

文章编号: 1006-9941(2012)03-0371-09

## 含能材料机械化学研究进展

李铁成, 杨利, 李志敏, 张同来

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

**摘要:** 概述了机械化学的起源、特点及其在含能材料研究领域中的应用与发展状况。含能材料机械化学可分为实验研究与理论研究。本文重点汇集和评述了国内外在含能材料机械化学理论研究领域的进展, 分析了含能材料的爆炸始发机制、结构与性能的关系以及感度性能理论预测等方面的研究成果, 展望了机械化学在含能材料领域的发展前景。附参考文献 70 篇。

**关键词:** 含能材料; 机械化学; 实验研究; 理论研究

**中图分类号:** TJ55; O64

**文献标识码:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.03.023

### 1 引言

含能材料是具有高能量和高危险性的一类物质。按其组成可分为单体含能材料, 如: 梯恩梯、黑索今、奥克托今; 以及复合含能材料, 如: 混合炸药、推进剂、火药和烟火药<sup>[1]</sup>。它们被广泛应用于国防工业及民用爆破行业领域<sup>[2]</sup>。含能材料虽然应用广泛, 但由于对外界刺激比较敏感且威力巨大, 因而存在一定的危险, 一旦使用不当, 将会造成人身和财产的重大损失。因此, 含能材料的稳定性与安全性必须引起我们的重视。

要保证含能材料的稳定及安全使用, 首先必须要了解其爆炸的引发机制及导致爆炸发生的因素, 只有这样才能制定出合理的防范措施, 避免含能材料在存放和使用过程当中发生险情, 从而更好地保障人民的生命财产安全。含能材料的感度是评定含能材料稳定性与安全性的主要标准, 而感度一般要靠实验来测定。然而, 实验测定不但需要相关的仪器设备, 还需要耗费大量的人力、物力和财力, 有时还很不安全。而且, 对一些尚未合成或处于设计和评估中的研究对象来说, 实验测定根本无法实现。机械化学的思想、量子化学理论方法的完善以及计算机技术的突飞猛进, 为解决

上述问题提供了新的思路、方法与手段。例如, 完全可以通过量子化学的理论计算来探讨含能材料结构和性能的关系并与含能材料的感度相关联, 这无论是对理论研究还是实际应用都具有非常重要的意义<sup>[3]</sup>。本文主要对国内外含能材料的机械化学研究现状进行了总结和评述。

### 2 机械化学及其应用和发展概述

根据诱发化学反应发生所需能量的类型, 可将整个化学学科分为热化学、光化学、电化学、磁化学、声学、激光化学以及辐射化学等分支学科。显然, 机械能作为一种普遍存在的能量形式也可以作为诱发化学反应发生的因素。1919年, 德国化学家奥斯特瓦尔德从完善化学学科分类的角度首次提出了“机械化学”(mechanochemistry)的概念<sup>[4]</sup>。自诞生到现在的将近一个世纪的时间里, 机械化学已经在众多研究领域获得了广泛应用, 这其中也包括了对保障国家安全至关重要的含能材料研究领域。机械化学之所以能得到如此广泛应用, 主要得益于它独特的学科特点。

随着科学技术的不断发展和科学问题复杂性的不断提高, 各学科之间的交叉与渗透愈演愈烈, 新的交叉学科层出不穷, 学科间的边缘领域自然而然地成为科学家们争相进行科学研究的热点, 在这些研究领域中已经产生出不少举世瞩目的科研成果与科学发现, 交叉学科也因此被公认为是创新的源泉和科学技术的生长点。机械化学正是这样一门充满活力的新兴交叉学

收稿日期: 2011-05-25; 修回日期: 2011-07-20

基金项目: 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室重点资助项目(No. ZDKT10-01b, ZDKT08-01)

作者简介: 李铁成(1985-), 男, 硕士研究生, 主要从事含能材料的计算与模拟研究。e-mail: milanmilan1985@163.com

通讯联系人: 杨利(1972-), 女, 教授, 主要从事含能材料的合成和性能研究。e-mail: yanglibit@bit.edu.cn

科,它融合了无机化学、有机化学、物理化学、结构化学、固体化学、合成化学、材料科学和机械力学等众多学科的特点,因此可以说机械化学从本质上讲具有一定的复杂性。也正是这种本质上的复杂性使得机械化学拥有了许多常规化学学科所不具备的特殊性,这主要包括:①一些利用热能难以顺利进行的化学反应,往往可以通过机械力的作用得以激发;②同一种物质的机械化学反应与热化学反应的热力学及动力学性质往往不尽相同;③外界环境因素对机械化学过程的影响一般要小于其对普通热化学反应的影响<sup>[5]</sup>。由于以上特殊性,机械化学已经被人们广泛地应用于化学化工、材料加工、冶金和矿物加工以及环境保护等领域,主要包括:特定无机材料及有机材料(包括纳米材料)的合成、功能性粉体的制备与合成、粉体材料的表面改性及活化、合金的机械合成、复杂矿物处理和废弃物、有毒物处理等<sup>[6-8]</sup>。

### 3 含能材料的机械化学

#### 3.1 含能材料机械化学研究分类

在含能材料研究领域,机械化学发挥着越来越重要的作用,逐渐引起人们的关注。但多年以来,国内对含能材料机械化学研究的划分还不是十分清楚,一谈到机械化学人们首先想到的便是利用球磨机等设备来对材料进行机械合成或机械加工。而我们认为,含能材料的机械化学研究应分为两大类,第一类研究主要是利用特殊的实验设备与实验方法进行含能材料的机械制备与机械加工,从而得到具有特定功能的含能材料,其研究对象和产品往往是实物。根据其特点可将其称之为含能材料的实验机械化学研究;另一类研究主要是利用量子化学、结构化学、材料化学和机械力学等学科的研究方法对含能材料进行宏观与微观层次的理论研究,探索含能材料的微观结构、宏观性质以及所受外界机械作用之间的内在联系和相互作用机制,其研究对象往往是科学家们构建的一些理论模型且研究结论一般比较抽象。根据这些特点可将其称之为含能材料的理论机械化学研究。下面就以这样的分类方法来介绍这两方面的研究进展。

#### 3.2 含能材料机械化学实验研究

虽然机械化学在材料制备与加工领域的发展已经比较成熟也取得了十分丰硕的成果,但由于含能材料具有不稳定性、爆炸性、破坏性和毒性等不同于一类材料的特殊性质,使得含能材料的实验机械化学研究较难进行,研究的局限性也较大,因此这方面的研究工作开展得较少,

且就目前来看,研究主要集中在纳米含能材料的制备等领域,例如:可以利用高能机械球磨法、电火花爆炸法以及高速气(液)流粉碎法等物理方法将普通粒径的含能材料粉碎从而得到超细纳米含能材料<sup>[9]</sup>。纳米含能材料的粒径一般在1~100 nm之间,既可以是单质含能材料的纳米晶体,也可以是尺寸在纳米级的含能复合物,这些复合物通常是由金属或金属氧化物与无机或有机含能材料的纳米级颗粒及基体所组成的<sup>[10-11]</sup>。

高能机械球磨法是最具代表性的一种制备纳米含能材料的机械化学方法,它利用硬球在球磨机运转过程中对原料所产生的强烈的冲击、研磨等机械作用,使含能材料的粉末受到多种机械力的综合作用而发生不断地形变和破碎,从而在短时间内对其进行固定、成膜以及球形化等处理,最终得到纳米级的含能材料颗粒。张汝冰等<sup>[12]</sup>运用此技术制备出了纳米级的氧化铜和高氯酸铵的复合粒子,在很大程度上提高了高氯酸铵的使用效率。郁卫飞等<sup>[13]</sup>在乙醇和水作为介质的条件下,将微米级的RDX和铝粉混合物置于高能球磨机中研磨,制备出了包覆铝粉的RDX超细含能复合粒子。Schoenitz<sup>[14]</sup>等将传统高能机械球磨工艺进行了改进,利用反应抑制研磨技术制备出了处于高度介稳态的纳米含能材料和高能量密度纳米复合材料。

#### 3.3 含能材料机械化学理论研究

##### 3.3.1 爆炸始发机制研究与热点理论的完善

谈到含能材料爆炸的机械能引发机理,最为人们所普遍认可的是热点学说,此学说最早是由Bowden和Yoffe<sup>[15]</sup>于1952年提出的。该学说认为,利用机械能引发含能材料发生化学反应所需的能量要远小于利用热能引发时所需的能量<sup>[16-17]</sup>。然而,这一学说只是从能量的转换、积累和传递等角度来研究含能材料的起爆机理,并不涉及引发爆炸反应发生的微观机制。人们认为,热点的直径一般在 $10^{-3} \sim 10^{-5}$  cm的范围内,远大于一个分子的尺寸。因此,热点学说难以提供有关反应发生的具体部位、参与反应的原子和基团以及化学键等重要信息<sup>[18]</sup>。我们认为,含能材料发生爆炸的根本原因应该是原子之间化学键的断裂,而这又与分子的构型与成键原子的电子结构有关。因此,从微观层次对含能材料的内在起爆机制进行研究和探索是十分必要的。第一性原理计算方法、半经验方法以及分子力学方法等各种计算方法的不断完善以及计算机技术的飞速发展恰好为深入地研究含能材料爆炸的微观始发机制创造了有利条件<sup>[7]</sup>。

Gilman<sup>[19]</sup>以简单分子 $H_2$ 为模型巧妙地阐述了机

机械力诱发化学反应发生的微观机理。图 1 为该分子的沃尔什能级图,显示了由于受到剪切应力作用而发生键弯曲的  $\text{H}_3^-$  分子的轨道能量变化情况。图 1 中按照能量由低到高的顺序依次分布着  $\text{H}_3^-$  分子的成键轨道、非键轨道和反键轨道,其中非键轨道与反键轨道构成了分子的前线轨道(HOMO 与 LUMO)。  $\text{H}_3^-$  分子含有三个质子和四个电子。遵循电子在分子轨道中的填充规则,四个电子应分两对以自旋相反的方式分别填充在分子的成键轨道与非键轨道(HOMO)上。对于反键轨道(LUMO),两端原子的电子波函数相位相同,当分子在剪切应力作用下发生弯曲后,端原子之间的距离逐渐达到了能够成键的程度,从而使分子的反键轨道能量降低,变得更加稳定。然而,对于非键轨道(HOMO),两端原子的电子波函数相位相反,当分子在应力作用下发生变形后,端原子之间形成的是反键,这就使分子的非键轨道(HOMO)能量升高,变得更加不稳定。显然,  $\text{H}_3^-$  分子在剪切应力作用下发生弯曲后,其前线轨道能级差发生了明显地减小,这就增大了电子由 HOMO 跃迁到 LUMO 的几率,从而使得分子的反应活泼性增强。另外,我们从图 1 中还可以观察到,分子的成键轨道能量也因为新键的形成而降低了。Gilman 将这种现象解释为一种反向的姜-泰勒效应<sup>[19]</sup>。

在实际使用过程当中,含能材料一般是以固相的形式存在的。与液相和气相物质不同的是,固相物质在剪切力的作用下能够发生明显的形变。剪切力的作用还可以使固相物质的对称性发生改变,例如,可以使圆球变为椭球、立方变为四方等。而形变或对称性的破坏会使得分子的电子结构及化学键变得很不稳定,从而导致化学反应的发生。引发含能材料爆炸的机械能作用或爆轰波类似于上述的应力作用。因此 Gilman 的研究对我们进行机械能作用下含能材料引爆的微观始发机制的研究很有启发意义。

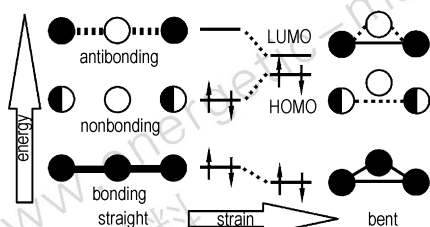


图 1 剪切应力作用下的分子轨道能级变化图(白色代表电子波函数相位为 0,黑色表示电子波函数相位为  $\pi$ )<sup>[19]</sup>

Fig. 1 Walsh energy-level diagram for  $\text{H}_3^-$  under shear strain (The phase  $\varphi$  of the electronic wave functions are indicated as white for  $\varphi = 0$  and as black for  $\varphi = \pi$ )

### 3.3.2 晶体缺陷对含能材料感度的影响

含能材料感度的高低直接影响了其在实际使用过程当中稳定性与安全性。特别是对于起爆药来说显得尤为重要。评价某种含能材料是否能够用作起爆药,最关键的就是看它是否具有适宜的感度<sup>[20]</sup>。因此,研究和探讨含能材料的感度性质是十分必要的。

感度是指含能材料在外界作用下发生爆炸的难易程度。含能材料的感度与其分子结构的稳定性以及分子与分子之间的相互作用强弱有关,组成分子的结构越稳定分子与分子之间的相互作用越强,含能材料的感度就越低,性质就越稳定,在使用过程中的安全系数也就越高。在实际应用过程中,含能材料通常是以固态分子晶体的形式存在的,含能材料的晶体结构以及在晶体内部存在的各种缺陷,往往会对含能材料的感度产生巨大的影响,特别是在极端的条件下,这种影响会更大。例如,含能材料在爆炸时,可以产生高达几十万个大气压的爆轰压力,爆轰波的传播速度可达每秒数千米,其内部温度也可升至 5000 K 以上。当爆轰波穿过时,在快速压缩和升温的共同作用下,含能材料的体积几乎可以减少 30%,而且还可以引发更为复杂的化学反应,从而在爆轰波阵面之后形成致密的高反应活性的超临界流体。而从化学反应中所释放出的能量可以驱使爆轰反应持续不断地进行,直到完全反应<sup>[21]</sup>。许多研究结果都表明,施加的机械应力、冲击、含能材料内的局部差异以及晶体结构缺陷(孔洞、晶界、内含物、位错、碎裂等)与含能材料的化学反应活性之间存在着极大地相关性<sup>[22-31]</sup>。但究竟是哪一个因素在含能材料爆炸的初始阶段起到了决定性的作用还需要进行进一步探索。

Kuklja<sup>[32-36]</sup>运用第一性原理的方法对含缺陷的 RDX 晶体的结构和性质进行了系统研究。首先,为模拟含有最简单稳定的缺陷即仅含一个空位缺陷的 RDX 晶体的情况,Kuklja 构建了周期性晶格及分子簇两种晶体模型(见图 2,图中小圆圈所显示的是 RDX 分子而小方框显示的则是分子空位缺陷),并分别对两种模型进行了几何优化及相关性质的计算<sup>[32]</sup>,还对处于各向同性静高压作用下的 RDX 完美晶体及含缺陷晶体模型的各项性质进行了比较研究,得出外界压力的作用与空位缺陷的存在会导致 RDX 晶体光学带隙变窄的结论,发现 RDX 晶体中存在的空位缺陷会使其绝缘体相态向金属相态转变的临界压力降低大约 30%<sup>[33]</sup>。

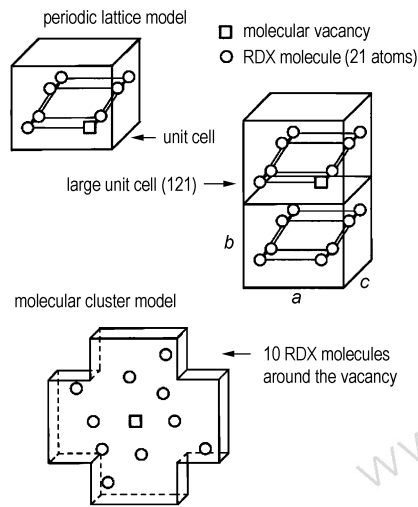


图2 Kuklja在模拟RDX晶体分子空位缺陷时构建的周期性晶格模型以及分子簇模型<sup>[32]</sup>

Fig. 2 The periodic models and the molecular cluster, designed by Kuklja, used for the molecular vacancy simulation in RDX crystal

接着, Kuklja 又对复合空位缺陷进行了研究, 构建了含有空位二聚体的 RDX 晶体模型, 并对其能带结构及态密度等进行了分析, 发现空位缺陷的成对出现会使得 RDX 晶体的光学带隙进一步变窄<sup>[34]</sup>; 在前面研究成果的基础上, Kuklja 进一步将研究拓展到更为复杂的情况, 例如, 他构建了含刃位错的 RDX 晶体计算模型(见图 3, 图中[001]方向的箭头表示柏格斯矢量方向而(010)面为位错滑移面), 并对其在各向同性静高压作用下的相关性质进行了模拟计算, 再与相同模拟条件下不含缺陷的 RDX 晶体模型的相关性质进行比较, 发现刃位错的产生也会导致晶体内局部内应力增加和光学带隙变窄, 而冲击波的高压作用将会进一步促使带隙急剧缩小, 这就大大增加了电子被激发的几率从而最终导致分子的分解、链反应的引发和爆炸的发生<sup>[35-36]</sup>。依据上述研究结论以及热点理论, Kuklja 认为 RDX 晶体中存在的各种晶体缺陷如刃位错等, 其实正是促使 RDX 发生化学反应从而引发爆炸的热点源。Kuklja 的研究深刻地揭示出晶体缺陷、热点形成以及 RDX 的爆轰感度三者之间的内在联系, 不但进一步发展了热点理论而且为含能材料的感度性质研究开创了新思路。

### 3.3.3 分子结构特征与撞击感度的关系

舒远杰<sup>[37-50]</sup>等近年来一直从事含能高氮化合物及有机芳香族硝基化合物等含能材料的理论研究, 取得了许多突破性的进展。撞击感度是含能材料性能评定的

一个重要指标, 探索含能材料分子结构特征与撞击感度的内在联系, 了解含能材料对外界机械能量刺激作用感度的规律, 对开发新型高能钝感的含能材料具有重要的理论指导意义。为了从本质上认识含能材料的安全性, 他们主要从化学结构出发对含能材料分子结构和撞击感度之间的关系进行了理论研究。目前, 评价含能材料撞击感度的理论方法主要有: 键离解能法、最易跃迁法、最小键级法、最大中点静电势法、热解引发反应活化能法等方法, 但这些方法均有各自的适用范围, 不具有普适性。舒远杰等人创新性地运用密度泛函的方法计算出了硝基苯及硝基苯胺类含能化合物的核独立化学位移(nucleus-independent chemical shifts, NICS)值, 以此为依据来判断这些化合物的芳香性, 并将其芳香性与撞击感度相关联, 研究发现: 这两类含能化合物的芳香性指标即 NICS 值与零点校正能  $E$  的乘积和撞击感度之间存在着很好的相关性, 相关性系数为 0.982, 明显要比利用键级(相关性系数为 0.78)和能隙(相关性系数为 0.53)来表征他们的撞击感度要好<sup>[48]</sup>。除此之外, 他们还对 37 种硝基芳烃化合物进行了 DFT-B3LYP/6-311 + G(d, p) 水平的全优化计算, 根据得到的量子化学参数建立了硝基芳烃化合物定量结构-性质关系(QSPR)模型, 指出硝基芳烃的撞击感度主要是由硝基数、氨基数、芳香性 NICS、最长 C—NO<sub>2</sub> 的键长、HOMO 以及  $\alpha$ -C—H 等来决定的, 并最终得出硝基增加撞击感度而氨基降低撞击感度的结论<sup>[49]</sup>。

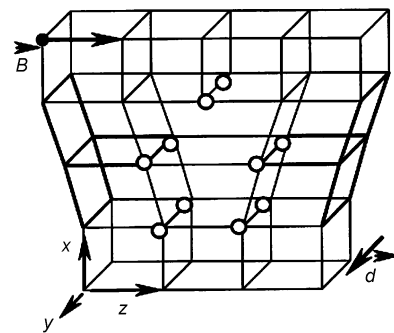


图3 含刃位错的 RDX 晶体模型<sup>[35]</sup>

Fig. 3 RDX crystal model containing a edge dislocation with the Burgers vector [001] and the slip plane (010)

### 3.3.4 固态含能材料感度性能预测

肖鹤鸣等<sup>[51-64]</sup>运用量子力学(QM)、分子动力学(MD)以及分子力学(MM)等方法, 依靠高斯及 MS(materials studio)等程序包, 对不同条件(温度、压力等)下的 CL-20、HMX、TATB 和 RDX 等多种高能量密度材料(HEDM)晶体的微观电子结构、能带结构及力学性

能进行了一系列系统研究,建立了一套理论预测高能量密度材料爆炸性能和力学性能的方法。例如,他们对各种类型的 CL-20 晶体进行能带结构分析,预测出了其所有晶型的感度相对大小为  $\varepsilon < \beta < \gamma < \alpha \cdot \text{H}_2\text{O}$  [65],并对不同压力下 CL-20 晶体的能带结构进行了模拟,依据带隙和判别感度的“最易跃迁原理 (PET)” [66],推测出随着压力的增大,CL-20 晶体的稳定性降低、感度增大。指出将晶体的前沿带隙和最易跃迁原理相结合,可以预测不同类型分子晶体的感度及其在不同压力下的递变规律。

2006 年,朱卫华等 [67-68] 运用广义梯度近似密度泛函的方法对代表性含碱金属叠氮化物及重金属叠氮化物晶体的电子结构和光学性质进行了研究,结果表明: 固态碱金属叠氮化物均为绝缘体且都是离子型化合物,而在所研究的重金属叠氮化物中,  $\alpha\text{-Hg}(\text{N}_3)_2$  和  $\text{Cu}(\text{N}_3)_2$  均为共价型化合物,  $\alpha\text{-Pb}(\text{N}_3)_2$  虽然是离子化合物但仍然含有较弱的共价性。同时他们还尝试着将叠氮化铜、叠氮化汞和叠氮化铅三种重金属叠氮化物的撞击感度与它们的电子结构相联系,通过对三种化合物晶体的态密度 (DOS) 及局域态密度 (PDOS) 进行分析 (见图 4 ~ 图 6),发现对于离子型及共价型固态金属叠氮化物来说,若金属原子对叠氮基团价电子所施加的影响越明显则该金属叠氮化物的撞击感度就越高。如:  $\alpha\text{-Pb}(\text{N}_3)_2$ 、 $\alpha\text{-Hg}(\text{N}_3)_2$  和  $\text{Cu}(\text{N}_3)_2$  在价带区域 DOS 的最高峰向费米能级靠近的程度越来越大,且重金属原子对价带的贡献也越来越多,所以这三种化合物的热分解活性依次增加,由此可以推出它们的撞击感度也应该依次增高,这个结论与实验值正好吻合。

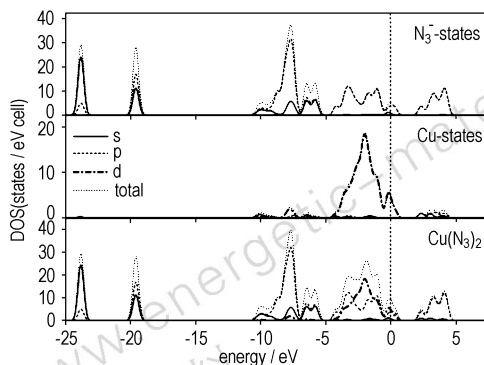


图 4  $\text{N}_3^-$ 、Cu 和  $\text{Cu}(\text{N}_3)_2$  的总体态密度及局域态密度图 (费米能级以垂直虚线表示 [68])

Fig. 4 Total and partial density of states (DOS) of  $\text{N}_3^-$  states, Cu states, and  $\text{Cu}(\text{N}_3)_2$  (The Fermi energy is shown as a dashed vertical line)

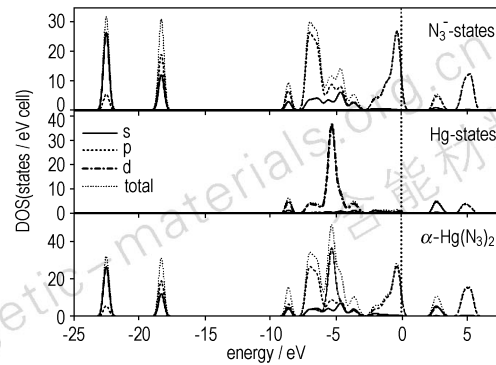


图 5  $\text{N}_3^-$ 、Hg 和  $\alpha\text{-Hg}(\text{N}_3)_2$  的总体态密度及局域态密度图 [68]

Fig. 5 Total and partial density of states of  $\text{N}_3^-$  states, Hg states, and  $\alpha\text{-Hg}(\text{N}_3)_2$

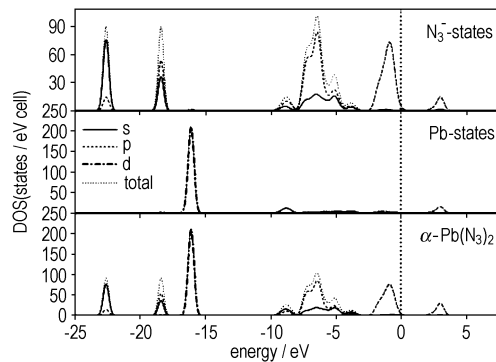


图 6  $\text{N}_3^-$ 、Pb 和  $\alpha\text{-Pb}(\text{N}_3)_2$  的总体态密度及局域态密度图 [68]

Fig. 6 Total and partial density of states of  $\text{N}_3^-$  states, Pb states, and  $\alpha\text{-Pb}(\text{N}_3)_2$

2007 年,朱卫华等 [69] 又运用局域密度近似密度泛函的方法对奥克托今 (HMX) 四种晶型的晶体进行了研究,研究结果表明: HMX 环上的氮原子比碳原子及硝基氮原子对价带的贡献大,因此环上的氮原子充当了活性中心。同时,他们还发现四种晶型的撞击感度与带隙之间还存在着一定的联系。通过考察单位体积晶胞的键级,推测出四种晶型的撞击感度大小相对次序为:  $\beta\text{-HMX} < \gamma\text{-HMX} < \alpha\text{-HMX} < \delta\text{-HMX}$ ,与实验值相吻合。2008 年,肖鹤鸣和朱卫华等 [70] 用局域密度近似密度泛函的方法对高氯酸铵 (AP) 和二硝酰胺铵 (AND) 晶体的电子结构及热力学性质等进行了研究,结果显示:  $p$  电子态在两种物质的化学反应中起到了至关重要的作用,且随着温度的升高 AND 将会比 AP 更加容易分解。

#### 4 结语与展望

含能材料机械化学研究从实验方面来说是利用机

械能对含能材料,特别是纳米含能材料进行制备和加工的新技术和新方法。从理论方面来说主要是利用量子力学、分子力学及分子动力学等理论研究的手段获得机械能引发含能材料爆炸的微观机制、含能材料结构与性能之间的内在联系以及理论预测含能材料性能的新途径等重要信息。特别要指出的是,密度泛函理论作为研究分子及凝聚态物质性质的重要手段,在含能材料机械化学的理论研究领域正发挥着越来越关键的作用。

作为一门新兴的交叉学科,含能材料的机械化学与其他发展较为成熟的学科相比还有着巨大的发展空间。从研究对象的角度分析,国内外在含能材料机械化学领域的研究工作主要还是针对一些目前应用较为广泛的炸药。而从研究方法上来看,实验方面的研究与理论研究各自相对独立,相互之间的联系还比较少。针对含能材料机械化学当前的发展状况,我们认为还应该从以下几个方面加以完善。首先,要适当地拓展其研究范围。含能材料品种繁多,功能性较强,每一种含能材料都具有各自不同的作用空间。其次,加强实验研究和理论研究的相互关联和相互补充也是十分必要的。含能材料属于一次性做功的材料,前期理论预见性对其研究具有一定的指导作用,所以通过理论研究进行初步的探索与预见,并以此为基础有的放矢地设计实验方案,可以避免不必要的消耗和浪费,同时也增加了含能材料操作过程中的安全性。

最后,希望机械化学的方法与思想能够被更加广泛地应用于含能材料研究领域,从而帮助我们对机械感度、引爆机制等与含能材料的使用安全性密切相关的问题进行全面、深入地研究。

#### 参考文献:

- [1] 王泽山. 含能材料和含能材料学科的进展(3)[J]. 化工时刊, 1995(9): 9-14.  
WANG Ze-shan. Energetic materials and progress in this discipline[J]. *Chemical Industry Times*, 1995(9): 9-14.
- [2] Pagoria P F, Lee G S, Mitchell A R, et al. A review of energetic materials synthesis[J]. *Thermochimica Acta*, 2002, 384: 187-204.
- [3] 朱卫华, 张效文, 肖鹤鸣. 高能晶体撞击感度理论研究: 第一性原理带隙( $\Delta E_g$ )判据[J]. 含能材料, 2010, 18(4): 431-434.  
ZHU Wei-hua, ZHANG Xiao-wen, XIAO He-ming. Theoretical studies of impact sensitivity of energetic[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2010, 18(4): 431-434.
- [4] 杨华明, 邱冠周, 王淀佐. 超细粉碎机械化学的发展[J]. 金属矿山, 2000, 72: 21-24.  
YANG Hua-ming, QIU Guan-zhou, WANG Dian-zuo. Development of the mechano-chemistry of super-fine crushing[J]. *Metal Mine*, 2000, 72: 21-24.
- [5] 彭秧锡, 陈启元, 刘士军, 等. 机械化学的研究发展现状与展望

- [J]. 材料科学与工艺, 2009, 17(1): 113-117.  
PENG Yang-xi, CHEN Qi-yuan, LIU Shi-jun, et al. Research status and prospect of mechanochemistry[J]. *Materials Science and Technology*, 2009, 17(1): 113-117.
- [6] 宋晓岚, 邱冠周, 杨华明. 机械化学及其应用研究进展[J]. 金属矿山, 2004(11): 34-38.  
SONG Xiao-lan, QIU Guan-zhou, YANG Hua-ming. Mechanochemistry and advances in its application research[J]. *Metal Mine*, 2004, 11: 34-38.
- [7] 王睿, 蒋军成, 潘勇. 硝基含能材料撞击感度的预测研究进展[J]. 工业安全与环保, 2010, 36(7): 19-20.  
WANG Rui, JIANG Jun-cheng, PAN Yong. Research on the prediction of impact sensitivity of nitro energetic materials[J]. *Industrial Safety and Environmental Protection*, 2010, 36(7): 19-20.
- [8] 帅英, 张少明, 路承杰. 机械力化学研究进展及其展望[J]. 新技术新工艺, 2006, 11: 22-23.  
SHUAI Ying, ZHANG Shao-ming, LU Cheng-jie. Research progress and prospect of mechanochemistry[J]. *New Technology & New Process*, 2006, 11: 22-23.
- [9] 安亭, 赵凤起, 张平飞. 纳米含能材料制备研究的最新进展[J]. 纳米科技, 2009, 6(6): 60-67.  
AN Ting, ZHAO Feng-qi, ZHANG Ping-fei. Progresses in the preparation study of energetic nanomaterials[J]. *Nanoscience & Technology*, 2009, 6(6): 60-67.
- [10] 何鸣鸿, 金祖亮. 从历年科学基金项目看我国纳米科技的发展: 纳米材料和技术应用进展[C]//全国第二届纳米材料和技术应用会议论文集, 中国材料研究学会, 北京, 2001: 8-13.  
HE Ming-hong, JIN Zu-liang. Research progress in the application technology of nanophase materials[C]//Symposia Proceedings of C-MRS 2001, Chinese Materials Research Society, Beijing, 2001: 8-13.
- [11] 莫红军, 赵凤起. 纳米含能材料的概念与实践[J]. 火炸药学报, 2005, 28(3): 79-82.  
ZHAO Feng-qi, MO Hong-jun. The concept and practice of energetic nanomaterials[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2005, 28(3): 79-82.
- [12] 张汝冰, 刘宏英, 李凤生. 复合纳米材料制备研究(II)[J]. 火炸药学报, 2000(1): 59-61.  
ZHANG Ru-bing, LIU Hong-ying, LI Feng-sheng. Preparation of composite nanometer sized particle(II)[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2000(1): 59-61.
- [13] Yu W F, Huang H, Nie F D, et al. Preparation of explosive nanometer composite of porous silicon-nitrate salt[C]//34<sup>th</sup> International Annual Conference of IC, Mianyang, 2003, 171/1-171/8.
- [14] Schoenitz M, Ward T, Dreizin E L. Preparation of energetic metastable nanocomposite materials by reactive milling[C]//Materials Research Society Symposium Proceedings (2003), Synthesis, Characterization and Properties of Energetic/Reactive Nanomaterials Symposium (Materials Research Society Symposium Proceedings), New Jersey, 2004, 800: 85-90.
- [15] Bowden F P, Yoffe Y D. Initiation and Growth of Explosion in Liquids and Solids[M]. London: Cambridge University Press, 1952.
- [16] Dienes J K. Frictional hot-spots and propellant sensitivity[C]//Materials Research Society Symposium Proceedings (1984), 24 (Defect Prop. Process. High-Technol. Nonmet. Mater.), New Mexico, 1984: 373-381.
- [17] Duval G E, Gupta Y M. Shock Waves in Condensed Matter[M].

- New York: Plenum Press,1985.
- [18] 劳允亮. 起爆药化学与工艺学[M]. 北京: 北京理工大学出版社,1997.
- LAO Yun-liang. Chemistry and Technology of Primary Explosive [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press,1997.
- [19] Gilman J J. Mechanochemistry[J]. *Science*,1996,274(4): 65.
- [20] 张建国,张同来,魏昭荣. 起爆药结构与感度关系及新型起爆药的发展方向[J]. 爆破器材,2001,30(3): 10-14.
- ZHANG Jian-guo, ZHANG Tong-lai, WEI Zhao-rong. The relations of the structure and explosive property of primary explosives [J]. *Explosive Materials*,2001,30(3): 10-14.
- [21] 姬广富,张艳丽,李晓凤,等. 极端条件下含能材料的计算机模拟[J]. 高能密度物理,2008,6(2): 77-96.
- Ji Guang-fu, ZHANG Yan-li, LI Xiao-feng, et al. Computer simulation for energetic materials under the extreme condition [J]. *High Energy Density Physics*,2008,6(2): 77-96.
- [22] Miles M H, Dickinson J T. Fracto-emission from pentaerythritol tetranitrate and cyclotetramethylene tetranitramine single crystals [J]. *Applied Physics Letters*,1982,41(10): 924-926.
- [23] Kanel G I, Razorenov S V, Fortov V E, et al. Shock-wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter [M]. Berlin: Springer-Verlag,2004.
- [24] Campbell A W, Davis W C, Ramsay J B, et al. Shock initiation of solid explosives[J]. *Physics of Fluids*,1961,4: 511-521.
- [25] Elban W L, Armstrong R W, Yoo K C, et al. X-ray reflection topographic study of growth defect and micro-indentation strain fields in an RDX explosive crystal [J]. *Journal of Materials Science*, 1989,24(4): 1273-1280.
- [26] Khorev I E, Gorel'skii V A, Yugov N T, et al. Numerical analysis of the physical characteristics of the three-dimensional problem of high-velocity collision of a deformable body with an obstacle [J]. *Soviet Physics Doklady*,1985,20: 622.
- [27] Dremin A N, Savrov S D, Trofimov V S, et al. Detonatsionnie volny v kondensirovannykh sredakh (Detonation Waves in Condensed Media) [M]. Moscow: Nauka,1970.
- [28] Borne L. Influence of intragranular cavities of RDX particle batches on the sensitivity of cast wax bonded explosives [C]//Proc. 10<sup>th</sup> Symposium (International) on Detonation, Boston, Massachusetts,1993: 286-293.
- [29] Bailou F, Dartyge. Influence of crystal defects on sensitivity of explosives [C]//Proc. 10<sup>th</sup> Symposium (International) on Detonation, Boston, Massachusetts,1993: 816-823.
- [30] 黄亨建,董海山,舒远杰,等. HMX 中晶体缺陷的获得及其对热感度和热安定性的影响[J]. 含能材料,2003,11(3): 123-126.
- HUANG Heng-jian, DONG Hai-shan, SHU Yuan-jie, et al. The preparation of HMX crystals with defects and the influences of crystal defects on thermal sensitivity and stability [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2003,11(3): 123-126.
- [31] Miao M S, Dreger Z A, Patterson J E, et al. Shock wave induced decomposition of RDX: Quantum chemistry calculations [J]. *Journal of Physical Chemistry A*,2008,112: 7383-7390.
- [32] Kuklja M M, Kunz A B. Ab initio simulation of defects in energetic materials. I. The molecular vacancy structure in RDX crystal [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*,2000,61: 35-44.
- [33] Kuklja M M, Kunz A B. Ab initio simulation of defects in energetic materials. II. Hydrostatic compression of cyclotrimethylenetrinitramine [J]. *Journal of Applied Physics*,1999,86(8): 4428-4434.
- [34] Kuklja M M, Kunz A B. Simulation of defects in energetic materials. 3. The structure and properties of RDX crystals with vacancy complexes [J]. *Journal of Physical Chemistry B*,1999,103: 8427-8431.
- [35] Kuklja M M, Kunz A B. Compression-induced effect on the electronic structure of cyclotrimethylenetrinitramine containing an edge dislocation [J]. *Journal of Applied Physics*,2000,87(5): 2215-2218.
- [36] Kuklja M M, Stefanovich E V, Kunz A B. An excitonic mechanism of detonation initiation in explosives [J]. *Journal of Chemical Physics*,2000,112(7): 3417-3423.
- [37] 张朝阳,舒远杰,王新锋,等. 呋咱及其自由基结构和性质的理论研究[J]. 含能材料,2004,12(4): 222-226.
- ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, WANG Xin-feng, et al. Theoretical study on structures and properties of furazan and its radicals [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2004,12(4): 222-226.
- [38] 张朝阳,舒远杰,赵晓东,等. 分子内氨基对 C—NO<sub>2</sub> 影响的理论研究[J]. 火炸药学报,2004,27(3): 32-35.
- ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, ZHAO Xiao-dong, et al. Effects of intramolecular amidos on C—NO<sub>2</sub> bond in nitro compounds [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*,2004,27(3): 32-35.
- [39] 张朝阳,舒远杰,董海山,等. 几种烷烃和烯烃氨基硝基取代物分子内氨基对 C—NO<sub>2</sub> 键影响的理论研究[J]. 火炸药学报,2005,28(1): 54-57.
- ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, DONG Hai-shan, et al. Theoretical study on C—NO<sub>2</sub> bond effected by intramolecular amidos [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*,2005,28(1): 54-57.
- [40] 张朝阳,舒远杰,黄奕刚,等. 二硝基多呋咱类气态标准生成热的计算[J]. 含能材料,2005,13(3): 162-165.
- ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, HUANG Yi-gang, et al. Calculation for normal heat of formation of dinitro-polyfurazan series in gas state [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2005,13(3): 162-165.
- [41] 梁晓琴,蒲雪梅,舒远杰,等. 苯及其含氮等电子体化合物的结构和性质的理论研究[J]. 化学学报,2006,64(20): 2057-2064.
- LIANG Xiao-qin, PU Xue-mei, SHU Yuan-jie, et al. Theoretical studies on structures and properties of benzene and its nitrogen i-seoelectronic equivalents [J]. *Acta Chimica Sinica*, 2006, 64(20): 2057-2064.
- [42] 熊鹰,舒远杰,周歌,等. 均四嗪热分解机理的从头算分子动力学模拟及密度泛函理论研究[J]. 含能材料,2006,14(6): 421-424.
- XIONG Ying, SHU Yuan-jie, ZHOU Ge, et al. Thermal decomposition mechanism of s-tetrazine by ab initio molecular dynamics and density functional theory [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2006,14(6): 421-424.
- [43] 周阳,龙新平,舒远杰,等. 六元氮杂环取代四嗪化合物的密度泛函理论研究[J]. 含能材料,2006,14(6): 429-435.
- ZHOU Yang, LONG Xin-ping, SHU Yuan-jie, et al. Theoretical studies on structures and properties of nitroimidazole compounds [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2006,14(6): 429-435.
- [44] 熊鹰,舒远杰,王新锋,等. 四嗪类高氮化合物结构对热分解机理影响的理论研究[J]. 火炸药学报,2008,31(1): 1-5.
- XIONG Ying, SHU Yuan-jie, WANG Xin-feng, et al. Theoretical study on effect of tetrazine structures on their thermal decomposition mechanisms [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propel-*

- lants, 2008, 31(1): 1–5.
- [45] 殷明, 舒远杰, 熊鹰, 等. 硝基咪唑化合物结构与性质的理论研究[J]. 化学学报, 2008, 66(19): 2117–2123.  
YIN Ming, SHU Yuan-jie, XIONG Ying, et al. Theoretical studies on structures and properties of nitroimidazole compounds[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2008, 66(19): 2117–2123.
- [46] 杜军良, 舒远杰, 周阳, 等. 硝基苯胺炸药芳香性与其撞击感度的关系[J]. 火炸药学报, 2008, 31(4): 6–9.  
DU Jun-liang, SHU Yuan-jie, ZHOU Yang, et al. Relationship between the impact sensitivities and aromaticity for nitroanilines explosives[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2008, 31(4): 6–9.
- [47] 殷明, 舒远杰, 熊鹰, 等. 吡唑类化合物结构与性能关系的理论研究[J]. 含能材料, 2008, 16(5): 567–576.  
YIN Ming, SHU Yuan-jie, XIONG Ying, et al. Theoretical study on relationship between structures and properties of pyrazole compounds[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2008, 16(5): 567–576.
- [48] 舒远杰, 杜军良, 黄奕刚, 等. 芳香族硝基化合物撞击感度的理论研究[J]. 绵阳师范学院学报, 2009, 28(8): 1–7.  
SHU Yuan-jie, DU Jun-liang, HUANG Yi-gang, et al. A theoretical study on the impact sensitivity of organic nitro-compounds[J]. *Journal of Mianyang Normal University*, 2009, 28(8): 1–7.
- [49] 杜军良, 舒远杰, 周阳, 等. 硝基炸药撞击感度的 QSPR 研究[J]. 绵阳师范学院学报, 2009, 28(11): 45–40.  
DU Jun-liang, SHU Yuan-jie, ZHOU Yang, et al. QSPR study on the impact sensitivity of nitroaromatics[J]. *Journal of Mianyang Normal University*, 2009, 28(11): 45–40.
- [50] 熊鹰, 舒远杰, 殷明, 等. *N*-甲基-*N'*-甲氧基偶氮-*N*-氧化物结构和性能的理论研究[J]. 含能材料, 2010, 18(3): 247–251.  
XIONG Ying, SHU Yuan-jie, YIN Ming, et al. Theoretical study on structure and properties of *N*-methyl-*N'*-methoxydiazene-*N*-oxide[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2010, 18(3): 247–251.
- [51] 姬广富, 肖鹤鸣, 董海山.  $\beta$ -HMX 晶体结构及其性质的高水平计算研究[J]. 化学学报, 2002, 60(2): 194–199.  
JI Guang-fu, XIAO He-ming, DONG Hai-shan. High level calculations on structure and properties of crystalline  $\beta$ -HMX[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2002, 60(2): 194–199.
- [52] 姬广富, 肖鹤鸣, 居学海, 等. TATB 晶体结构的周期性密度泛函理论研究[J]. 化学学报, 2003, 61(8): 1186–1191.  
JI Guang-fu, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Periodic DFT studies on the structure of crystalline TATB[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2003, 61(8): 1186–1191.
- [53] 居学海, 肖鹤鸣. 季戊四醇四硝酸酯晶体能带结构和起爆机理的 DFT 研究[J]. 高等学校化学学报, 2003, 24(11): 2035–2038.  
JU Xue-hai, XIAO He-ming. DFT studies on energy band structure and detonation mechanism of pentaerythritol tetranitrate crystal[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2003, 24(11): 2035–2038.
- [54] 肖继军, 万国勇, 姬广富, 等. HMX 基高聚物粘结炸药结合能和力学性能的模拟研究[J]. 科学通报, 2004, 49(24): 2520–2524.  
XIAO Ji-jun, FANG Guo-yong, JI Guang-fu, et al. Researches on binding energy and mechanic property for HMX-based PBX[J]. *Chinese Science Bulletin*, 2004, 49(24): 2520–2524.
- [55] 邱玲, 肖鹤鸣, 居学海, 等. 双环-HMX 结构和性质的理论研究[J]. 化学学报, 2005, 63(5): 377–384.  
QIU Ling, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Theoretical study on the structures and properties of bicyclo-HMX[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2005, 63(5): 377–384.
- [56] 胡应杰, 黄玉成, 肖继军, 等. TATB/氟聚物 PBX 沿不同晶面力学性能的分子动力学模拟[J]. 中国科学 B 辑: 化学, 2005, 35(3): 194–199.  
HU Ying-jie, HUANG Yu-cheng, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulation of mechanical properties of TATB/fluorine-polymers PBX[J]. *Science in China Series B: Chemistry*, 2005, 35(3): 194–199.
- [57] 黄玉成, 胡应杰, 肖继军, 等. TATB 基 PBX 结合能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2005, 21(4): 425–429.  
HUANG Yu-cheng, HU Ying-jie, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulation of binding energy of TATB-based PBX[J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2005, 21(4): 425–429.
- [58] 肖继军, 谷成刚, 万国勇, 等. TATB 基 PBX 结合能和力学性能的理论研究[J]. 化学学报, 2005, 63(6): 439–444.  
XIAO Ji-jun, GU Cheng-gang, FANG Guo-yong, et al. Theoretical study on binding energies and mechanical properties of TATB-based PBX[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2005, 63(6): 439–444.
- [59] 肖继军, 王艳群, 詹炜, 等. PETN 基 PBX 结合能和力学性能的理论研究[J]. 分子科学学报, 2006, 22(4): 219–225.  
XIAO Ji-jun, WANG Yan-qun, ZHAN Wei, et al. Theoretical study on binding energies and mechanical properties of PETN-based PBX[J]. *Journal of Molecular Science*, 2006, 22(4): 219–225.
- [60] 马秀芳, 赵峰, 肖继军, 等. HMX 基多组分 PBX 结构和性能的模拟研究[J]. 爆炸与冲击, 2007, 27(2): 109–115.  
MA Xiu-fang, ZHAO Feng, XIAO Ji-jun, et al. Simulation study on structure and property of HMX-based multi-components PBX[J]. *Explosion and Shock Waves*, 2007, 27(2): 109–115.
- [61] 王桂香, 肖鹤鸣, 居学海, 等. 含能材料的密度、爆速、爆压和静电感度的理论研究[J]. 化学学报, 2007, 65(6): 517–524.  
WANG Gui-xiang, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Theoretical studies on densities, detonation velocities and pressures and electric spark sensitivities of energetic materials[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2007, 65(6): 517–524.
- [62] 朱伟, 肖继军, 赵峰, 等. HMX/TATB 复合材料弹性性能的 MD 模拟[J]. 化学学报, 2007, 65(13): 1223–1228.  
ZHU Wei, XIAO Ji-jun, ZHAO Feng, et al. Molecular dynamics simulation of elastic properties of HMX/TATB composite[J]. *Acta Chimica Sinica*, 2007, 65(13): 1223–1228.
- [63] 许晓娟, 肖继军, 黄辉, 等.  $\epsilon$ -CL-20 基 PBX 结构和性能的分子动力学模拟: HEDM 理论配方设计初探[J]. 中国科学 B 辑: 化学, 2007, 37(6): 556–563.  
XU Xiao-juan, XIAO Ji-jun, HUANG Hui, et al. Molecular dynamics simulation of the crystal structure and properties for  $\epsilon$ -CL-20 based PBX[J]. *Science in China Series B: Chemistry*, 2007, 37(6): 556–563.
- [64] Xu X J, Zhu W H, Xiao H M. DFT studies on the four polymorphs of crystalline CL-20 and the influences of hydrostatic pressure on  $\epsilon$ -CL-20 Crystal[J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111: 2090–2097.
- [65] 肖鹤鸣, 许晓娟, 邱玲. 高能量密度材料的理论设计[M]. 北京: 科学出版社, 2008.  
XIAO He-ming, XU Xiao-juan, QIU Ling. Theoretical Design of High Energy Density Materials [M]. Beijing: Science Press, 2008.
- [66] Xiao H M, Li Y F. Banding and electronic structures of metal azides sensitivity and conductivity [J]. *Science in China Series B: Chemistry*, 1995, 38: 538–545.



- [67] Zhu W H, Xiao J J, Xiao H M. Comparative first-principles study of structural and optical properties of alkali metal [J]. *J Phys Chem B*, 2006, 110: 9856 – 9862.
- [68] Zhu W H, Xiao H M. Ab initio study of energetic solids: cupric azide, mercuric azide, and lead azide [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2006, 110: 18196 – 18203.
- [69] Zhu W H, Xiao J J, Ji G F, et al. First-principles study of the four polymorphs of crystalline octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111: 12715 – 12722.
- [70] Zhu W H, Wei T, Zhu W, et al. Comparative DFT Study of crystalline ammonium perchlorate and ammonium dinitramide [J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2008, 112: 4688 – 4693.

## Progress of Mechanochemistry in Energetic Materials

LI Tie-cheng, YANG Li, LI Zhi-min, ZHANG Tong-lai

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** The origination and features of mechanochemistry and its applications and developments situation in the research field of energetic materials were introduced and discussed. The mechanochemistry of energetic materials can be divided into experimental and theoretical researches. Current developments, both at home and abroad, in theoretical researches for the mechanochemistry of energetic materials were summarized and reviewed. The investigation results on the triggered mechanism, the relation of structure and property, and theoretical prediction of properties of energetic materials were analyzed. The development prospect of mechanochemistry in energetic materials was prospected with 70 references.

**Key words:** energetic materials; mechanochemistry; experimental research; theoretical research

**CLC number:** Tj55; O64

**Document code:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.03.023



## 《含能材料》创刊 20 周年纪念活动——专刊征稿

2013 年,《含能材料》迎来创刊 20 周年。过去的 20 年,是我国含能材料科学技术事业大发展的 20 年,也是《含能材料》稳步发展、茁壮成长的 20 年。作为以董海山院士为代表的我国火炸药科技事业的开拓者们创建的专业学术期刊,《含能材料》见证了我国火炸药、推进剂等领域 20 年来的光辉发展历程。20 年来,《含能材料》凝炼出“传承火药文明,创新能源材料”的办刊理念。

重温过去,展望未来,为纪念《含能材料》创刊 20 周年,《含能材料》将于 2013 年 4 月(第 2 期)出版“《含能材料》创刊 20 周年纪念专刊”,并特设新能源材料专栏,报道聚变能源材料、储氢材料、金属氢等新能源材料的研究成果。

为此,特向国内外广大专家征集研究快报、研究论文和综述,以期集中反映我国近年来在含能材料、新概念含能材料及其相关领域取得的重要学术成果。

**稿件类型:**(1) 简要报道新概念含能材料最新研究成果的研究快报(英文),以基金项目为主。(2) 具有较高创新性的原创研究论文。(3) 具有较高水平的综述文章。

**截稿日期:**2012 年 12 月 30 日。

请通过《含能材料》网上投稿系统直接上传稿件,请在“拟投栏目”中选择“《含能材料》创刊 20 周年纪念专刊”。

《含能材料》编辑部