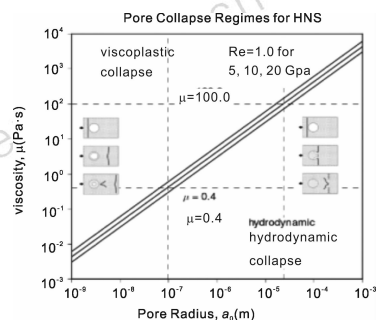


美国 Sandia 实验室利用多尺度计算模拟研究了多孔 HNS 的冲击响应特性

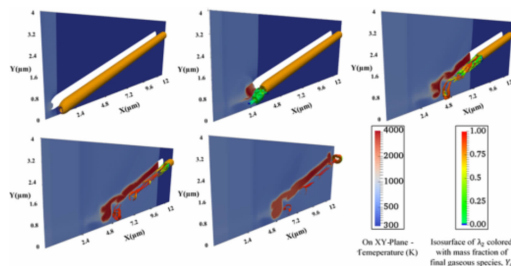
冲击波与含能材料中孔洞等微观缺陷的相互作用是引发爆轰反应的关键过程。美国 Sandia 国家实验室结合大尺度反应分子动力学和介观尺度热力学模拟研究了多孔 HNS 的冲击响应特性。与针对炸药爆轰性能的高速撞击模拟不同,该研究聚焦于低速撞击下炸药的安全性。模拟结果表明在不同冲击作用下 HNS 内部的孔道坍塌行为具有明显的差异。在小孔 ($<10^{-7}$ m) 和低冲击压作用下主要发生的是黏塑性孔道坍塌 (Viscoplastic Pore Collapse), 而在大孔 ($>10^{-5}$ m) 或者高冲击压作用下主要发生的是流体动力学坍塌 (Hydrodynamic Pore Collapse)。该研究对于理解多孔微结构对含能材料的爆轰和安全性能影响具有重要参考价值。

源自: Wod M A, Kittell D E, Yarrington C D, et al. Multiscale modeling of shock wave localization in porous energetic material. *Physical Review B*, 2018, 97: 014109.



美国爱荷华 (Iowa) 大学针对含能材料中孔洞坍塌和热点形成开展三维数值模拟

孔洞坍塌是含能材料中热点形成和反应触发的重要机制。目前有关孔洞坍塌的认识都是基于二维孔洞模拟,相比于二维模型,三维孔洞模型更接近含能材料中的实际结构。最近,美国爱荷华大学对 HMX 中球状、棒状、片状和椭球状四种孔洞在 9.5 GPa 和 1.5 ns 脉冲周期的冲击波作用下的孔洞坍塌行为模拟,发现三维孔洞比二维孔洞具有更高的热点密度和冲击波敏感度。在冲击波作用下,三维孔洞坍塌会产生复杂的三维斜压涡旋结构,热点形成主要发生在涡旋结构密集的地方,不同的孔洞状态会导致不同的孔洞坍塌行为和冲击波相应特性,复杂且高度扭曲的涡旋结构会产生更多的热点从而提高反应波阵面的增长速率。该研究进一步提升了对含能材料中孔洞坍塌规律的认识,有助于更深入了解热点形成与生长的物理过程。

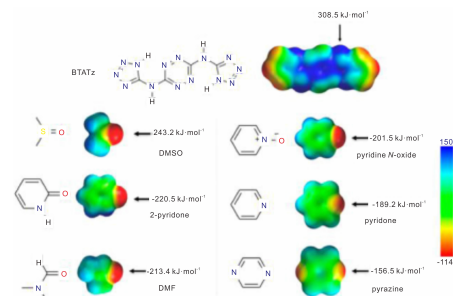


源自: Rai N K, Udaykumar H S. Three-dimensional simulations of void collapse in energetic materials. *Physical Review Fluids*, 2018, 3: 033201.

美国密西根大学报道了五种 BTATz 共晶

共晶技术是调节含能材料物理化学性质的重要手段之一。最近,美国密西根大学将共晶技术应用到高氮含能材料 BTATz 中,获得了五种新的 BTATz 共晶: BTATz-DMF, BTATz-pyridine N-oxide, BTATz-2-pyridone 和 BTATz-pyrazine。静电势分析表明选择具有配体分子表面带负电的基团可以与 BTATz 中桥氮上的氢形成氢键,从而有助于 BTATz 共晶的形成。对 BTATz-pyrazine 共晶的爆轰参数计算表明,其氧平衡、爆速和爆压 (-97.48%, $7015 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 17.35 GPa) 相比 BTATz (-64.47%, $8055 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 25.39 GPa) 有所下降,但是撞击感度 (大于 217 cm) 相比 BTATz (207 cm) 有所提高。

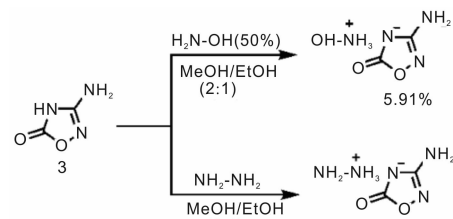
源自: Kent R V, Wiscons R A, Sharon P, et al. Cocrystal Engineering of a High Nitrogen Energetic Material. *Crystal Growth & Design*, 2018, 18: 219-224.



新加坡南洋理工大学合成了一类新型氧二氮杂戊环基钝感含能材料

基于氧二氮杂戊环的含能特性,可用来实现新型炸药分子的设计。最近,新加坡南洋理工大学通过一步法合成了 3-氨基-1,2,4(4H)-氧二氮杂戊烷-5-酮 (AOD), 并获得了 AOD 的羟氨盐 AOD-HyAm 和胍盐 AOD-Hy, 三者的密度分别为 $1.76 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $1.73 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 和 $1.64 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 生成热分别为 $-343.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-3}$, $-705.3 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-3}$ 和 $-407.9 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-3}$, 2 kg 落锤撞击感度均为 $>20 \text{ J}$, BAM 摩擦感度分别为 $>360 \text{ N}$, $>360 \text{ N}$ 和 192 N , 表明这三种化合物均属于钝感含能材料,可用于推进剂和发射药配方。

源自: Kumar A S, Sasidharan N, Ganguly R, et al. 3-Amino-1,2,4(4H)-oxadiazol-5-one (AOD) and its nitrogen-rich salts: a class of insensitive energetic materials. *New Journal of Chemistry*. 2018, 42: 1840-1844.



(中国工程物理研究院化工材料研究所含能材料高效表征团队 黄石亮 编译)