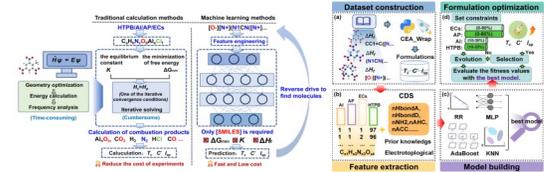


西北工业大学提出一种机器学习结合遗传算法的框架实现快速驱动高性能推进剂的发现

高性能固体推进剂设计往往依赖于组分生成焓(EOF)的高精度定量计算,但这一过程通常效率低、耗时长。为此,西北工业大学提出了一种融合机器学习(ML)与遗传算法(GA)的新型框架,用于加速固体推进剂的设计,仅以各组分的质量比例和化学配方为输入,即可实现推进剂能量特性的准确快速预测。基于所提出的框架,利用遗传算法识别出了三种配比极为接近最佳已报道配比的推进剂配方,从而验证了该框架在新型固体推进剂设计中的可靠性。通过高通量筛选,框架还从1000余种候选含能化合物(ECs)中筛选出7种具有应用前景的物质,其比冲(I_{sp})最高可提升至278 s。该研究展示了机器学习在固体推进剂能量特性预测中的潜在应用价值,并为推进剂配方的智能化设计提供了新方法。

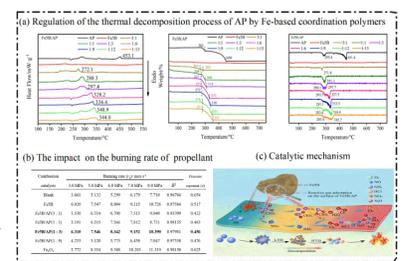
源自: Wang R H, Li Y, Zhang Q H, et al. Machine Learning-Driven Discovery of High-Performance Solid Propellants[J]. ACS Applied Energy Materials, 2025, 8: 6756-6767. <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c00962>.



国防科技大学合成新型Fe基配合物类燃速催化剂提高固体推进剂燃速

国防科技大学团队设计将AP引入具有纳米骨架结构的铁基配位聚合物中,成功合成了一系列纳米复合含能材料,对高压条件下催化反应机理进行了深入阐释,提出了燃烧性能调控策略,实现了AP催化分解过程的精准调控,研究发现,含Fe5B/AP纳米颗粒的推进剂燃速最高能够提升42%,且压强指数仅为0.422。该研究成果为提高固体推进剂燃速提供了新思路。

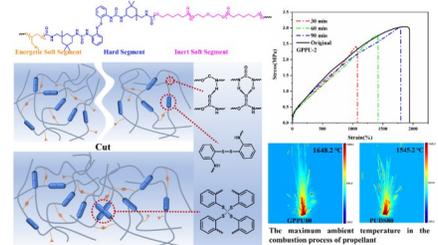
源自: Zhao Y, Zhou X, Ji H F, et al. Study on the regulation of thermal decomposition of ammonium perchlorate by energetic composites formed with Fe-based coordination polymers[J]. Advanced Powder Technology, 2025, 36: 104865. <https://doi.org/10.1016/j.apt.2025.104865>.



中北大学合成新型GAP/PCL共聚型含能自修复粘结剂

固体推进剂的能量密度、力学性能与安全性能在一定程度上依赖于粘结剂的结构设计。中北大学采用嵌段共聚方法,以聚己内酯(PCL)与含能预聚物聚叠氮缩水甘油醚(GAP)为软段,引入不对称脂环与弯曲联苯结构构建硬段,合成了一系列含能自修复粘结剂(GPPU)。其中,GPPU-2展现出优异的综合性能,其韧性可达 $38.95 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$,并在 80°C 条件下依托动态二硫键与氢键的协同作用,可在90 min内恢复86%的初始韧性。以GPPU-2为基体制备的复合推进剂,在 80°C 下修复24 h,其拉伸强度自修复率达88.22%,可有效抑制裂纹扩展。同时,该推进剂展现出优良的燃烧性能与高能量释放特性,显著优于纯PCL自修复粘结剂体系。该研究为构建高性能自修复含能粘结剂及新一代固体推进剂提供了新思路。

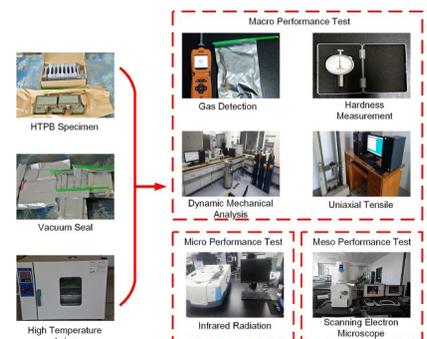
源自: Qiu M J, Geng Z, Cheng W J, et al. Construction of a novel GAP/PCL energetic self-healing blend adhesive system for propellants based on the synergistic effect of hydrogen bond reorganization and disulfide bond exchange reactions[J]. European Polymer Journal 2025, 229: 113860. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2025.113860>.



海军航空大学基于实验测量与分子动力学研究了复合固体推进剂的热老化性能

作为一种复杂的混合体系,高能复合材料的老化机制涉及各组分自身老化、组分间相互作用以及微观结构和热力学性能的转变。仅研究单一组分或性能参数对于阐释老化过程认知复杂性具有很大局限性,难以揭示理化性质转变的基本原理,因此只能作为经验总结应用。鉴于此,海军航空大学综合运用数值分析和实验检测,从复合体系的粘合剂老化、增塑剂迁移、键合界面脱粘及力学性能转变四个方面,探究了微观分子构象演变与宏观老化性能变化规律。分子模拟与热老化实验观测结果具有良好一致性,表明以TDI为固化剂的HTPB推进剂基本不存在后固化过程。在老化初期,断链是主要过程;而在老化后期,氧化交联成为主导过程。氧化交联使粘合剂体系的均方回转半径和玻璃化转变温度增大,降低了径向分布函数峰值,揭示了推进剂硬度变化及 $\text{C}=\text{C}$ 双键与 $\text{C}=\text{O}$ 双键含量变化的成因。而链降解则增加了极性基团数量,增强了分子间极性,使溶解度参数降低,同时提高了混合体系的自由体积分数和癸二酸二辛酯扩散系数。这导致HTPB推进剂损耗角正切值从 0.43° 增至 0.44° ,玻璃化转变温度从203.3 K降至202.0 K。AP/HTPB和AI/HTPB界面结合能呈现先升高后降低的趋势,与结合界面的SEM图像观测结果一致。结合能与粘合剂体系力学性能的协同作用共同促进了老化推进剂应力-应变曲线的形态转变。

源自: Li Y, Li G, Kong L, et al. Experimental measurement and molecular dynamics simulation analysis of thermal aging performance in composite solid propellants[J]. Polymer Degradation and Stability, 2024, 225: 110812. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2024.110812>.

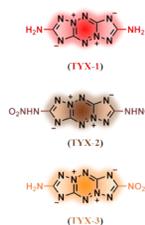


西安近代化学研究所报道TYX系列含能材料突破“高能-低感-耐热”协同瓶颈

西安近代化学研究所联合南京理工大学、西北工业大学及甘肃银光集团团队,突破高能量密度、低感度与高耐热性难以协同的国际难题。团队采用高氮骨架分子设计策略,构建出新型富氮骨架,并据此研制出TYX系列含能材料。该材料通过富氮结构与精准分子构型控制,在单一骨架体系内实现了能量、安全与热稳定性三大关键性能的协同优化与显著提升,其简洁高效的合成路径(仅2~3步)为工程化应用奠定重要基础。

源自:Bojun Tan, Jian Su, Jing Zhang, et al. A Bistriazolotetrazine Zwitterionic Architecture: Mitigating the Pervasive Energy-Stability Antagonism in Bistable Energetic Matrices [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2025, 13, 25103–25109.

Bojun Tan, Xiong Yang, Jinkang Dou, et al. Unprecedented Energetic Zwitterion Integrating Thermal Stability, High Energy Density and Low Sensitivity: Overcoming Performance Trade-offs in Conventional Energetic Materials. *Defence Technology*, 2025, <https://doi.org/10.1016/j.dt.2025.05.024>.



超高耐热含能材料TYX-1: 超高含氮量(73%), 热分解温度刷新世界纪录(峰温达470-480°C), 首次实现高能、钝感与超高温耐热的完美协同

高能低感含能材料TYX-2: 实测密度2.04 g/cm³, 理论爆速9.9 km/s, 摩擦感度和撞击感度显著低于CL-20

耐热高能低感含能材料TYX-3: 实测密度1.99 g/cm³, 目前热分解峰温350-400°C区间内综合性能最优的耐热低感含能材料, 理论爆速9.3 km/s

美国爱达荷大学报道了调控硝化和稳定化以实现高能量输出的新策略

以高硝化物作为氧化剂取代高氯酸铵(AP)是当前学术和工业界一项具有挑战性的任务。爱达荷大学报道了通过对3,5-二甲苯-1H-吡唑进行分步硝化,成功合成了首个与七个硝基结合的吡唑分子,即4-硝基-3,5-双(三硝基甲基)-1H-吡唑(4)。该化合物具有优异的物化性能,其氧平衡为 $OB_{CO_2}=13.62\%$,理论密度在100 K时达 $2.04\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。其爆轰性能($Dv=8745\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $p=34.8\text{ GPa}$)与传统炸药RDX的爆轰性能($Dv=8836\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $p=34.2\text{ GPa}$)相当。该化合物有望取代AP作为新型氧化剂应用于复合固体推进剂配方中,并为探索其他吡唑官能团化反应提供了新思路。

源自:Singh J, Staples R J, Shreeve J M. Manipulating nitration and stabilization to achieve high energy[J]. *Science Advances*, 2023, 9(46). <https://doi.org/10.1126/sciadv.adk3754>.

