

# 分子模拟与信息技术 带来含能材料研究的革命！

传统上，含能材料的开发多采用试错的实验筛选方法，消耗大量的时间和财力物力。随着计算机处理能力的不断提高以及科学理论不断发展，分子模拟及信息技术正被越来越广泛地应用于含能材料的研究。

## 分子模拟

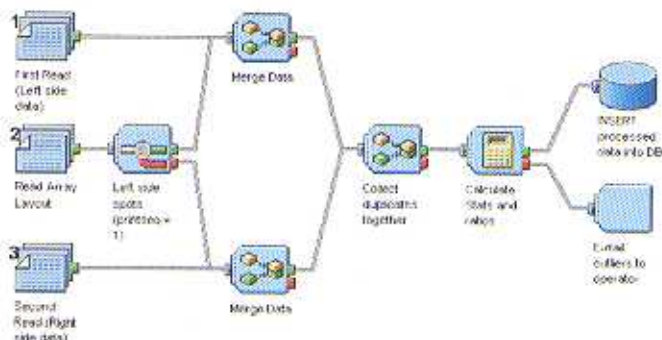
- 计算含能材料分子结构，揭示分子结构与材料性能（如能量、稳定性）的内在关系。
- 预测晶体多晶型，预测晶体生长外形和主生长面，预测晶体生长过程中溶剂和添加剂的影响，从而实现对晶体生长的控制。
- 定量研究含能材料的“结构-性质”相关关系。
- 研究含能材料配方中各组分之间的相互作用，为找到最优配方提供指导。

## 化学信息学技术

- 使用化学信息管理系统、组合化学管理软件、实验室信息管理系统等软件工具，实现对各种物理化学数据的收集、管理和挖掘；量身定做专有的含能材料或其他化学类数据库。
- 信息丰富详尽，检索快速灵活的化学信息数据库：
  - 提供近千万种有机化合物、200万种无机和金属有机化合物的结构数据，以及数以千万条相关的物理化学性质数据。
  - 近1400万种化学反应信息：通过结构式、反应式、反应条件、产率等进行检索。
  - 与计算化学软件结合使用，构建计算化学的模型，或验证计算得到的结果。

## 大规模研究和数据处理的流程控制系统

- 通过可配置的组件，以及图形化的操作界面，方便地建立数据处理流程（协议），并且能够将运行在不同平台上的第三方应用程序集成到数据处理流程中。
- 用户只需通过简单的网页界面便可调用这些协议来处理自己的数据，从而实现对各种已有资源的合理分配和有效利用



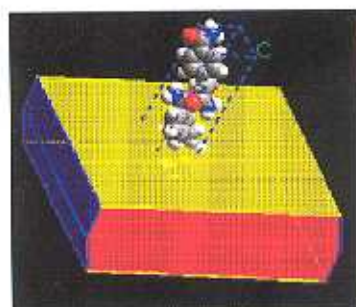
通过简单的图形化操作界面快速地建立复杂的数据分析挖掘和计算流程

# 分子模拟与信息技术 带来含能材料研究的革命!

## 应用课题1: 爆炸物晶形的预测与控制

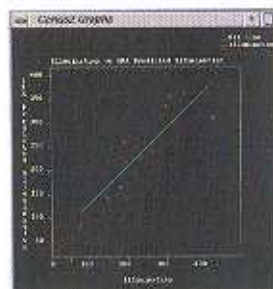
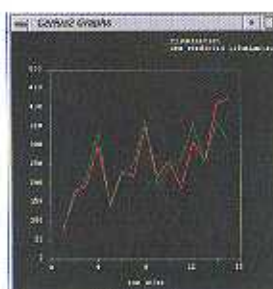
含能材料(RDX, HMX和PETN等)的起爆敏感度很大程度上受到晶体的尺寸、外形、表面粗糙程度、应变等条件的控制。J. H. ter Horst等人使用分子模拟软件研究原子的堆积方式的变化,以及添加剂的引入是如何改变晶体的生长外形的,最后发现RDX在不同溶剂中的结晶形貌有很大的差异,表明晶体生长机理受体系内杂质的影响而发生了变化。

模拟方法可以用来研究当晶体内部原子排列发生变化或者在晶体生长过程中添加剂和晶体表面发生作用的情况下,晶形如何变化



## 应用课题2: 优化火焰系统亮度的统计模型的研究

火焰系统的亮度与其配方有关,配方研究离不开模型的建立。分子模拟软件可用于预测火焰亮度,得到一个非线性方程,从而对整个火焰系统作进一步研究。由McLean和Anderson博士领导的美国军队研究小组联合位于华盛顿州的Hanford实验室统计分析组使用分子模拟软件中的遗传算法研究了不同发光材料的混合物的浓度对火焰亮度的影响。



▲ 这两组图是以不同方式对数据集进行观察的结果,独立变量(四个主元素)以及由此而得到的伪组元 $X^1 \times X^2$ ,即协同对抗项,归结至三个互不相关且相互垂直的轴上,然后再将数据点绘制在此空间中,这样绘制的效果就是按照明值来显示数据点,以便用户能够识别出这些数据之中存在的可能规律。

## 应用课题3: 含能材料在介观层次上的性质模拟

早在20世纪50年代,人们就意识到组成不均匀的炸药内部的热点决定了炸药的显初性质。早期对热点初始状态的模拟在很大程度上受到了计算机资源的限制。随着现在计算机运算能力突飞猛进的发展,在技术上已经可以完全通过计算机模拟手段来解决热点的初始状态。塑性炸药分子,例如PBX-9501的分子颗粒在 $100\mu\text{m}$ 左右,用传统的分子模拟方法无法模拟由此颗粒所构成的热点现象,但可以采用分子模拟软件中的介观模拟方法研究炸药分子颗粒和粘合剂分子之间的相互作用方法和类型。从下图可以看出,在炸药颗粒之间存在有亚颗粒尺寸的空穴,当受到冲击作用时,炸药中的空穴受到冲击绝热压缩可形成热点。当这些局部点上集中的能量使其温度达到高于炸药起爆点的温度时,炸药的爆炸就从这些点开始被激发并扩大,直到使全部炸药发生爆炸。通过对塑性炸药中空穴比例进行分析,就有可能对炸药的感度作出定量化判断。



介观模拟显示的炸药颗粒体积比为21%和44%时塑性炸药中炸药颗粒和粘合剂的分布情况(粘合剂分子未显示)