应和爆轰物理学<sup>[93]</sup>。

美国 LANL 的 McGrane 等<sup>[94]</sup>通过激光加载炸药和飞秒同步光谱技术,包括相干反斯托克斯拉曼 (Coherent anti-Stokes Raman, CARS)、飞秒激发拉曼光谱 (Femtosecond stimulated Raman spectroscopy, FRS) 等,可探测结构变化、分子化学键的断裂、分子反应和产物中间体的有效信息。

美国 LANL 与普渡大学合作,开展了冲击加载下硝基甲烷、PETN 和 TNT 等炸药的化学反应原位测试

研究工作<sup>[95-97]</sup>。冲击加载、干涉测试和光谱光束均由一个掺钛蓝宝石啁啾脉冲放大器单脉冲产生。通过 ps 脉冲激光冲击加载炸药薄片 ( $\sim 1\mu\text{m}$ ),采用小角度超快动态偏振仪 (LA-UDE) 或光子多普勒测速仪 (PDV) 记录铝飞层的自由面粒子速度,采用阻抗匹配法获得炸药内部压力,冲击压力覆盖 3~55 GPa 区间。依托大型激光装置建立的可见光 (VIS) 和中红外 (MIR) 吸收谱获得典型化学分子和键的振动谱,时间分辨率达到了 25 ps (图 25)。该研究同时使用了分子动力学 (MD) 模拟对红外吸收谱变化进行了计算,并与实验结果进行了比较,为冲击作用下的化学断键和产物形成提供了一些定性的信息。

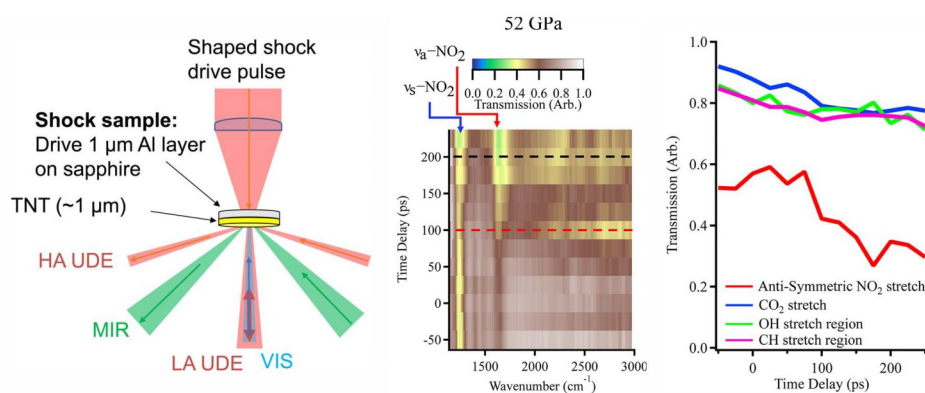


图 25 (a) 样品位置示意图, (b) 冲击透射谱和 (c) 特定频率谱线<sup>[96-97]</sup>

Fig.25 (a) Schematic of the sample location, (b) shocked transmission spectra and (c) specific frequency lineouts<sup>[96-97]</sup>

中物院激光聚变研究中心利用飞秒瞬态吸收光谱研究了 HNS 和 TATB 的激发态动力学<sup>[98-100]</sup>,如图 26 所示。根据该图,在实验研究的基础上建立了 S1\*态、快速填充的 S1 态和长寿命的 T1 态之间的平衡和级联去激发模型。此外, TATB 的电子转移过程与光谱变化吻合良好。这些结果表明,一些典型的硝基炸药在激发和弛豫过程中表现出类似的行为,硝基基团被激发能激活,然后在激发态下具有弛豫结构。

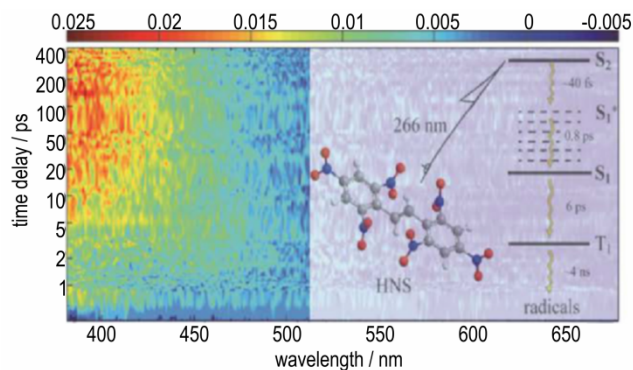


图 26 HNS 的瞬态吸收谱和去激发模型<sup>[98]</sup>

Fig. 26 The transient absorption spectrum of HNS and its de-excitation model<sup>[98]</sup>

### 3 总结与展望

系统综述了中子源、同步辐射光源及大型激光等大科学装置在含能材料多尺度结构与动态响应研究的主要进展。中子散射技术依托其深穿透性和对轻元素的灵敏性,已成功用于炸药件微介观缺陷与残余应力的无损表征、晶体缺陷与热稳定性的关联机制研究,揭示了材料内部微结构及残余应力演化规律;同步辐射光源和大型激光通过高亮度 X 射线相衬成像和动态 X 射线衍射技术,实现了微孔洞塌缩和界面损伤演化过程与爆轰波阵面结构的原位观测;大型激光的超快诊断技术及极端加载条件,为冲击起爆和物态相变研究提供了超快反应和高压物性数据支撑。这些研究从微介观到宏观尺度揭示了含能材料能量释放与安全性能的内在关联,为建立精准物理模型提供了关键实验支撑。

大科学装置正成为含能材料多尺度行为研究的核心引擎,未来大科学装置需在时空分辨率、深穿透、多因素极端环境加载协同及装置贯通方面进一步提高实

验能力,主要包括(1)中子源装置需升级超快脉冲技术,将氢键网络解析的时间分辨率提升至纳秒级,破解能量转移路径的时空演化密码;(2)针对百 GPa 高压、万 K 高温等极端环境,需在大型激光装置中开发耐冲击多物理场诊断腔体,通过激光质子照像与 X 射线相衬技术联用,实现爆轰产物相态演化的三维动态重构;(3)在 ps 时间尺度上结合 XRD 和测速技术。这对于允许 ps 时间尺度上的 EOS 和相变动力学测量是特别重要的;(4)高重复率的 XFELs 和激光驱动器,这可以增加 XFELs 的通量和简化动态材料数据的收集,高通量数据的产生需要发展并行的 X 射线探测器,以及大量数据(包括驱动特性和样品变化)的处理和分析方法。

当前大科学装置在含能材料中的应用需从以下几个方面重点加强研究。跨尺度动态关联机制尚未建立,极端条件下化学键断裂与能量传递关系的微观证据匮乏,多物理场耦合作用下的反应动力学缺乏系统性认知,构效认知与工艺关联性方面尚未建立定量构效模型。需要通过建设含能材料专用线站,集成极端环境加载与多束流诊断,构建中子、同步辐射及激光装置的数据标准化与共享机制,贯通晶体结构演化、缺陷动态及反应路径等多维度信息,形成跨尺度研究体系;建立“原子振动-晶体相变-结构失效”的跨尺度关联模型,从根本上揭示刺激-响应-释能的关联机制,解决当前研究仍存的机理深度与工艺关联性认知局限性的问题。

基于大科学装置产生的海量结构-性能数据,可通过机器学习构建含能材料多模态数据库,逆向指导炸药设计。依托大科学装置建立炸药内部缺陷与刺激反应演化的关联关系,可推动含能材料安全评估从宏观性能测试向微结构安全设计转变。这一研究范式的转变将推动含能材料研究从“观测和验证”到“预测和控制”的跨越,对提升含能材料的科学认知水平具有重要意义。

**致谢:**感谢中国工程物理研究院化工材料研究所李敬明研究员、曹威副研究员、徐金江副研究员给予的指导和帮助。

#### 参考文献:

- [1] 黄辉, 黄亨建. 不敏感 PBX 炸药的多尺度结构与感度[J]. 中国材料进展, 2022, 41(2): 108-116.  
HUANG Hui, HUANG Heng-jian. Multi-scale structures and sensitivity of insensitive polymer bounded explosives[J]. *Materials China*, 2022, 41(2): 108-116.
- [2] 黄辉, 黄亨建. 后 CHNO 类含能材料的发展思考[J]. 中国材料进展, 2018, 37(11): 889-895.  
HUANG Hui, HUANG Heng-jian. Insights into the development for Post-CHNO energetic materials[J]. *Materials China*, 2018, 37(11): 889-895.
- [3] LAI Q, LONG Y, YIN P, et al. Thinking outside the energetic box: Stabilizing and greening high-energy materials with reticular chemistry[J]. *Accounts of Chemical Research*, 2024, 57(19): 2790-2803.
- [4] LIU Z P, WANG J R, HE G S, et al. Engineering the thermal conductivity of polymer-bonded explosives by interfacial thermal resistance reduction and structural designs: A review[J]. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 2025, 8(1): 16.
- [5] HANDLEY C A, LAMBOURN B D, WHITWORTH N J, et al. Understanding the shock and detonation response of high explosives at the continuum and meso scales[J]. *Applied Physics Reviews*, 2018, 5(1): 011303.
- [6] 孙承伟, 卫玉章, 周之奎. 应用爆轰物理[M]. 北京: 国防工业出版社, 2000: 216-239.  
SUN Cheng-wei, WEI Yu-zhang, ZHOU Zhi-kui. Applied detonation physics[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2000: 216-239.
- [7] WALTER L. Introduction to neutron scattering[J]. *ChemTexts*, 2023, 2023(1): P1-55.
- [8] PASCARELLI S, MCMAHON M, PÉPIN C, et al. Materials under extreme conditions using large X-ray facilities[J]. *Nature Reviews Methods Primers*, 2023, 3: 82.
- [9] BAI L F, LI X X, LI H, et al. A review of small angle scattering, neutron reflection, and neutron diffraction techniques for microstructural characterization of polymer-bonded explosives[J]. *Energetic Materials Frontiers*, 2023, 4, 140-157.
- [10] GARDNER J S, EHLERS G, FARAONE A, et al. High-resolution neutron spectroscopy using backscattering and neutron spin-echo spectrometers in soft and hard condensed matter[J]. *Nature Reviews Physics*, 2020, 2(2): 103-116.
- [11] WADE Z J, KRISHNA R, BODEY A J, et al. 4D synchrotron X-ray microtomography of fracture in nuclear graphite after neutron irradiation and radiolytic oxidation[J]. *Carbon*, 2020, 168: 230-244.
- [12] LI H, WANG S, CAO C, et al. Neutron imaging development at China academy of engineering physics (CAEP)[J]. *Physics Procedia*, 2017, 88: 154-161.
- [13] lightsources. org [OL]. <https://lightsources.org/light-sources-of-the-world/>.
- [14] FRM II[OL]. <https://neutronsources.org/neutron-centres/>
- [15] PENG S, PENG T, SUN G. Progress on nuclear analysis techniques[J]. *Nuclear Analysis*, 2022, 1(1): 100007.
- [16] ZHANG J, XIA Y, WANG Y, et al. High resolution neutron diffractometer HRND at research reactor CMRR[J]. *Journal of Instrumentation*, 2018, 13(1): T01009-T01009.
- [17] 孙嘉程, 陈喜平, 谢雷, 等. 中国绵阳研究堆高压中子衍射谱仪在材料研究中的应用[J]. 高压物理学报, 2024, 38(3): 114-123.  
SUN Jia-cheng, CHEN Xi-ping, XIE Lei, et al. Application of the high-pressure neutron diffractometer at CMRR in materials research[J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2024, 38(3): 114-123.
- [18] WANG T, SUN L, CHEN L, et al. Rheo-small-angle neutron scattering apparatuses at China mianyang research reactor[J]. *Journal of Instrumentation*, 2018, 13(10): T10008-T10008.
- [19] ZHU T, ZHAN X, XIAO S, et al. The multipurpose reflectometer at CSNS[J]. *Neutron News*, 2018, 29(2): 11-13.
- [20] BOLME C A, RAMOS K J, SANDBERG R L, et al. Dynamic evolution of high explosives (HE): a summary of recent physics insights for next-generation models obtained at 3rd and 4th-generation light sources [R]. Los Alamos National Laboratory.

- tory Report, LA-UR-18-28777, 2018.
- [21] PRAVICA M, QUINE Z, ROMANO E, et al. Anisotropic decomposition of energetic materials[C]//Shock Compression of Condensed Matter 2007. American Institute of Physics; c2007: 1117–1120.
  - [22] WANG X, RIGG P, SETHIAN J, et al. The laser shock station in the dynamic compression sector. I[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(5):053901.
  - [23] RAMOS K J, JENSEN B J, IVERSON A J, et al. In situ investigation of the dynamic response of energetic materials using IMPULSE at the Advanced Photon Source[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, 500(14):142028.
  - [24] DANSON C N, HAEFNER C, BROMAGE J, et al. Petawatt and exawatt class lasers worldwide[J]. *High Power Laser Science and Engineering*, 2019, 7:e54.
  - [25] ZHENG W, WEI X, ZHU Q, et al. Laser performance of the SG-III laser facility[J]. *High Power Laser Science and Engineering*, 2016, 4(1): e21.
  - [26] ZHU Q, ZHOU S, ZHANG Y. Design and construction of the XG-III PW laser facility[J]. *The Review of Laser Engineering*, 2010, 38(9): 693–697.
  - [27] HONG W, HE S K, TENG J, et al. Commissioning experiment of the high-contrast SILEX-II multi-petawatt laser facility [J]. *Matter and Radiation at Extremes*, 2021, 6(6): 11.
  - [28] WILLEY T M, LAUDERBACH L, GAGLIARDI F, et al. Comprehensive characterization of voids and microstructure in TATB-based explosives from 10 nm to 1 cm: effects of temperature cycling and compressive creep [R]. No. LLNL-PROC-425116: 2010.
  - [29] HOFFMAN D, DEPIERO S. Characterization and qualification of new TATB and kel-F 800 for LX-17 [R] , No. UCRL-TR-228232: 2007.
  - [30] MANNER V W, YEAGER J D, PATTERSON B M, et al. In situ imaging during compression of plastic bonded explosives for damage modeling[J]. *Materials*, 2017, 10(6): 638.
  - [31] YEAGER J D, LUSCHER D J, VOGEL S C, et al. Neutron diffraction measurements and micromechanical modelling of temperature-dependent variations in TATB lattice parameters[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2016, 41(3): 514–525.
  - [32] MANG J T, HJELM R P, FRANCOIS E G. Measurement of porosity in a composite high explosive as a function of pressing conditions by ultra-small-angle neutron scattering with contrast variation [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2010, 35(1): 7–14.
  - [33] CHEN D F, LIU Y T, WU M M. The neutron scattering program at the China advanced research reactor (CARR): A progress report[J]. *Neutron News*, 2009, 20(2): 32–35.
  - [34] CHOI C S, BOUTIN H P. A study of the crystal structure of  $\beta$ -cyclotetramethylene tetranitramine by neutron diffraction[J]. *Acta Crystallographica Section B Structural Crystallography and Crystal Chemistry*, 1970, 26(9): 1235–1240.
  - [35] DAVIOSON A J, OSWALD I D H, FRANCIS D J, et al. Explosives under pressure—the crystal structure of  $\gamma$ -RDX as determined by high-pressure X-ray and neutron diffraction[J]. *CrytEngComm*, 2008, 10(2): 162–165.
  - [36] MILLAR D I A, OSWALD I D H, FRANCIS D J, et al. The crystal structure of  $\beta$ -RDX—an elusive form of an explosive revealed[J]. *Chem Commun*, 2009(5): 562–564.
  - [37] HUNTER S, COSTER P L, DAVIDSON A J, et al. High pressure experimental and DFT-D structural studies of the energetic material FOX-7[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2015, 119(5): 2322–2334.
  - [38] LI H, LI Y, BAI L, et al. Acceleration of  $\delta$ - to  $\beta$ -HMX-D8 phase retransformation with D<sub>2</sub>O and intergranular strain evolution in a HMX-based polymer-bonded explosive [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2019, 123(12): 6958–6964.
  - [39] MANG J T, SKIDMORE C B, HJELM R P, et al. Application of small-angle neutron scattering to the study of porosity in energetic materials [J]. *Journal of Materials Research*, 2000, 15(5): 1199–1208.
  - [40] MANG J T, SKIDMORE C B, HOWE P M, et al. Structural Characterization of Energetic Materials by Small Angle Scattering [C]. AIP Conference Proceedings, 2000, 505: 699–702
  - [41] STOLTZ CA, MASON B P, HOOPER J. Neutron scattering study of internal void structure in RDX[J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 107(10): 103527.
  - [42] SONG P, TU X, BAI L, et al. Contrast variation small angle neutron scattering investigation of micro- and nano-sized TATB [J]. *Materials*, 2019, 12(16): 2606.
  - [43] MANG J T, HJELM R P. Fractal networks of inter-granular voids in pressed TATB [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2013, 38(6): 831–840.
  - [44] MANG J T, FRANCOIS E G, HAGELBERG S. Compaction properties of diaminoazoxy furazan (DAAF): A small-angle neutron scattering study [J]. *International Journal of Energetic Materials and Chemical Propulsion*, 2013, 12(5): 411–428.
  - [45] MARK H D, WILLEY T M, MITCHELL A R, et al. Comparison of new and legacy TATBs [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2008, 26(3): 139–162.
  - [46] MANG J T, HJELM R P. SANS and contrast variation measurement of the different contributions to the total surface area in PBX 9501 as a function of pressing intensity [C]. AIP Conference Proceedings, 2006, 845(1): 1271–1274.
  - [47] BAI L, TIAN Q, TU X, et al. SANS investigation on the effect of cold-pressed forming pressure on the microstructure of HMX-based PBX [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2019, 27(10): 853–860.
  - [48] TREVINO S F, WIEGAND D A. Mechanically induced damage in composite plastic bonded explosives: a small angle neutron and X-ray study[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2008, 26(2): 79–101.
  - [49] YEAGER J D, WATKINS E B, DUQUE A L, et al. The thermal and microstructural effect of plasticizing HMX-nitrocellulose composites[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2018, 36(1): 13–28.
  - [50] LIN C, WEN Y, HUANG X, et al. Tuning the mechanical performance efficiently of various LLM-105 based PBXs via bioinspired interfacial reinforcement of polydopamine modification [J]. *Composites Part B: Engineering*, 2020, 186: 107824.
  - [51] YAN G, TIAN Q, LIU J, et al. The microstructural evolution in HMX based plastic bonded explosive during heating and cooling process: an in situ small-angle scattering study [J]. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2016, 13(4): 916–926.
  - [52] MANG J T, SKIDMORE C B, SON S F, et al. An optical microscopy and small-angle scattering study of porosity in thermally treated PBX 9501 [C]. AIP Conference Proceedings, 2002, 620: 833–836.
  - [53] THOMPSON D G, BROWN G W, OLINGER B, et al. The effects of TATB ratchet growth on PBX 9502 [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2010, 35(6): 507–513.

- [54] WILLEY T M, OVERTURE G. Towards next generation TATB-based explosives by understanding voids and microstructure from 10 nm to 1 cm[C]. 40th International Annual Conference of ICT Karlsruhe, 2009, LLNL-PROC-411719.
- [55] JOSEPH T M, REX P H. Preferred Void Orientation in Uniaxially Pressed PBX 9502[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2021, 46(1): 67-77.
- [56] ARMSTRONG C L, MANG J T. Thermally-driven changes to porosity in TATB-based high explosives[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2021, 46(8): 1304-1312.
- [57] PERRY W L, CLEMENTS B, MA X, et al. Relating microstructure, temperature, and chemistry to explosive ignition and shock sensitivity[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 190: 171-176.
- [58] INGALE S V, SASTRY P U, WAGH P B, et al. Preparation of nano-structured RDX in a silica xerogel matrix[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2013, 38(4): 515-519.
- [59] 雍志华, 朱世富, 赵北君, 等. X射线法测量粘结炸药的残余应力[J]. 四川大学学报:工程科学, 2007, 39(5): 101-105.
- YONG Z H, ZHU S F, ZHAO B J, et al. Residual stress test of bonded explosives by X-ray diffraction method[J]. *Journal of Sichuan University(Engineering Science Edition)*, 2007, 39(5): 101-105.
- [60] 徐尧, 王虹, 李建, 等. 中子衍射法测量TATB基PBX单轴压缩的内应力研究[J]. 含能材料, 2017, 25(10): 860-865.
- XU Yao, WANG Hong, LI Jian, et al. Internal stress measurement during uniaxial compression for TATB based PBX by neutron diffraction[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Han-neng Cailiao)*, 2017, 25(10): 860-865.
- [61] QUENNEVILLE J, GERMANN T C, THOMPSON A P, et al. Molecular dynamic studies of thermal induced chemistry in TATAB[C]. AIP Conference Proceedings, 2008, 955(1): 451-454.
- [62] YULGA B F. Static high pressure FT-IR spectroscopic studies of TATB[D]. Las Vegas, NV: University of Nevada, 2009.
- [63] PRAVICA M, GALLEY M, KIM E, et al. A far- and mid-infrared study of HMX (octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine) under high pressure[J]. *Chemical Physics Letters*, 2010, 500(1-3): 28-34.
- [64] PRAVICA M, LIU Y, ROBINSON J, et al. A high-pressure far- and mid-infrared study of 1, 1-diamino-2, 2-dinitroethylene[J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(10): 103534.
- [65] CHELLAPPA R S, DATTELBAUM D M, COE J D, et al. Inter-molecular stabilization of 3, 3'-diamino-4, 4'-azoxyfurazan (DAAF) compressed to 20 GPa[J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2014, 118(31): 29067-29085.
- [66] RAVINDRAN T R, RAJAN R, VENKATESAN V. Review of phase transformations in energetic materials as a function of pressure and temperature[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2019, 123: 29067-29085.
- [67] STEELE B A, CLARKE S M, KROONBLAWD M P, et al. Pressure-induced phase transition in 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB)[J]. *Applied Physics Letters*, 2019, 114: 191901.
- [68] STAVROU E, BAGGE-HANSEN M, HAMMONS J A, et al. Structural study of TATB under detonation-induced shock conditions [DB/OL]. <https://arxiv.org/abs/2011.11102>.
- [69] MARSHALL M C, FERNANDEZ-PAÑELLA A, MYERS T W, et al. Shock Hugoniot measurements of single-crystal 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB) compressed to 83 GPa[J]. *Journal of Applied Physics*, 2020, 127(18): 185901.
- [70] SOLLIER A, HÉBERT P, LESCOUTE E, et al. Hugoniot measurements of the 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene (TATB) formulation T2 up to 70 GPa[J]. *Journal of Applied Physics*, 2024, 135(9): 095901.
- [71] 刘东晓. 基于激光平台的TATB单晶冲击雨贡纽测量实验研究[R]. 四川省第十一届高压科学与技术研讨会, 四川内江, 2024-11-09.
- LIU D. Experimental Study on Shock Hugoniot Measurements of TATB Single Crystals Based on a Laser Platform[R]. The 11th Sichuan Provincial Symposium on High-Pressure Science and Technology, Neijiang, Sichuan, November 9, 2024.
- [72] RAMOS K J, JENSEN B J, IVERSON A J, et al. In situ investigation of the dynamic response of energetic materials using IMPULSE at the Advanced Photon Source[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, 500(14): 142028.
- [73] PARAB N D, ROBERTS Z A, HARR M H, et al. High speed X-ray phase contrast imaging of energetic composites under dynamic compression[J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 109(13): 131903.
- [74] MARES J O, ROBERTS Z A, GUNDUZ I E, et al. In-situ X-ray observations of ultrasound-induced explosive decomposition[J]. *Applied Materials Today*, 2019, 15(1): 286-294.
- [75] DUARTE C A, HAMED A, DRAKE J D, et al. Void collapse in shocked  $\beta$ -HMX single crystals: Simulations and experiments[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2020, 45(2): 243-253.
- [76] 曹柱荣. 炸药中的微孔洞塌缩机制研究[D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2023.
- CAO Zhu-rong. Study on the collapse mechanism of micropores in explosives[D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2023.
- [77] TREVOR W. New frontiers in experimentally observing detonation properties[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2019, 44(3): 259-261.
- [78] ALESHAIEV A N, ZUBKOV P I, KULIPANOV G N, et al. Application of synchrotron radiation for studying detonation and shock-wave processes[J]. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2001, 37(5): 585-593.
- [79] TEN K A. Measurements of SAXS signal during TATB detonation using synchrotron radiation[C]//Proceedings of the 14th International Detonation Symposium, Coeur d'Alene, Idaho, 2010: 28-33.
- [80] TEN K A. SAXS Measurement and Dynamics of Condensed carbon growth at detonation of condensed high explosives[J]. *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures*, 2012, 20(4-7): 587-593.
- [81] RUBTSOV I A, TEN K A, PRUUEL E R, et al. Study of the dynamics of nanoparticle sizes in trinitrotoluene detonation using the VEPP-4M synchrotron radiation[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2016, 774(1): 012071.
- [82] RUBTSOV I A, TEN K A, PRUUEL E R, et al. Methods to restore the dynamics of carbon condensation during the detonation of high explosives[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, 1147(1): 012038.
- [83] WATKINS E B, VELIZHANIN K A, DATTELBAUM D M, et al. Evolution of carbon clusters in the detonation products of the triaminotrinitrobenzene (TATB)-based explosive PBX 9502[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2017, 121(41): 23129-23140.
- [84] KLEIN J M, VELIZHANIN K A, DATTELBAUM D, et al. Carbon particle size distributions in the detonation products of PBX 9502[J]. *AIP Conference Proceedings*, 2024, 3066(1): 450004.

- [85] A shot like no other [J/OL]. *Science & Technology Review*, 2022, January/February: 16-19 [2025-05-25]. <https://str.llnl.gov/past-issues/januaryfebruary-2022/shot-no-other>.
- [86] CLARKE S M, SMITH R F, SODERLIND S, et al. Diffraction Measurement of Reaction Products in Shock Compressed TATB on the NIF[R]. Lawrence Livermore National Laboratory Report: LLNL-TR-870437, 2024.
- [87] XI T, ZHOU W, XIN J, et al. Real-time X-ray diffraction measurement on laser shock-loaded hexanitrostilbene (HNS) [J]. *Energetic Materials Frontiers*, 2024, 5(3):224-231.
- [88] WILLEY T M, CHAMPLEY K, HODGIN R. X-ray imaging and 3D reconstruction of in-flight exploding foil initiator flyers [J]. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119: 235901.
- [89] SANCHEZ N J, JENSEN B J, RAMOS K J, et al. Dynamic Initiator Experiments using IMPULSE (Impact System for Ultrafast Synchrotron Experiments) at the Advanced Photon Source[R]. Los Alamos National Laboratory Report:LA-UR-16-20261,2016.
- [90] CHU G B, WANG Y, YAN Y H, et al. Dynamic flyer in barrel imaging via high intensity short-pulse laser[J]. *Optics Express*, 2024, 32(6):9602-9609.
- [91] 黄辉, 大科学装置在含能材料研究中的应用[R]. 特种材料资源化与绿色处置技术创新中心成立与揭牌大会暨含能材料军民融合创新发展论坛, 江苏南京, 2024-3-30.  
HUANG Hui, Application of Large Scientific Devices in the Research of Energetic Materials[R]. Inauguration Ceremony of the Special Material Resource Recycling and Green Disposal Technology Innovation Center and Forum on Civil-Military Integration Innovation Development of Energetic Materials, Nanjing, Jiangsu, March 30, 2024.
- [92] KUMAR G, VANGESSEL F G, MUNDAY L B, et al. 3-Phonon scattering pathways for vibrational energy transfer in crystalline RDX[J]. *J Phys Chem A*, 2021, 125: 7723.
- [93] CHU G, XI T, WANG S, et al. Recent progress in research on the dynamic process of high-energy explosives through pump-probe experiments at high-intensity laser facilities[J]. *Energetic Materials Frontiers*, 2023, 4(3):169-177.
- [94] MCGRANE S D. High Energy-Density Materials with Fast Energy Release: Molecular Scale Shock Response of Explosives [R]. DTRA Basic Research Final Report: LA-UR-12-25339, 2012.
- [95] MCGRANE S, BOWLAN P, POWELL M, et al. Broadband mid-infrared measurements for shock-induced chemistry [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2018, 1979(1):130004.
- [96] POWELL M S, SAKANO M N, CAWKWELL M J, et al. Insight into the chemistry of PETN under shock compression through ultrafast broadband mid-infrared absorption spectroscopy [J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2020, 124(35):7031-7046.
- [97] POWELL M S, MOORE D S, MCGRANE S D. Insight into the chemistry of TNT during shock compression through ultrafast absorption spectroscopies [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2021, 154(5): 054201.
- [98] CHU G, SHUI M, XIONG Y, et al. Investigation of ultrafast excited state dynamics of 2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbene using femtosecond transient absorption spectroscopy[J]. *RSC Advance*, 2014, 4: 60382.
- [99] CHU G, LU F, XIN J, et al. Excited-state dynamics and electron transfer process of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene [J]. *RSC Advance*, 2016, 6: 55560.
- [100] CHU G, YANG Z, XI T, et al. Relaxed structure of typical nitro explosives in the excited state: Observation, implication and application[J]. *Chemical Physics Letters*, 2018, 698: 200-205.

## Application of Large Scientific Devices in the Research of Energetic Materials

HUANG Hui<sup>1</sup>, TIAN Jun-jun<sup>2</sup>

(1. China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China; 2. Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621999, China)

**Abstract:** The research on the multi-scale structure and stimulation dynamic response mechanism of energetic materials has experimental diagnosis problems due to their heterogeneous characteristics and cross-spatiotemporal evolution, which restricts the in-depth scientific understanding of their safety and energy release characteristics. Large scientific devices represented by neutron sources, synchrotron radiation sources and large-scale lasers provide key means to solve the above problems by virtue of deep penetration, extreme loading conditions and high spatiotemporal resolution. The research progress of large scientific devices at home and abroad was reviewed in respect of the multi-scale microstructure, grain residual stress, impact loading physical properties, mesostructure evolution, detonation reaction characteristics, and etc. of energetic materials. The neutron scattering technology has realized the non-destructive quantitative characterization of the micro-nano structure and residual stress in the interior of explosives through its deep penetration characteristics and light element sensitivity. High-brilliance X-ray phase contrast imaging and dynamic X-ray diffraction technology revealed the dynamic evolution process of defects under shock loading with sub-micron resolution, and captured the detonation wave front structure and the dynamic characteristic of nano-carbon products in situ. By combining high-intensity laser loading with ultrafast spectroscopy technology, the Hugoniot data under high pressure and initiation reaction mechanism of explosives were obtained. In the future, it is necessary to develop multi-field coupled loading diagnosis platforms, to further improve the spatiotemporal resolutions of the devices, and to penetrate the data fusion analysis of multiple devices, which provide technical support for the understanding of dynamic-static safety and reaction characteristics of explosives, and for the structural design and performance improvement of explosives.

**Key words:** energetic material; neutron source; large-scale laser facility; synchrotron radiation; high-brilliance X-ray

**CLC number:** TJ55;O64

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/CJEM2025138

**Grant support:** National Natural Science Foundation of China (Nos. 12272359, 22275177)

(责编: 姜梅)