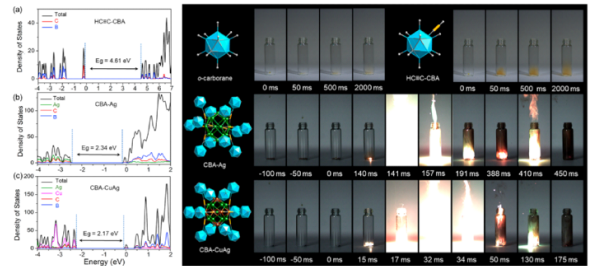


### Cu掺杂的Ag基含能配合物的设计与点火特性

郑州大学王乾有等人在化学领域顶级期刊JACS上发表论文,阐述了一种Cu掺杂Ag基含能配合物的制备及点火性能 $[\text{Cu}_6\text{Ag}_8(\text{C}_4\text{B}_{10}\text{H}_{11})_{12}\text{Cl}]\text{NO}_3$ (CBA-CuAg)。理论计算表明,采用Cu掺杂后,CBA-CuAg的带隙(2.17 eV)较CBA-Ag(2.34 eV)与CBA(4.61 eV)明显降低,而较窄的带宽有助于与氧化剂获得更优的反应活性。CBA-CuAg的安全性测试结果表明,该配合物的撞击感度( $>40\text{ J}$ )、摩擦感度( $>360\text{ N}$ )和静电火花感度( $>1\text{ J}$ )均处于较优水平。更重要的是,CBA-CuAg的点火延迟时间仅15 ms,较CBA-Ag(140 ms)缩短近10倍。该研究表明,CBA-CuAg兼具高安全性和高活性,为下一代推进剂的发展提供了技术支撑。

源自: Qian-You Wang, Jie Wang, Shan Wang, Zhao-Yang Wang, Man Cao, Chun-Lin He, Jun-Qing Yang, Shuang-Quan Zang\* and Thomas C. W. Mak. *o*-Carborane-Based and Atomically Precise Metal Clusters as Hypergolic Materials. *J. Am. Chem. Soc.*, 2020, 142, 12010-12014.

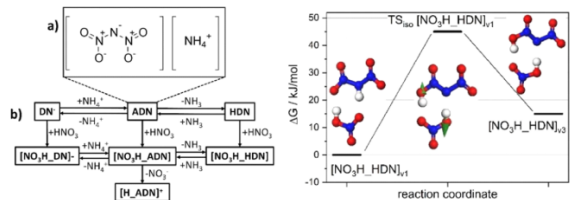


Cu掺杂Ag基含能配合物的点火性能

### 通过理论计算解析推进剂用ADN分解路径

ADN被誉为火箭推进剂组分中的一种绿色氧化剂,然而稳定性不佳导致其极易分解,应用难度大。针对ADN分解初期产物硝酸可能对ADN后期分解产生自加速作用的问题,德国ICT研究所的Johannes Lang和Manfred A. Bohn采用量子化学计算的手段,建立了ADN分解过程模型。研究显示, $\text{HNO}_3$ 的存在不仅可能导致ADN分解过程中的中间活性体(如 $\text{H}_2\text{NO}_3^+$ )浓度的增加,也会使 $\text{HNO}_3$ 分子随着ADN分解继续增加,这些结果可能加速ADN的自分解,该结果为ADN基推进剂进一步优化提供了一定理论支撑。

源自: Johannes Lang and Manfred A. Bohn. *Decomposition Pathways of Ammonium Dinitramide (ADN) and its  $\text{HNO}_3$ -Clusters Elucidated by DFT-Calculations*. *Propellants Explos. Pyrotech.*, 2020, 45, 1-13.

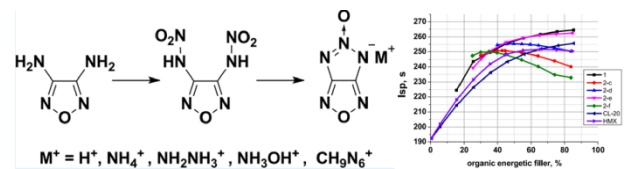


典型AND分解机理及其与 $\text{HNO}_3$ 作用时的分解路径

### 新型含能离子盐的设计合成与推进性能研究

近日,俄罗斯科学院泽林斯基有机化学研究所Alexey A. Voronin等合成了一系列含能离子盐,并采用多种表征手段解析其结构。性能研究显示,这一系列离子盐均具有较高的生成焓(88.9~168.0 kcal·mol<sup>-1</sup>)、较理想的晶体密度(1.702~1.934 g·cm<sup>-3</sup>)、较高的爆速(8.86~9.31 km·s<sup>-1</sup>)以及爆压(33.9~43.1 GPa),同时,感度测试显示其安全性能与HMX相当,且优于PETN。对于推进剂较为关键的性能比冲( $I_{sp}$ ),Voronin所得含能离子盐的 $I_{sp}$ 比HMX和CL-20高5~10 s。

源自: Alexey A. Voronin, Ivan V. Fedyanin, Aleksandr M. Churakov, \* Alla N. Pivkina, Nikita V. Muravyev, Yuri A. Strelenko, Michael S. Kleynov, David B. Lempert and Vladimir A. Tartakovskiy. *4H-[1,2,3]Triazol[4,5-c][1,2,5]oxadiazole 5-oxide and Its Salts: Promising Multi-purpose Energetic Materials*. *ACS Appl. Energy Mater.*, 2020, 3, 9401-9407.

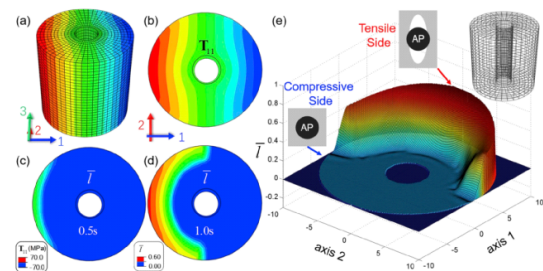


几种含能仍离子盐的合成与推进性能评估

### 固体推进剂中界面强度寿命模型的建立

固体推进剂中组分繁多,包括含能材料、粘结剂等,而界面脱粘是固体推进剂应用过程中的一大隐患,可能致其燃烧性能不稳定,严重时会造成火箭推进系统失效。为了评估典型固体推进剂的寿命,西北工业大学、哈尔滨工业大学与航天四院的研究人员以典型Al/AP基固体推进剂为研究对象,建立了一种评估界面脱粘的模型及相关参数。该模型可预测复杂载荷引起的热/力条件下,固体推进剂的界面强度等信息。作者将这类模型编写入有限元分析软件中,并通过与不同条件载荷下的实验数据进行对比,验证了该模型的有效性和可使用特性。

源自: Ming Lei, Jianjun Wang, Jiming Cheng, Jinyou Xiao, Lihua Wen\*, Haibao Lu\*, Xiao Hou\*. *A constitutive model of the solid propellants considering the interface strength and dewetting*. *Composites Science and Technology*, 2020, 185, 107893.



典型固体推进剂力加载条件下的应力应变模型

(中国工程物理研究院化工材料研究所 赵煦 编译)