

文章编号:1006-9941(2024)11-1154-08

磁场辐射下 TNT 晶体性能的变化特性

任海超¹,贾宪振¹,刘瑞鹏¹,王昊²,孙晓宇²,张增明²,陶俊¹,王晓峰¹

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065; 2. 中国科学技术大学物理学院, 安徽 合肥 230022)

摘要: 为了解强磁场辐射下三硝基甲苯(TNT)晶体性能的变化特性,借助扫描电子显微镜研究了磁场辐射(0,6 T)下 TNT 晶体形貌,利用 X 射线衍射仪和拉曼光谱分析了磁场辐射后 TNT 晶格的变化,采用差示扫描量热仪(DSC)获得了磁场辐射下 TNT 的热分解特性。基于分子动力学模拟,探讨了磁场辐射下(0,3,6 T 和 8 T) TNT 的晶格常数、微观分布、力学性能和撞击感度变化情况。结果表明:TNT 晶体受到 6 T 磁场辐射后,微观形貌由辐射前的鳞片针状结构转变为不规则的块状结构,热分解放热峰温度由 289.6 °C 升高到 304.1 °C,但 TNT 的晶体相结构和晶格常数未发生明显改变。TNT 晶格常数不受磁场辐射的影响,但磁场会改变 TNT 分子在晶体内部的分布。8 T 磁场辐射能显著改善 TNT 晶体的延展性。通过比较最长引发键的占比,发现 8 T 磁场会增加 TNT 晶体的撞击感度。

关键词: 磁场;微观形貌;热分解;分子动力学;力学模量;撞击感度

中图分类号: TJ55;O64

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2023271

0 引言

现代战争技术日益向信息化和智能化的方向上发展,战场环境也日趋复杂灵活,传统的化学发射技术受其原理局限,越来越无法满足军队行动中的对武器弹药高初速、高动能的要求。电磁发射技术利用电磁力加速弹丸,使弹丸达到超高速的新概念发射方式,具有初速高、毁伤能力强、可控性好的技术优点,在军事上有着广阔的应用前景^[1-2]。2004年,美国海军采用电磁发射系统,发射炮弹达到了多倍音速。2008年,美国水面作战中心成功发射 3.18 kg 的炮弹,并且达到了 10.64 MJ 的炮口动能^[3-4]。2010年,我国制造了长约 6 m 的电磁轨道发射装置,该装置能储能 10 MJ,峰值电流高达 1.8 MA^[5]。

电磁发射过程中,在膛内炮弹部位会产生感应电场和磁场,这不仅将对控制模块中的电子元器件产生

电磁干扰,还可能对含能材料造成安全和能量等方面的威胁。根据波印廷矢量可知,磁场是能量的载体,通过能量传导耦合和辐射耦合模式作用于含能装药上,进而降低含能装药的作战效能甚至完全失效。作用结果取决于含能装药中部分部件电磁感和电磁脉冲作用时间内部分部件受到的电磁脉冲辐射。实验研究表明,功率密度为 0.01~1 $\mu\text{W}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的脉冲不仅会造成雷达和通讯设备无法正常工作,还会对武器装备造成“硬损伤”;功率密度为 0.01~1 $\text{W}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的脉冲不仅会造成电子系统功能混乱、计算机死机,甚至会烧毁雷达、通讯、导航等系统的电子元件;功率密度为 1~100 $\text{KW}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的脉冲不仅能够瞬间摧毁无电磁防护的目标,引爆地雷、导弹和各类电火工品,还可直接攻击卫星、导弹、飞机、坦克、军舰等武器装备^[6-9]。

上述研究内容主要集中在电磁场对含能序列中电子元器件的研究方面,也有部分研究电磁场对含能装药性能的影响。基于爆轰产生的等离子流对反应程度、爆轰速率等方面有影响,那么磁场可以调节等离子流的性质,进而影响含能装药的感度和性能的理论,如 Tasker 等^[10]使用 1T 磁场,研究磁场对 PBX 产生的等离子流的影响,但是 18 次实验结果均表明等离子流的速度没有发生明显的改变,其原因可能是洛伦兹力提供

收稿日期: 2023-12-27; 修回日期: 2024-02-19

网络出版日期: 2024-04-25

作者简介: 任海超(1992-),男,助理研究员,主要从事混合炸药及装药技术研究。e-mail:haicren@126.com

通信联系人: 陶俊(1987-),男,高级工程师,主要从事混合炸药及装药技术研究。e-mail:taojun4712230@126.com

引用本文:任海超,贾宪振,刘瑞鹏,等. 磁场辐射下 TNT 晶体性能的变化特性[J]. 含能材料, 2024, 32(11):1154-1161.

REN Hai-chao, JIA Xian-zhen, LIU Rui-peng, et al. Theoretically and Experimentally Revealed the Response of TNT Crystal to Strong Magnetic Field[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2024, 32(11):1154-1161.

向心加速度,不提供径向加速度。然而目前磁场对含能材料本身性能的影响却鲜有报道。

为此,本研究以三硝基甲苯(TNT)为研究对象,采用扫描电子显微镜(SEM)、拉曼光谱方法和X射线粉末衍射仪研究在强磁场作用下TNT的结构变化;采用差示扫描量热法(DSC)研究在强磁场作用下TNT的热分解性能变化,最后结合分子动力学模拟,获得在强磁场作用下TNT的空间分布、力学性能、撞击感度等性质的变化。

1 实验部分

1.1 辐射样品的制备

TNT,分子式 $C_7H_5N_3O_6$,相对分子质量227.13,黄色片状,西安近代化学研究所。通过国家脉冲强磁场科学中心——磁特性科学实验站提供如图1所示的单向脉冲磁场,其最大强度为6 T,辐射时间为5 s。每次辐射TNT样品0.5 g,辐射后TNT样品为实验组,标记为TNT-6 T;未辐射的TNT样品为对照组,标记为TNT-0 T。

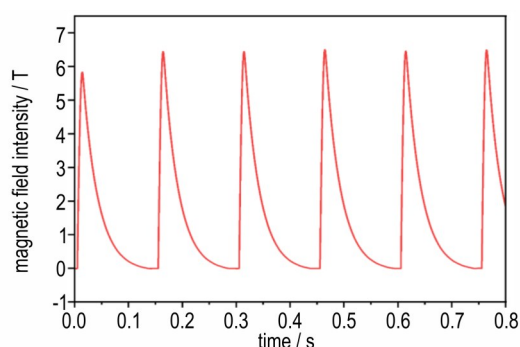


图1 脉冲磁场强度随时间的变化曲线

Fig.1 Variation curve of pulsed magnetic field strength over time

1.2 仪器与测试

扫描电子显微镜的型号ZEISS Sigma,德国蔡司公司,发射电流为4 A,发射电压为30 kV。拉曼光谱仪的型号为HR800,HORIBA公司,激光发光源波长为632.8 nm,光谱分辨率为 1 cm^{-1} ,谱图采用高斯和洛伦兹函数拟合,测试范围为 $50\sim 3200\text{ cm}^{-1}$,累计时间为50 s。X射线粉末衍射仪的型号为SmartLab XG,测试电压为40 kV,测试电流为150 mA,测试范围为 $5\sim 40^\circ$,测试步长为 0.01° ,测试速度为 $3^\circ\cdot\text{min}^{-1}$ 。差示扫描量热仪型号为TA Q2000,产自美国TA公司,温度范围为 $50\sim 400\text{ }^\circ\text{C}$,升温速率为 $10\text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ 。

1.3 结果与讨论

1.3.1 磁场辐射后TNT形貌分析

磁场辐射前后TNT晶体的SEM如图2所示。从图2a~2c可见,原TNT晶体呈现无色针状结晶,晶体大小范围为 $100\sim 300\text{ }\mu\text{m}$,分布比较均匀(图2a)。放大观察,发现其表面具有片状的鳞片结构,呈现出多层形貌(图2b),晶型形状则呈现规则的立方体结构(图2c)。而经过6 T磁场辐射后(图2d~2f),TNT晶体表面失去立体的针状结构,呈现不规则的块状(图2d)。放大观察,其表面呈现无规则的针状堆积(图2e),晶型形状变得圆润(图2f),与原晶体表面形貌呈现出明显的差异。扫描电镜结果表明磁场辐射会改变TNT晶体表面形貌。

1.3.2 磁场辐射后TNT的拉曼光谱分析

TNT晶体磁场辐射前后的拉曼光谱如图3所示。由TNT正则模式分析可知^[11]: 326 cm^{-1} 属于C—N的伸缩振动, 796 cm^{-1} 属于 NO_2 中N—O剪切振动, 826 cm^{-1} 和 938 cm^{-1} 属于C—H垂直苯环振动, 1089 cm^{-1} 属于C—H平行苯环弯曲振动, 1211 cm^{-1} 属于 CH_3 弯曲振动, 1366 cm^{-1} 属于C—N和N—O拉伸振动, 1536 cm^{-1} 和 1619 cm^{-1} 属于苯环呼吸振动(图3a)。辐射前后拉曼光谱均表现为典型的TNT拉曼振动模式,在 $200\sim 2950\text{ cm}^{-1}$ 范围内除了整体强度的区别外,没有观察到新峰的出现、波数偏移等明显的变化,比如N—O对称伸缩和不对称伸缩、C=C拉伸、晶格振动等均维持不变。但是受到6 T磁场辐射后,其拉曼光谱在 3011 cm^{-1} 处附近出现一个新的肩峰(3020 cm^{-1}),而且 3144 cm^{-1} 处的峰消失。由于波数大于 2900 cm^{-1} 的频率属于 CH_3 拉伸振动(图3b),表明 $-\text{CH}_3$ 周围化学环境发生变化,进而影响 $-\text{CH}_3$ 的拉伸振动峰位。综上所述,磁场不会改变TNT的骨架结构,但会改变晶体内部TNT分子的分布,6 T磁场会增加TNT分子层间的距离。

1.3.3 磁场辐射后TNT热分解分析

TNT晶体磁场辐射前后的DSC曲线如图4所示。由图4可以看出,磁场辐射前后TNT晶体均存在熔化吸热现象,同时伴随升华,二者熔化温度接近,均在 $82\text{ }^\circ\text{C}$ 左右,与文献结果一致^[13]。但是对应的分解放热峰形状变化明显,且峰值温度相差近 $15\text{ }^\circ\text{C}$,对照组样品的热分解放热峰峰值为 $289.6\text{ }^\circ\text{C}$,实验组样品的热分解放热峰峰值温度为 $304.1\text{ }^\circ\text{C}$,说明磁场可能调控了热分解进程。研究结果表明磁场辐射会改变TNT晶体的热分解过程。

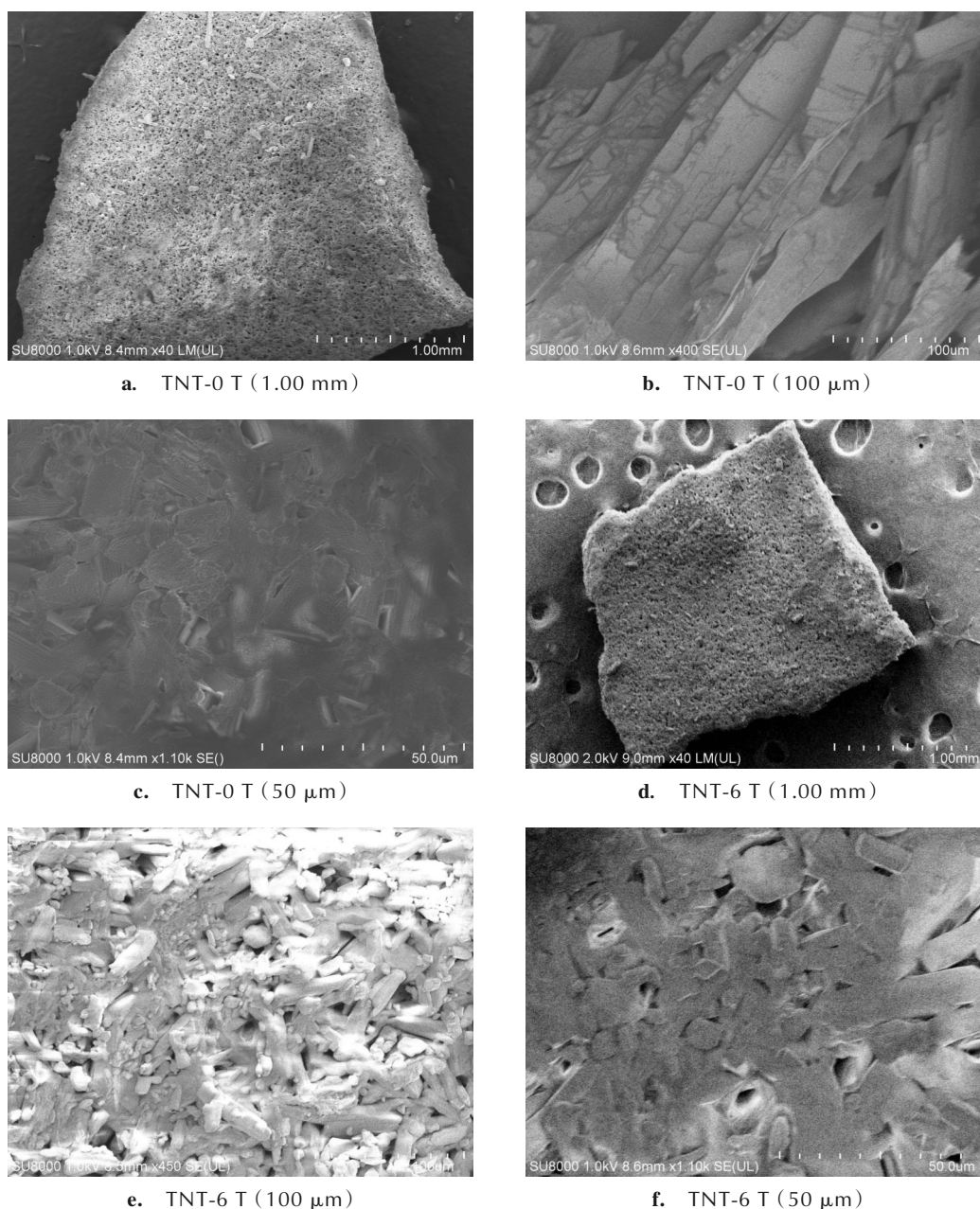


图2 磁场辐射前后TNT的SEM图像

Fig.2 SEM images of TNT before and after exposure to magnetic field

2 分子动力学模拟

目前实验条件仍存在很大的限制,如强磁场辐射大量样品的条件,观测手段等限制,并且实验研究主要获得强磁场辐射下的TNT宏观性能变化,很难从微观角度探究强磁场辐射下TNT的响应机制。分子动力学模拟作为联系宏观性能与微观性能的桥梁,目前已广泛应用于极端条件下含能材料的性能研究^[12-14]。本研究采用分子动力学模拟方法探究强磁场辐射下

TNT微观性能响应,与宏观实验性能相互补充。

2.1 模拟算法

TNT晶体结构取自X-ray衍射结果^[15],将TNT单胞扩展为(2×2×3)的超胞,共计96个TNT分子,2016个原子,如图5所示。采用Scigress软件^[16]中的Molecules Dynamics模块对TNT超胞晶体进行退火优化,优化后的结构能有效消除初始结构不合理的接触,其中磁场分别设置为0,3,6 T和8 T,方向沿着Z轴。TNT分子采用Dreiding力场^[17],TNT分子间相互作用采用

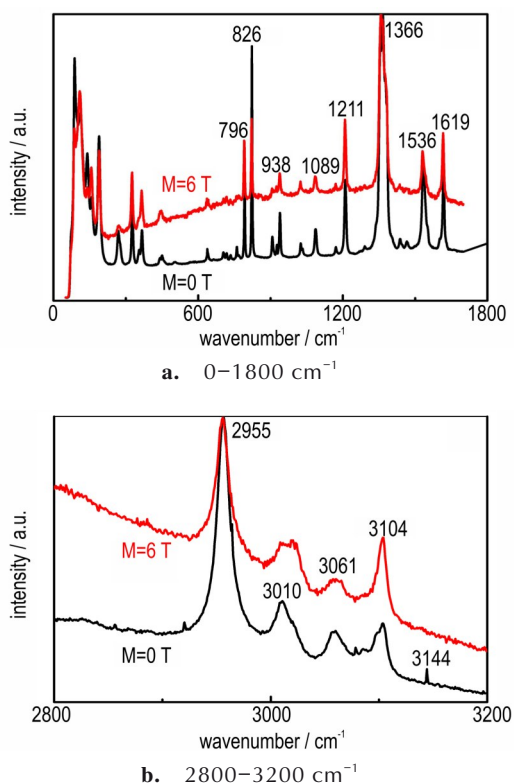


图3 磁场辐射前后 TNT 晶体的归一化拉曼光谱
Fig.3 Raman spectra of TNT crystals before and after exposure to magnetic field

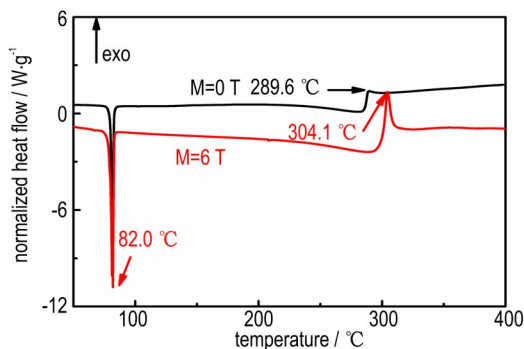


图4 磁场辐射前后 TNT 晶体的 DSC 曲线
Fig.4 DSC curves of TNT crystals before and after exposure to under magnetic field

Lennard-Jones 势, 非键相互作用能截断半径设为 7.5 Å。原子电荷采用 REPEAT 电荷, 获得该电荷的具体做法为: 基于 CP2K 第一性原理软件采用密度泛函理论^[18], 使用 BLYP 泛函和 DZVP-MOLOPT-SR-GTH 基组^[19-21], 同时考虑 D3-BJ 色散校正^[22], 对 TNT 单胞晶体进行结构优化, 然后对优化后的结构进行 REPEAT 电荷计算。为进一步保证 TNT 超胞体系能量最低, 在 NVT 系综下进行 150 ps 的分子动力学弛豫, 温度设为 298 K, 积分步长为 1 fs, 温度控制采用

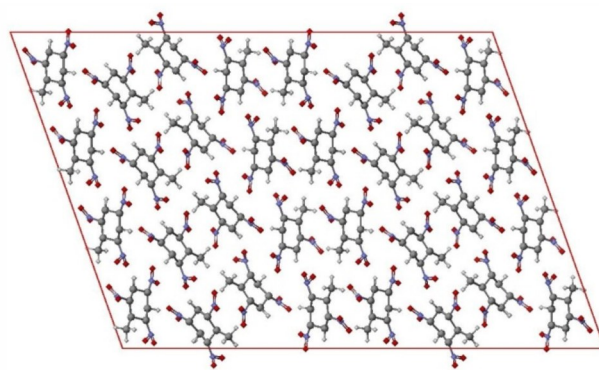


图5 TNT 晶体结构示意图(俯视)
Fig.5 Top view of TNT crystal structure

Velocity-Rescaling 算法^[23]。然后在 NPT 系综下进行 150 ps 的分子动力学弛豫, 温度设为 298 K, 压力设为 1×10^5 Pa, 压力控制采用 Parrinello-Rahman 算法^[24]。获得最终结构后, 继续在 NPT 系综下进行 25 ps 的分子动力学模拟, 每隔 5 fs 保留一帧构象, 共计 5000 帧构象进行性能计算和分析。

2.2 模拟验证

使用退火优化算法, 获得了不同强磁场辐射下 (0, 3, 6 T 和 8 T) TNT 晶体的晶格常数, 并将其分别与 TNT 的对照组和实验组样品的晶格常数进行对比, 结果如表 1 所示。从表 1 中可以看出, 优化后的 TNT 晶格常数 $a=21.685$ Å, $b=15.103$ Å 和 $c=5.876$ Å, 与 6 T 条件下所测的实验结果及 0 T 下文献^[15]结果较为一致, 其中理论晶格常数数值与文献^[15]的误差为 -3.84%、0.55% 和 -3.57%。表 1 实验结果表明 6 T 磁场辐射下, TNT 的晶格常数未发生明显变化; 理论计算结果也显示 TNT 晶格常数不受磁场辐射的影响, 也未发生明显变化。可见, 理论计算所采用的 Dreiding 力场、Lennard-Jones 势和 REPEAT 电荷可以很好地再现实验 TNT 实验结构, 所用模拟方法合理可行。

表1 磁场作用下 TNT 理论晶格常数模拟结果和实验结果
Table 1 Theoretical and experimental lattice constants of TNT under magnetic field

	magnetic field	a / Å	b / Å	c / Å
experiment	0 T	20.079	15.032	6.098
	0 T ^[15]	20.882	15.019	6.093
	6 T	20.058	15.028	6.093
calculation	0 T	21.685	15.103	5.876
	3 T	21.697	15.083	5.868
	6 T	21.680	15.110	5.873
	8 T	21.682	15.109	5.886

2.3 模拟研究

(1) 径向分布函数 $g(r)$ 又称对关联函数, 其定义为其他例子相距参考例子的密度^[25], 见式(1):

$$g(r) = \frac{\Delta N(r, \Delta r)}{\rho 4\pi r^2 \Delta r} \quad (1)$$

式中, r 是以某特定例子的位置; r_i 为原点的球半径, \AA ; 点 $\Delta N(r, \Delta r)$ 表示以 r 为半径、 Δr 球壳厚度内的粒子数; ρ 表示空间某点的密度函数。径向分布函数的峰值是反映两粒子间的位置关系的重要特征量。

(2) 采用微扰理论计算 TNT 的力学模量^[25], 见式(2):

$$\delta(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{kl}) = \frac{k_B T}{V_0} (C_{ij,kl})^{-1} \quad (2)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (\bar{h}_0^{-1} \bar{h} h \bar{h}_0^{-1} - 1)$$

式(2)中, ε 是应力张量; T 是为温度, K ; V_0 是无应力作用下的体积, \AA^3 ; k_B 是玻尔兹曼常数; $C_{ij,kl}$ 是弹性系数矩阵; h_0 是初始情况下的哈密顿矩阵; h 是随着时间演化的哈密顿矩阵。然后根据得到的弹性系数矩阵 $C_{ij,kl}$, 计算拉梅系数 λ 和 μ , 即:

$$\lambda = C_{12} \quad \mu = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (3)$$

则杨氏模量 E 、剪切模量 G 和体积模量 K 的表达

式见式(4):

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad G = \mu \quad K = \lambda + \frac{2}{3}\mu \quad (4)$$

(3) 统计不同强磁场辐射下(0 T、3 T、6 T和8 T) TNT模型的分子动力学轨迹, 获得每种化学键的个数和键长, 进而计算获得每种化学键所占的比例。

2.4 模拟结果与讨论

2.4.1 磁场辐射下 TNT 的配分函数结果分析

本研究将单个 TNT 分子的质心作为一个粒子, 获得 TNT 分子质心的径向分布函数 $g(r)$, r 表示质心的距离^[25], 结果如图 6 所示。由图 6 可以看出, 无磁场时, $r \leq 4.36 \text{ \AA}$, 径向分布函数 $g(r)$ 等于 0 (图 6a), 表明此时 TNT 分子间最小距离为 4.36 \AA ; 当磁场为 3 T 时, $r \leq 4.32 \text{ \AA}$, 径向分布函数等于 0 (图 6b), 表明此时 TNT 分子间最小距离为 4.32 \AA ; 当磁场为 6 T 时, $r \leq 4.43 \text{ \AA}$, 径向分布函数等于 0 (图 6c), 表明此时 TNT 分子间最小距离为 4.43 \AA ; 当磁场为 8 T, $r \leq 4.23 \text{ \AA}$ 时, 径向分布函数等于 0 (图 6d), 表明此时 TNT 分子间最小距离为 4.23 \AA 。因为在 TNT 分子中, CH_3 与其对位的 NO_2 的距离大于 5.70 \AA , TNT 分子的质心位于苯环内, 所以 TNT 分子间最小距离可反映 TNT 分子沿着 Z 轴的层间距离, 上述结果表明 6 T 磁场会增加 TNT 分子层间的距离但 8 T 磁场会显著减小 TNT 分子层间距离。

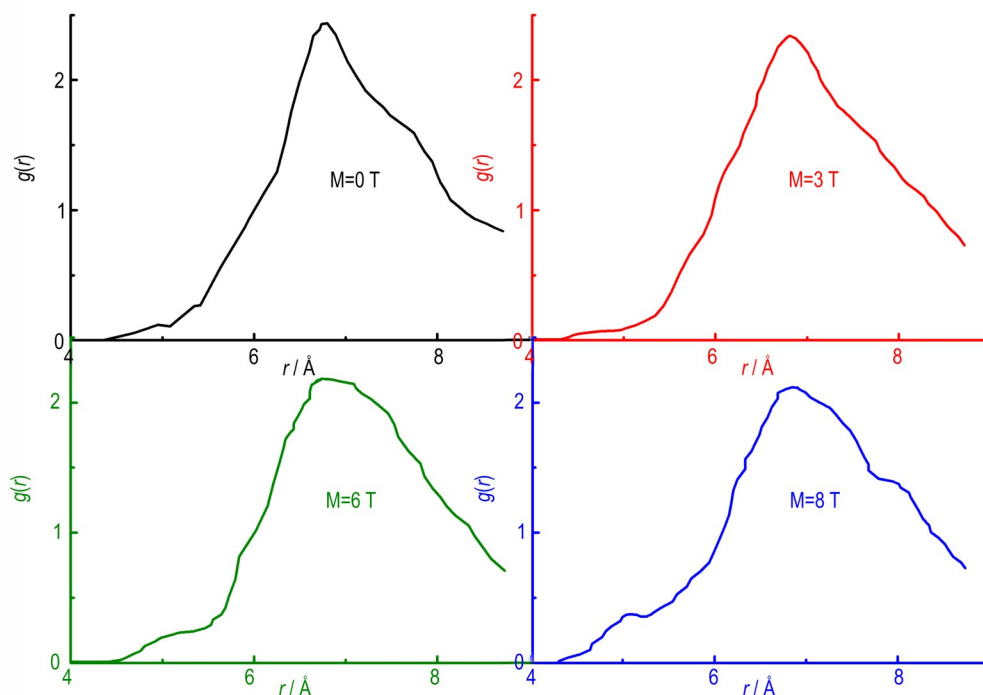


图 6 磁场辐射下 TNT 分子质心的径向分布函数

Fig.6 Radial distribution function of TNT molecule center of mass under magnetic field

径向分布函数最大峰的位置可反映 TNT 分子在同一 XY 平面内的分布情况。无磁场时,径向分布函数的最高峰出现在分子间距离 6.72 Å 处,此时径向分布函数 $g(r)$ 最大峰值为 2.44(图 6a);磁场为 3 T 时,径向分布函数的最高峰出现在 6.91 Å 处,此时最大峰值 $g(r)$ 为 2.39(图 6b);磁场 6 T 时,径向分布函数的最高峰出现在 6.82 Å 处,此时最大峰值 $g(r)$ 为 2.22(图 6c);磁场 8 T 时,径向分布函数的最高峰出现在 6.85 Å 处,此时最大峰值为 2.14(图 6d)。上述结果表明, TNT 受到磁场辐射后,同一 XY 平面内的 TNT 分子间距离增加。综上所述,强磁场影响 TNT 分子的空间分布,与实验拉曼光谱(图 3)的变化结果相一致。

2.4.2 磁场辐射下 TNT 的力学性能分析

力学性能是含能材料的重要性能之一,关系到含能材料的制备、加工和使用^[26]。磁场作用下 TNT 晶体的理论力学模量变化如表 2 所示。弹性模量 E 可衡量材料抵抗弹性形变的能力,是评价材料刚性的指标。由表 2 可以看出,无磁场时 TNT 的杨氏模量 E 约为 10 GPa,略小于无磁场时的实验值 11.15 GPa^[27],当磁场为 8 T 时, TNT 杨氏模量数值最小,表明此时 TNT 抵抗弹性变形的能力最弱。体积模量 K 和剪切模量 G 可衡量材料抵抗塑性形变的能力,体积模量值越大表示材料断裂强度越大,剪切模量值越大表示材料的硬度和屈服强度越高。当磁场为 3 T 时, TNT 的体积模量最大为 10.54 GPa,此时断裂强度最大。当磁场为 6 T 时, TNT 的剪切模量最大,为 4.56 GPa,此时 TNT 晶体最硬。 K/G 的比值可用于衡量材料的延展性,其值越大材料延展性越好。当磁场为 8 T 时, K/G 值最大为 3.619,此时 TNT 晶体延展性最好,与此时杨氏模量数值最小相对应。综上所述,磁场辐射改变 TNT 晶体的力学性能,8 T 磁场作用下 TNT 晶体的延展性最好。

表 2 磁场辐射下 TNT 的理论弹性模量

Table 2 Theoretical elastic modulus of TNT under magnetic field

magnetic field / T	E / GPa	G / GPa	K / GPa	K / G
0	10.09	3.83	9.25	2.415
3	9.26	3.42	10.54	3.082
6	11.51	4.56	8.10	1.776
8	6.93	2.52	9.12	3.619

Note: E , K and G represent Young's modulus, shear modulus and bulk modulus, respectively.

2.4.3 磁场辐射下 TNT 的理论撞击感度

研究表明含能材料引发键的最大键长可作为撞击感度相对大小的理论判据^[26,28-29],虽然最长的引发键在分子动力学轨迹中出现的概率很小,但是它一旦被引发,最容易引起初始的热分解和爆轰。TNT 的引发键为 C—NO₂,它的最长键长范围为:1.50~1.55 Å。图 7 给出了不同强磁场辐射下最长引发键所占的比例。无磁场时, C—NO₂ 最长键长占比为 2.015%,受到磁场辐射后, C—NO₂ 最长键长占比均增加,当磁场为 8 T 时, C—NO₂ 最长键长占比为 2.178%。上述结果表明受到磁场辐射后, TNT 的撞击感度上升,而且磁场越强, TNT 撞击感度越高。

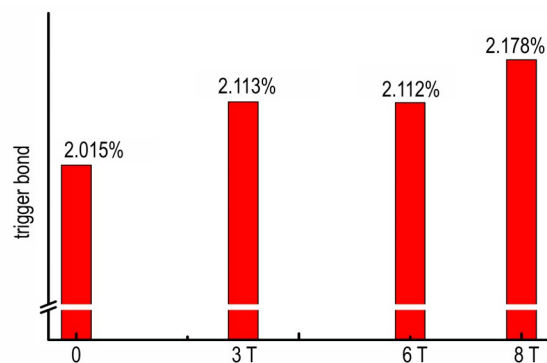


图 7 磁场辐射下 TNT 最长引发键占比示意图

Fig.7 Ratio of TNT longest trigger bond under magnetic field

3 结论

(1) 强磁场破坏 TNT 晶体微观的鳞片状结构,使其呈现不规则的块状。而且强磁场会影响 TNT 晶体的热分解过程,升高热分解放热峰峰值温度 15 °C。

(2) 采用分子动力学模拟获得的 TNT 晶格常数与实验值一致,而且理论模拟和实验结果均表明强磁场不影响 TNT 的晶格常数。

(3) 分子动力学模拟结果表明,强磁场辐射改变 TNT 分子在晶格内部的分布,与实验拉曼光谱的结果相一致。8 T 磁场会显著改善 TNT 晶体的延展性,但也会提高 TNT 晶体的撞击感度。

致谢:作者非常感谢华中科技大学国家脉冲强磁场科学中心提供的帮助。

参考文献:

[1] 马伟明,鲁军勇,李湘平. 电磁发射超高速一体化弹丸[J]. 国防科技大学学报, 2019, 41(4): 1-10.
MA Wei-ming, LU Xiang-yong, LI Xiang-ping. Electromagnet-

- ic launch hypervelocity integrated projectile[J]. *Journal of National University of Defense Technology*, 2019, 41(4): 1-10.
- [2] FAIR H D. Progress in electromagnetic launch science and technology[J]. *IEEE Transactions on Magnetics*, 2007, 43(1): 93-98.
- [3] US Navy. Navy rail gun test Dalgren, VA. 2006 & 2008 [EB/OL]. 2016-04-01. http://www.Eugenelesslover.com/VIDEOS/Rail_Gun.html.
- [4] FEIN G. Navy sets new world record with electromagnetic rail-gun demonstration [EB/OL]. 2016-04-01. http://www.Navy.mil/submit/display.asp?story_id=57690.
- [5] 彭甲. 电磁发射速度控制技术研究与仪器设计[D]. 西安: 西安工业大学, 2015.
PENG Jia. Research on electromagnetic emission speed control technology equipment design [D]. Xi'an: Xi'an Technology University, 2015.
- [6] 陈修桥, 胡以华, 张建华, 等. 计算机机箱的电磁脉冲耦合仿真模拟[J]. 系统仿真学报, 2004, 16(12): 2786-2788.
CHEN Xiu-qiao, HU Yi-hua, ZHANG Jian-hua, et al. Simulation of electromagnetic pulse coupling with computer box[J]. *Journal of System Simulation*, 2004, 16(12): 2786-2788.
- [7] 张存瑞, 米玉洁, 王喆, 等. 强电磁脉冲对武器装备电子系统毁伤效应分析及电磁防护材料技术[J]. 应用物理, 2022, 12(5): 304-310.
ZHANG Cun-rui, MI Yu-jie, WANG Zhe, et al. Damage effect analysis of strong electromagnetic pulse on the electronic system of weapon equipment and the technology of electromagnetic protection materials[J]. *Applied Physics*, 2022, 12(5): 304-310.
- [8] 潘峰, 余同彬, 李炎新. 电磁脉冲对微机接口电路的耦合实验研究[J]. 安全与电磁兼容, 2001, 3: 12-16.
PAN Feng, YU Tong-bin, LI Yan-xin, et al. The study of coupling experiment about interface of microcomputer under electromagnetic pulse[J]. *Safety & EMS*, 2001, 3: 12-16.
- [9] 周璧华, 石立华, 王建宝, 等. 电磁脉冲及其工程防护(第二版)[M]. 北京: 国防工业出版社, 2019.
ZHOU Bi-hua, SHI Li-hua, WANG Jian-bao, et al. Electromagnetic pulse and its engineering protection (2nd Edition) [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2019.
- [10] TASKER D G, WHITLEY V H, LEE R J. Electromagnetic field effects in explosives [C]//Proceeding of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed matter, Nashville (Tennessee), AIP Conference Proceedings, 2009, 1195: 335-338.
- [11] LIU Y, TZENG N, LIU Y, et al. Normal mode analysis of isotopic shifts in Raman spectrum of TNT-d5[J]. *Journal of Molecular Structure*, 2017, 1143: 438-443.
- [12] REN H C, JI L X, JIA X Z, et al. Intermolecular vibration energy transfer process in two CL-20-based cocrystals theoretically revealed by two-dimensional infrared spectra [J]. *Molecules*, 2022, 27: 2153.
- [13] YUAN J, REN H, WEI Y, et al. The reaction and microscopic electron properties from dynamic evolutions of condensed-phase RDX under shock loading [J]. *Z. Naturforsch. A*, 2020, 75(4): 285.
- [14] GE N, CHANG J, BAI S, et al. Shock response of condensed-phase RDX: molecular dynamics simulations in conjunction with the MSST method [J]. *RSC Adv*, 2018, 8(31): 17312-17320.
- [15] VRCELJ R M, SHERWOOD J N, KENNEDY A R, et al. Polymorphism in 2-4-6 trinitrotoluene [J]. *Crystal Growth & Design*, 2003, 3(6): 1027-1032.
- [16] MARCHAND N, LIENARD P, SIEHL H, et al. Applications of molecular simulation software SCIGRESS in industry and university [J]. *Fujitsu scientific & technical journal*, 2014, 50: 46-51.
- [17] MAYO S L, OLAFSON B O, GODDARD W A. Dreiding: a generic force field for molecular simulations [J]. *Journal of Physical Chemistry*, 1990, 94(26): 8897-8909.
- [18] KÜHNE T S, LANNUZZI M, BEN M D, et al. CP2K: an electronic and structure and molecular dynamic software package-Quickstep: efficient and accurate electronic structure calculations [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2020, 152, 194103.
- [19] BECKE A D. Density-function exchange approximation with correct asymptotic behavior [J]. *Physical Review A*, 1988, 38: 3098.
- [20] LEE C, YANG W, PARR R G. Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density [J]. *Physical Review B*, 1988, 37: 785-789.
- [21] GOEDECKER S, TETER M, HUTTER J. Separable dual-space Gaussian pseudopotentials [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(3): 1703-1710.
- [22] GRIMME S. Density functional theory with London dispersion corrections [J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews-computational Molecular Science*, 2011, 1: 211-228.
- [23] Bond S D, Leimkuhler B J, Larid B B. The Nosé-Poincaré method for constant temperature molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 151: 114.
- [24] Souza I, Martin J L. Mertric tensor as the dynamical variable for variable-cell-shape molecular dynamics [J]. *Physical Review B*, 1997, 55: 8733.
- [25] 陈正隆, 徐为人, 汤立达. 分子模拟的理论与实践[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007: 110-111.
CHEN Zheng-long, XU Wei-ren, TANG Li-da. Theory and practice of molecular simulation [M]. Beijing, Chemical Industry Press, 2007: 110-111.
- [26] 朱伟. 高能体系结构和性能分子动力学研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2008.
ZHU Wei. Molecular dynamics studies on the structure and properties of energetic systems [D]. Nanjing: Nanjing University of Science & Technology, 2008.
- [27] 朱一举, 徐健, 常海, 等. 纳米压痕技术对比研究 DNAN 和 TNT 晶体的微观力学性能 [J]. 火炸药学报, 2017, 43(3): 68-71.
ZHU Yi-ju, XU Jian, CHANG Hai, et al. Comparative study on micromechanical properties of DNAN and TNT crystal by nanoindentation [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2017, 43(3): 68-71.
- [28] REN H C, JI L X, JIA X Z, et al. Theoretically revealing the response of intermolecular vibration energy transfer and decomposition process of the DNTF system to electric fields using two-dimensional infrared spectra [J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, 24: 4352.
- [29] 陶俊, 王晓峰, 赵省向, 等. CL-20/HMX 共晶与混合物的分子动力学模拟 [J]. 含能材料, 2016, 24(4): 324-330.
TAO Jun, WANG Xiao-feng, ZHAO Sheng-xiang, et al. Molecular dynamics simulation of CL-20/HMX cocrystal and bends [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(4): 324-330.

Theoretically and Experimentally Revealed the Response of TNT Crystal to Strong Magnetic Field

REN Hai-chao¹, JIA Xian-zhen¹, LIU Rui-peng¹, WANG Hao², SUN Xiao-yu², ZHANG Zeng-ming², TAO Jun¹, WANG Xiao-feng¹

(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China; 2. School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230022, China)

Abstract: To gain a comprehensive understanding of the properties changes of TNT crystals under strong magnetic field radiation, the morphological changes, the lattice constants and the thermal decomposition characteristic were explored using the scanning electron microscope, X-ray diffraction, Raman spectroscopy and differential scanning calorimeter (DSC), respectively. Moreover, the variations of lattice constants, molecules distributions, mechanical properties and theoretical impact sensitivity of TNT under magnetic field radiation were investigated by molecular dynamics simulations. The experimental results, with the application of 6 T magnetic field, showed that the microscopic morphology was changed from the scale-needle structure to the irregular block structure, and the exothermic peak temperature of thermal decomposition was increased from 289.6 °C to 304.1 °C. However, the crystal phase structure and lattice constants of the TNT remained unchanged. Furthermore, theoretical investigations indicated that the TNT lattice constant not affected by magnetic field radiation, but the magnetic field did change the molecules distribution in the TNT crystal. The 8 T magnetic field radiation significantly improved the ductility of TNT. However, it simultaneously increased the impact sensitivity of TNT by comparing the ratio for the longest trigger bonds.

Key words: magnetic field; microscopic morphology; thermal analysis; molecular dynamics; mechanical modulus; impact sensitivity

CLC number: TJ55;O64

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2023271

(责编:姜梅)