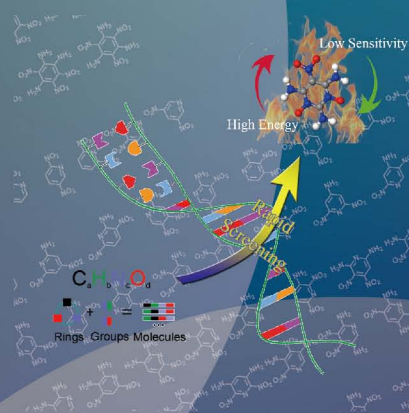
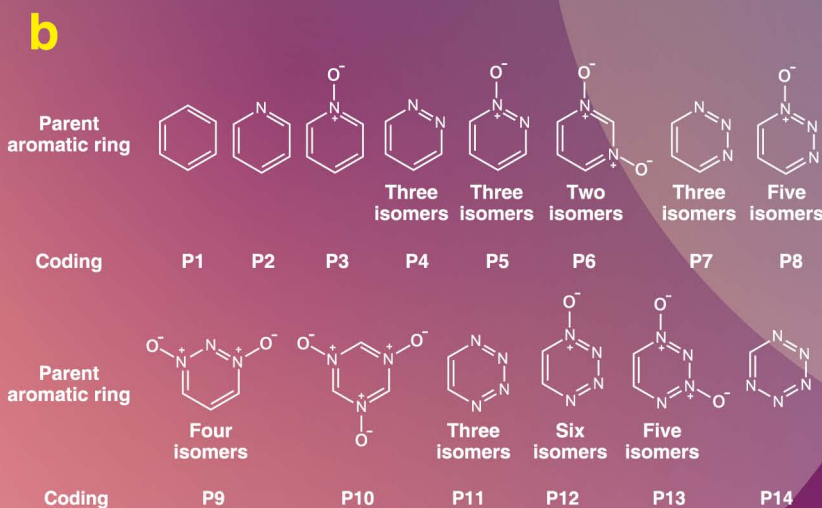
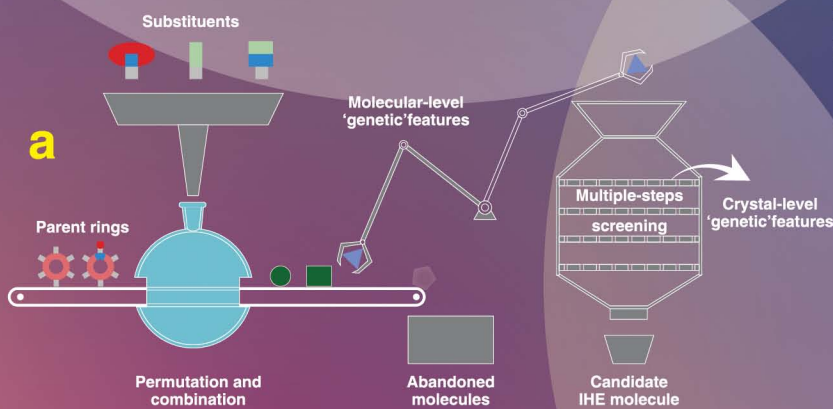


# 运用材料基因组方法 研发新型钝感高能单质炸药

**本刊编委** 张庆华研究员带领的化工材料研究所含能分子创制团队巧妙运用材料基因科学思想研发出一种新型钝感高能单质炸药（代号 ICM-102，即 2,4,6-三氨基-5-硝基嘧啶-1,3-二氧化物）。该成果在《自然》子刊—《自然·通讯》在线发表，这是国际上首次实现“含能材料基因科学”的研发新模式，能够有效加速新型高性能单质炸药的研发效率，将有效推动未来含能材料学科的发展。



开展钝感高能炸药“基因”特征提取、六元芳香母环和取代基结构片段库建立以及在自编 Java 脚本下实现计算机辅助的钝感高能炸药分子快速设计与筛选。



## ICM-102 与其他炸药物化性能比较

	ICM-102	TATB	HMX	LLM-105
爆压 /GPa	34.3 <sup>a</sup>	32.4 <sup>b</sup>	39.2 <sup>a</sup>	33.4 <sup>b</sup>
爆速 /m·s <sup>-1</sup>	9169 <sup>a</sup>	8114 <sup>b</sup>	9221 <sup>a</sup>	8560 <sup>b</sup>
撞感 /J	>60	>60	7.5	28.7
摩感 /N	>360	>360	120	>360
静电感度 /J	1.85	2.27	0.099	1.02

a: Explo5 计算      b: 实验外推值

筛选的新型钝感高能单质炸药 ICM-102 具有“类石墨烯”层状晶体结构，室温实测密度  $1.95 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  计算爆速超过  $9000 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ，对撞击、摩擦、静电等外界刺激钝感。同时，该炸药具有高热稳定、低成本、易规模合成等优点，是一个很有潜力的钝感高能炸药。

### ICM 化工材料研究所 | 含能分子创制团队



团队研究方向主要瞄准工程应用需求的靶心和亟需解决的技术难题，致力于探索新型高能低(钝)感单质炸药的设计与合成、绿色低碳熔铸炸药流动相的合成、含能离子液体火箭推进剂材料、以及新型含能骨架的构建方法学和含能基团定向引入方法学等方面的研究。目前团队拥有成员 20 名，包括：研究员 1 人，副研 1 人，助研 4 人，研实 2 人，博士后 4 人，研究生 6 人，研究助理 2 人。