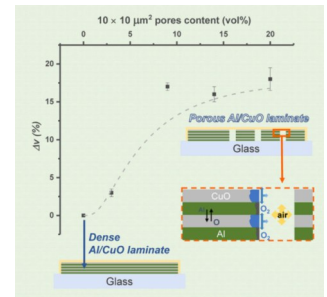


加州大学研究了 Al/CuO 纳米多孔铝热剂薄膜

加州大学 Michael R Zachariah 团队研究了多孔 Al/CuO 铝热剂,即纳米薄膜上分布有不同密度(体积分数 0~20%)充满空气的微米孔洞。通过高速摄像和高温测定研究了孔隙度对火焰传播速率的影响。结果表明 Al/CuO 纳米多层薄膜上的孔隙可使燃烧速率更快(在孔隙度为 20% 时燃烧速率可提高 18%),同时火焰温度保持不变。热传导是高密度(80% 理论密度)铝热剂的主要传热机制。孔隙存在情况下燃烧速率的提高主要是由于孔隙内的空气对流与可能发生的化学反应机制的改变,进而导致微米孔隙周围区域点火阈值降低。事实上,孔隙内的 O₂ 分子会扩散并与固体 Al 反应在孔隙内表面形成 Al₂O₃。孔隙内的反应机制以气相反应为主,而无孔隙时反应机制为 Al 与 O 在氧化铝壳层内扩散机制,因而 Al/CuO 纳米多孔铝热剂薄膜具有更低的点火温度。

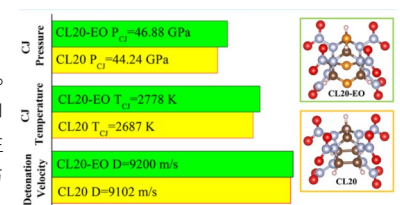
源自: Tao Wu, Baptiste Julien, Haiyang Wang, et al. Engineered Porosity-Induced Burn Rate Enhancement in Dense Al/CuO Nanothermites [J]. ACS Appl Energy Mater, 2022 (5): 3189-3198.



加州理工大学预测了一种氧平衡及爆轰性能优于 CL-20 的高能分子 CL-20-EO

CL-20 优良的能量特性使之成为高能量密度材料中的佼佼者,美中不足的是其负的氧平衡。加州理工大学 William A Goddard, III 团队预测,将醚键引入 CL-20 的 C—C 键后所形成的 CL-20-EO 更接近零氧平衡,可以在爆轰分解中均衡产生 CO₂ 和 H₂O,可在保持较好能量特性的同时减少富碳团簇和有害气体的产生。为验证其设想,他们通过 Reaxff 反应分子动力学与第一性原理分子动力学预测了 CL-20-EO 在 CJ 态的爆轰特性。经预测,相比 CL-20, CL-20-EO 将爆压与爆速分别提升了 6% 与 1.1%,根本原因就是 CL-20-EO 优良的氧平衡。当从 CJ 态扩展到常温常压状态后,不同于 CL-20 生成富碳团簇与有毒气体,CL-20-EO 仅生成无毒且完全氧化的气体产物。因此,CL-20-EO 有望成为一种绿色含能材料。本研究表明氧平衡对于传统含能材料的能量特性与产物毒性具有重要影响。

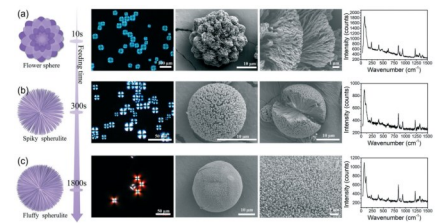
源自: Dezhou Guo, Sergey V Zybin, Andrew P Chafin, et al. Increasing Oxygen Balance Leads to Enhanced performance in Environmentally Acceptable High-Energy Density Materials: Predictions from First-Principles Molecular Dynamics Simulations [J]. ACS Appl Mater Interfaces, 2022 (14): 5257-5264.



中物院化材所构筑了具有可控多层次微纳结构的 HMX 多晶聚集体

具有微纳结构的含能材料通常表现出低感度与高稳定性,但在多尺度上的结构调控仍旧非常困难。中物院化材所李洪珍团队通过 PVP 聚合物诱导结晶方法构筑了具有可控微纳结构的 HMX 多晶聚集体。研究表明,聚集体的晶型及微结构特征与初始的过饱和度、PVP 浓度及给料速率密切相关。而且,聚集体的形貌与相组成可进行系统调控,通过简单改变 HMX 浓度就可将聚集体形貌从星形 δ 相改变到雪花状球晶 γ 相。较慢的给料速率可使球晶聚集体结构更为密实。进一步分析表明,反溶剂的优先吸附以及 PVP 与 HMX 间的强相互作用可改变溶液局域化学环境、降低过饱和度、提高诱导时间,进而调控 HMX 的分子组装路径。更为重要的是,球状 HMX 聚集体具有更低的撞击与摩擦感度。本项研究为设计与制备具有鲜明多尺度多层次结构及较低感度的多晶炸药聚集体提供了一条新的路径。

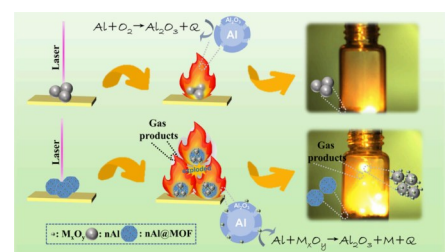
源自: Xin Zhou, Yan Ren, Hongzhen Li, et al. Polymer-directed crystallization of HMX to construct nano-/microstructured aggregates with tunable polymorph and microstructure [J]. Cryst Eng Comm, 2022 (24): 755-764.



天津大学制备了两种点火与燃烧性能优异的 nAl@MOF 纳米含能粒子

随着燃料和发动机技术的不断发展,液固燃料之间的界限也越来越模糊,因此也给新型固液两相燃料的发展带来了巨大的机遇与挑战。本项研究中天津大学邹吉军团队通过原位静电自组装方法制备了两种 nAl@MOF 纳米含能粒子,即 nAl@Zn-MOF 和 nAl@Co-MOF,并采用 TG-DSC, CO₂ 激光点火和等容燃烧实验表征了 nAl@MOF 的热性能、点火和燃烧性能。结果表明,相比纳米 Al 颗粒, nAl@Zn-MOF 和 nAl@Co-MOF 的初始放热温度分别降低约 60 °C 和 110 °C。此外, nAl@MOF (特别是 nAl@Zn-MOF-1 和 nAl@Co-MOF-1) 比 nAl 具有更短的点火延迟时间、更高的峰压与更快的升压速率。研究人员提出了 nAl@MOF 可能的燃烧机理,并发现通过调控界面反应和微爆反应可显著增强其燃烧过程。在纳米流体燃料的点火实验中发现, nAl@MOF 表现出双重特征,它可同时提高固相 nAl 颗粒与液相碳氢燃料的点火与燃烧性能。本项研究将 MOF 引入金属燃料来构建具有双重功能的含能粒子,增强了燃料的点火与燃烧性能,为先进空天燃料的设计提供了一种新的策略。

源自: Kang Xue, Huaiyu Li, Lun Pan, et al. Bifunctional core-shell nAl@MOF energetic particles with enhanced ignition and combustion performance [J]. Chemical Engineering Journal, 2022 (430): 132909.



(中国工程物理研究院化工材料研究所 牛亮亮 编译)