

劳伦斯利弗莫尔化学与化工研究部的科研与学科建设

化学与化工研究部(CChED)的主要工作是为 LLNL 中心任务服务,同时尽可能扩大自身的知名度。CChED 确定了 5 个学科方向以提高其科技水平。每一学科有一带头人,负责本学科(包括能力、人才和技术提高等)的建设。

五个学科方向是:化学工程,计算化学,含能材料,有机合成及工艺和物理化学。下面作简要介绍:

(1) 化学工程涉及面很广,如国家点火设施(NIF);国防和核技术(DNT)中高能炸药和含能材料库存监测项目;在防止大规模杀伤性武器扩散、武器控制和国际安全(NAI)中,对来自外部威胁和能力进行评估等。其工作重点是:为 NIF 项目提供相关技术支撑;含能材料项目支撑技术方面,开展弹药销毁方法研究和高能炸药相关技术的持续改进;参与 NAI 中防止大规模杀伤性武器扩散分析与计划(CAPS),通过资源和工业能力分析评估外国机构生产大规模杀伤性武器的能力。

(2) 计算化学在 CChED 化学材料学(CMS)中占有非常重要的地位。工作重点是:

- 含能材料计算化学——新型含能分子设计,对 N_{60} (N_{60} 结构与 C_{60} 类似,但分子内贮存了巨大的能量)给予了极大关注。此外,继续完善含能材料用计算工具 Cheetah code。
- 燃烧化学——运用新途径进行模拟以掌握内燃机点火、烟气形成及完全燃烧过程。
- 化学战剂的计算——建立了动力学模型,获得了大量化学战剂的代用品来模拟真实化学毒剂沙林的反应性,提高了模拟化学战的能力。

(3) 对于 CChED 来说,有关含能材料的研究无疑是非常重要的科研任务。除前面提到的计算化学方面的研究,CChED 的研究工作还涉及含能材料性能与表征(化学、力学、热动力学、状态方程)和有机化学。含能材料中心(EMC)是世界级的实验研究平台,是 CChE 的基石。除了 EMC,300 号实验场拥有相当多的设备和实验手段,可以进行大型实验和炸药合成。

(4) 在化学合成和工艺方面,通过大量努力获得了许多新材料。

- 在气溶胶研究方面,制备出了用于 NIF 光学涂层材料和 DNT 用的超低密度材料等。
- 开展了有应用前景如显微生物传感器、废水处理用官能化噻类冠醚、材料老化和独特纳米材料研究用新分子的合成。
- 充分利用 CChED 各种独特优势。如利用气溶胶和含能材料研究能力制备了不同成分的纳米含能材料,使能量可变,能量释放可控。

(5) 物理化学历来是弄清材料相容性和化学光谱的基础。激光诱导化学、普通光化学、数据处理、分子动力学也是能力建设的关键。CChED 的物理化学家致力于武器材料相容性和老化研究,含能材料分析测试,研究 NIF 光学损伤机理,NIF 和 ICF 目标设计和生产,光谱在 NAI 中应用研究。

(舒远杰、黄辉供稿)