



## 含能材料研发的新模式——含能材料基因组研究计划(EMGI)

### 1 EMGI 的内涵与重要性

先进材料是高端制造、信息网络、人类福祉和国家安全等几乎所有现代工业部门创新驱动发展的重要基石。为推动先进材料的发展,2011年6月美国总统奥巴马签署了由美国科学技术顾问委员会倡导的“Materials Genome Initiative(MGI)”科技白皮书(*Materials Genome Initiative for Global Competitiveness*[EB/OL]. [http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials\\_genome\\_initiative\\_final.pdf](http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative_final.pdf))。作为重新振兴美国先进制造业计划的一部分,MGI旨在通过集成理论、计算、实验和数据库手段,将新材料的发现设计、合成制备到服役应用的整个开发周期从目前的平均约20年降低一半,而且成本更低廉。毫无疑问,该项计划如果成功实现,那么将全面加快现代工业发展进程。

含能材料(EM)是国防和民生的重要材料,采用MGI模式发展EM,必将大幅度提高EM研制效率,造福社会。这就是含能材料基因工程(EMGI)。含能材料基因(EMG)是决定含能材料宏观性能和行为的基本微观结构因子及它们之间的内在关联;EMGI就是发现决定含能材料性能的“基因组”,并以此设计、合成新型含能材料。EMGI强调借助理论的指导,充分发挥数据库、计算和实验的交叉作用并加强融合。其突出特点是把各种数据入库并进行管理,通过多重迭代,形成EM的大数据,获得材料基因(MG);同时通过理论建模计算预估,再通过实验技术的验证,大幅度提高含能材料的制备效率。具体来讲,EMG可包括原子、原子团、分子、晶体、晶体/晶体表面、晶体缺陷、相关物、晶体/相关物表面等,这些可作为今后研究EMG的切入点。例如,低感含能材料具有的EMG是在分子结构上为平面共轭结构、较强分子内氢键、键离解能大;而在晶体结构上,应该具有分子间氢键协助的 $\pi$ - $\pi$ 堆积。(Ma Y, Zhang C, et al. *Cryst. Growth Des.*, 2014, 14, 6101;4703)事实上,寻求EMG并非是一件很容易的事,它必须建立在大量的数据的基础之上。

EMGI的研究意义在于:(1)EMGI反映了含能材料科学研究的本质。科学的本质在于认识物质世界,而EMGI正是从科学上寻求决定含能材料的微观结构及这些结构间的关联;(2)EMGI将改变含能材料的研发模式。EMGI将含能材料的数据库、计算与实验高度融合,改变传统的试错法研究模式为按需设计计算合成模拟,研发效率将大大提高;(3)EMGI将改变传统的封闭观念,以更为开放的心态开展相关研究,合作的大数据时代让人们共赢。

含能材料自中国发明以来已有一千多年的历史,经历了黑火药时期、近代含能材料时期和现代含能材料时期。特别是近一百多年来,含能材料得到了长足发展,品种日益增加,从普通硝基化合物(代表为TNT)到氮杂环状硝基化合物(代表为RDX、HMX)再到笼形化合物(代表为CL-20、八硝基立方烷),能量逐步提高。结构上,除了传统的CHON中性分子组成的晶体外,又出现了含能共晶(Bolton, O.; Matzger, A. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 8960)、含能离子盐(Zhang, J.;

Shreeve, et al. *J. M. J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137, 1697) 和含能金属有机框架(EMOF)(Li, S.; Pang, S, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 14031)等新结构,丰富了含能材料的组成、结构与性能。然而,含能材料的发展却存在如发展速度较缓慢、组成结构较单一、难以协调能量与感度间的固有矛盾和贮能释能已接近极限等问题。借鉴MGI的模式,即,通过实施EMGI,有望实现EM的快速发展。从MGI的本质来看,发展EMGI是可能的。MGI强调用高通量并行迭代替代传统试错法中的多次顺序迭代,逐步由"经验指导实验"向"理论预测、实验验证"的材料研究新模式转变,最终实现材料"按需设计"。在此过程中,实验、计算和数据库高度集成,跨领域的信息也高度集成。在前人研究的基础上,EM研究也积累了一些EMGI的基础,例如:(1)含能材料也积累了大量数据,这些数据包括实验与理论计算,基本结构,物理、化学、力学、老化行为及服役行为多个方面;(2)含能材料设计合成已深入人心,并积累了大量的经验。采用数据、模拟计算对待合成的新化合物进行结构性能预估已发展到一定的水平,在新材料的合成上发挥了重要作用;(3)高通量的实验合成在含能材料制备上已得到应用。含能化合物取代合成、含能共晶、含能离子盐都是实现批量合成的例子;(4)多尺度的检测手段为寻找EMG奠定了实验基础。

但是,我们还需加快EMGI计划,这主要是因为:(1)含能材料是关系到国计民生的重要材料;(2)在含能材料数据库方面,数据的积累与开放程度还远远不够;(3)尚缺乏系统的含能材料设计理论方法和程序;(4)高通量的制备方法处于起步阶段;(5)含能材料多尺度与高通量检测还处于低级阶段,难以确定影响宏观性能的微观结构;(6)开放合作的氛围还未形成。

## 2 EMGI的发展设想

EMGI的中长期发展目标是实现通过理论计算和数字模拟完成先进含能材料的"按需设计"和全程数字化制造。现阶段EMGI的发展目标是构建含能材料创新基础设施,包括高通量材料计算平台、高通量材料制备与检测平台和材料数据库。将这些基础设施与现有的集成计算材料工程无缝衔接,实现多学科交叉和融合,从而加速含能材料从发现到应用的进程。在此基础上,设计合成出性能优异的含能材料。

为实现上述发展目标,将采取以下具体措施,包括:(1)发展含能材料计算工具和方法,减少耗时费力的实验,加快含能材料设计和筛选;(2)发展高通量含能材料实验工具,对候选含能材料进行筛选和验证;(3)发展和完善含能材料数据库/信息学工具,有效管理含能材料从发现到应用全过程数据链;(4)改革含能材料界的封闭型工作方式,培育开放、协作的新型合作模式。

MGI平台包括数据库、设计与计算、制备与表征和服役与失效评估四个部分。

(1) EM数据库。收集整理含能材料相关基础数据,制定含能材料数据标准规范;选择数据库设计方法与工具,开展数据库模型设计;应用软件工程技术,进行数据库系统及管理平台详细设计与开发。

(2) EM设计与计算。在结构上,包含含能材料的多尺度多层次结构:分子结构、晶体结构、表面界面结构和部件几何结构等;在性能上,包含含能材料的能量、安全性、力学、相容性和老化性能等;在计算方法上,包含分子模拟、元胞模拟和基于数值的计算。另外,考虑外界刺激条件如热力

等,同时,必要的实验验证也是计算要考虑的内容。面向 EMGI 和国家先进武器装备需求的含能材料高性能的计算主要包括如下学科方向:含能材料科学认知,包括组成、结构、性能间的关系及规律,加载条件下的演化机制与规律等;含能材料设计,包括含能分子工程、含能晶体工程、含能相关物设计、混合炸药设计等;含能材料工程应用设计,包括安全弹药设计,加工、制备工艺设计等。通过上述研究,形成包含计算含能材料学理论与方法、含能材料知识库和硬软件的含能材料基因科学与工程的高性能计算研究平台。

(3)EM 制备与表征。基于 EMGI 模式的 EM 制备与表征具有多尺度、“一条龙”和高通量的高效特点。在 EM 的制备上,包括三个层次:含能分子的创制、含能晶体的控制制备和混合炸药的制备。在设计与计算的基础上,如选择四工作区平台开展工作,而结晶和混合炸药的制备也考虑并行或批量实验。针对含能分子、含能晶体、含能复合材料和 PBX 炸药,建立分析技术和方法,鉴定分子结构,建立晶相、表界面、成分、热性能、力学和安全性分析标准和方法,为含能材料的制备提供高效可靠地分析保障。

(4)EM 服役及老化行为。在含能材料老化与相容性研究中,在材料尺度下进行化学反应性、热力学、分子降解机制和微观结构研究,掌握组份材料的微观变化机制;在试件和部件尺度下,重点开展老化试验技术研究,界面性能测试、质量测试、密度测试、力学性能测试、释气种类和组份测试,考察宏观性能变化,研究老化相容性过程中试件到部件的尺寸效应,在实验上提高老化相容性研究效率;建立数值模型,实现微观变化机制到宏观性能间的有效关联。

此外,EMGI 的理论及其与数据库、计算和实验的协同发展。EMGI 理论的发展与数据库、计算与实验发展紧密相关:理论是数据库、计算与实验各方法的基础与联系纽带,同时也是指导新型含能材料研发的准则。EMGI 理论发展要重视如下几点:(1)发展新型含能材料数据库框架理论,指导构建更为高效的数据库框架;(2)发展完善计算含能材料学理论,指导提高计算效率和设计效率;(3)发展含能材料合成制备及检测方法新理论,指导提高新型含能材料的制备效率和检测效率;(4)加强理论在各个环节的纽带作用,指导实现 EMGI 的高效作用。

### 3 结 语

采用基因组的思路发展含能材料,有望带来新的机遇,可能在含能共晶与含能离子盐方面获得突破。更重要的是,EMGI 将大大改变人们研发 EM 的文化理念,更加开放协同,EM 的制备效率大大提高。

张朝阳

中国工程物理研究院化工材料研究所含能材料基因科学研究中心  
e-mail: chaoyangzhang@caep.cn

NSAF 联合基金重点项目(U1530262)

感谢中国工程物理研究院化工材料研究所赵川德、邓川和鲁洪三位同志提供相关文稿。