

关于炸药分子设计的几点看法

当前,分子设计已成为研发新材料的重要手段。在炸药领域事先的分子设计已变得不可或缺,此可谓炸药分子设计。本文想对炸药分子设计提出几点看法,以共同促进炸药分子设计的研究。

一、拓展炸药分子设计的内涵

我以为凡是在分子层次对炸药结构构造和结构与性能的预估都是炸药分子设计的范畴。如图1所示,以TATB为例,草拟了一张在分子层次开展炸药计算研究的工作图(当然没有包括全部的研究内容)。从图1可以看出,我们不仅可以开展单分子的相关研究,也可以开展晶体和表界面的相关研究。同时,这也表明,在目前技术水平上,我们仅进行单个的分子设计是不够的,还要开展晶体设计和表界面设计。我们可以经过事先的高通量的结构构造与计算筛选(目前,我们正在编写这样的软件),再对有前途的分子进行结构精化与性能精确预估,可大大提高目标物设计的效率。

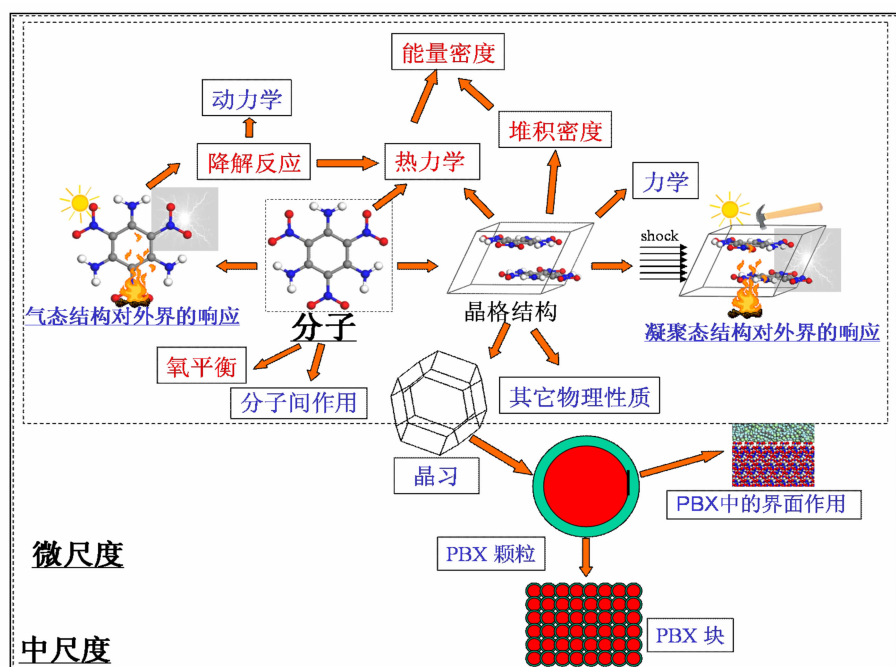


图1 在分子尺度上可开展的炸药研究工作

二、增加能量的本质

目前,人们针对分子设计新型高能量炸药提出了一些新概念,如高势能结构,高张力能结构、高储能结构等。其实,这些新概念都有一个共同的本质——增加反应热(爆热),这种能量的增加实际上是靠削弱反应物的键能实现的。从化学热力学可以知道,反应热(等压条件下为反应焓变)是 $\Delta H = \sum E_{\text{pro}} - \sum E_{\text{reac}}$,所以,我们要注意提到的高势能结构、高张力能结构和高储能结构的本质就是一个键能被削弱而能高放热的结构。此外,要注意的是,我们预估炸药的爆轰性能时直接需要的是反应热(爆热),而这些概念对应的能量并不能直接而准确地反映炸药的能量特性。

三、能量-安全性矛盾可以缓解吗

本人认为,在很大程度上,能量决定于分子的热力学特性,而安全性取决于具体的反应路径。因此,要缓解能量与安全性的矛盾,就要在反应路径上下功夫,例如,增强分子中的最弱键,降低外界刺激能量转换成体系能量的效率等。笼统地将,传统的 CHON 炸药体系的能量-安全性矛盾是固有而不可改变的,但是,我们若从上述两个方面着手深入研究,这个矛盾是可以缓解的,有时还有不小的空间。

张朝阳

中国工程物理研究院化工材料研究所
e-mail: chaoyangzhang@caep.cn