



# 中国材料大会 2025

## 暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025  
福建 厦门

**D35-含能材料**

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



## D35. 含能材料

分会主席：庞思平、陆明、张庆华

### D35-01

#### ADN 基含能离子共晶探索研究

王影, 荆建权, 夏宏蕾, 张庆华

固体推进全国重点实验室, 西北工业大学, 陕西西安, 710072

\*E-mail: qinghuazhang@nwpu.edu.cn

高能氧化剂 ADN 的强吸湿性严重制约了其在固体推进剂中的实际应用。离子共晶技术可通过改变晶体中的分子间作用模式有效抑制吸湿性, 但迄今仅有 4 种 ADN 基含能离子共晶被报道, 主要面临合成难度大、难以规模化制备、吸湿抑制机理不清等挑战。针对上述挑战, 我们对现有 ADN 基含能离子共晶进行了系统总结, 并结合晶体工程策略, 深入研究了 ADN 晶体结构与吸湿性、能量特性之间的内在关系, 以此为指导设计并合成了新型高抗吸湿 ADN 基含能离子共晶, 突破了新型 ADN 基含能离子共晶的规模化制备工艺, 实现了 ADN 共晶的连续化制备。本报告将重点对团队在 ADN 基离子共晶设计、合成以及结晶(连续化)工艺等方面的最新进展进行报告。

### D35-02

#### 钝感高能稠环化合物 LX-11 的合成与性能

陈甫雪

北京理工大学, 北京 102488

fuxue.chen@bit.edu.cn

高能量密度含能材料(HEDMs)存在能量与感度的内在矛盾。现今军用炸药(如 HMX、CL-20)具有优异的爆轰性能, 但其较高的机械感度给弹药安全性带来挑战, 反过来又限制了装药的能量水平。经过近年来持续研究, 我们发现 *N*-烷基化、*N*-氨基化等可以有效降低氮杂稠环含能化合物的机械感度。其中, 通过 *N*-氨基化及其后续衍生反应, 不仅获得较高的能量密度, 还降低其机械感度。*N*-氨基氢键“边臂效应”是有效调控分子构型、降低机械感度的关键。因此, 以 3-硝基 5-氨基三唑(ANTA)为原料, 经 *N*-氨基化、氧化、关环反应, 合成了 3-硝基-5-(6-硝基-3*H*-[1,2,4]三唑并[1,5-*d*]四唑-2(5*H*)-基)-1*H*-1,2,4-三唑-1-胺(LX-11, 密度 1.95 g/cm<sup>3</sup>, 爆速 9740 m/s (Explo5V6.01), *IS* 40 J, *FS* >360 N)。数据表明, LX-11 是一个极具应用潜力的钝感高能炸药候选物。

### D35-03

#### 围压拉伸加载下复合固体推进剂的损伤原位测试

王哲君\*、王祺洲、强洪夫、祁柯嘉

火箭军工程大学

在微观尺度上, 复合固体推进剂主要由粘合剂基体和固体填充颗粒等组成, 该材料属压力敏感型含能材料, 有效获取其在不同压强载荷下的微观结构演化规律和损伤变化情况, 对于深入认识点火建压等使役工况下固体火箭发动机药柱性能具有重要意义。但受限于常规测试装置结构组成和测试原理, 目前有关压强载荷下复合固体推进剂微观损伤原位测试的相关研究比较匮乏。基于此, 本文以自研主动式气体围压拉伸测试装置为基础, 结合高倍蔡司显微镜搭建了开展压强载荷下固体推进剂微观损伤原位测试的试验系统, 并采用单边预制裂纹试件开展了室温 25°C、拉伸速率 21.6mm/min 不同围压压强(0MPa、0.4MPa、2MPa 和 8MPa)条件下的三组元端羟基聚丁二烯(HTPB)复合固体推进剂的损伤观测试验。不同压强幅值下 HTPB 推进剂微观结构形貌随加载位移的变化图像表明: 从加载开始直至试件发生拉伸断裂的过程, 推进剂裂纹尖端在完成裂纹张开后重复进行裂纹尖端启裂、裂纹尖端钝化、损伤演化累积、裂纹尖端再次锐

化启裂扩展、裂纹尖端再次钝化和损伤继续演化累积的过程；其次，压强升高并不改变 HTPB 推进剂裂纹尖端发生的损伤机制，但推进剂发生首次裂纹尖端启裂时的张开角度随压强升高而不断增大，即升高压强将会延长裂纹张开时间，或延迟裂纹启裂时间；第三，常压条件下，HTPB 推进剂的细观损伤机理以固体填充颗粒与基体剥离开来的“脱湿”为主，随压强幅值增大，“脱湿”损伤程度明显降低，而转为以基体撕裂为主。

#### D35-04

##### 含能燃烧催化剂的合成及性能研究

王康才\*、王海风、张强

中国工程物理研究院化工材料研究所

含能燃烧催化剂的发展，对提高固体推进剂能量和安全性具有重要的推动作用。目前，广泛研究的含能燃烧催化剂，是以高氮有机配体和金属离子通过配位键相互作用，构筑而成的含能配合物。含能配合物分子骨架上的配位键是材料结构中的最弱键，其强度直接关系材料的稳定性和安全性，增强含能配体和金属中心之间的作用力，是提高材料稳定性和安全性的有效办法。基于此，将螯合配位结构引入含能配合物结构中，利用配体和金属中心之间的强相互作用力，设计合成了系列具有高安全性的含能燃烧催化剂。基于上述策略，设计合成了系列具有高安全性和高催化活性的含能燃烧催化剂。其中，优选含能燃烧催化剂密度高于  $2.0 \text{ g cm}^{-3}$ ，热分解温度高于  $250^\circ\text{C}$ ，撞击感度大于  $40\text{J}$ ，表现出优异的能量和安全性。将优选含能燃烧催化剂应用到改双固体推进剂中，能够在不降低推进剂能量的基础上，在  $3\text{-}10\text{MPa}$  压力范围内，将燃烧速率提高  $46\%$ ，压力指数降低  $48\%$  ( $n=0.325$ )。此外，在丁羟基固体推进剂配方中，优选含能燃烧催化剂表现出和卡托辛相当的催化活性。

#### D35-05

##### Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@NiMoO<sub>4</sub> 异质结纳米催化剂：促进 5,5'-偶氮四唑盐含能材料绿色电合成

刘性辉\*

湖北航天化学技术研究所

含能材料 (EM) 是一类含有爆炸性基团或含有氧化剂和可燃物、能独立进行化学反应并输出能量的化合物或混合物，是军用炸药、发射药和火箭推进剂配方的重要组成部分。然而传统的合成方法通常需要高温、高压和强氧化剂等条件，具有危险性且副产物较难去除等弊端。因此，设计一条安全和环境友好的合成路线是十分有必要的。在此，我们展示了一种绿色的电催化系统，该系统将含能材料的电合成与水分解 (OWS) 协同耦合，在阳极侧将 5-氨基四唑 (5AT) 电氧化合成 5,5'-偶氮四唑钠盐 (SZT)，以取代动力学缓慢的阳极析氧反应 (OER)。具体地，我们采用了简单的水热法和高温煅烧制备了五种不同浓度配比的异质结催化剂  $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{NiMoO}_4$ ，并选用具有最高电合成 SZT 活性的  $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{NiMoO}_4\text{-}1.5$  作为三电极体系的工作电极，在五种不同浓度的 5AT 下进行一系列电化学测试，以探究最优的 SZT 合成条件。研究表明， $0.2\text{M}$  5AT 显示出最高的催化活性，且在  $10\text{mA cm}^{-2}$  的电流密度下， $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{NiMoO}_4\text{-}1.5$  显示出最低的氧化电位，即  $1.27 \text{ V vs. RHE}$ ，显著低于纯  $\text{Co}_3\text{O}_4$  ( $1.38 \text{ V vs. RHE}$ )。该方法以更环保、更安全的方式实现了高附加值含能材料的绿色合成，有望为含能材料领域注入新的活力，并且可为协同低能耗析氢提供思路。

#### D35-06

##### 异构体调控氢键作用构建离子型框架化合物

徐旭东、李生华\*

北京理工大学

构筑性能优异的含能离子骨架用于制备高密度含能材料是近期的研究热点，但目前仍存在难以定向合

成或组分发生改变的问题。在本研究中，我们选取了一组四唑同分异构体作为起始原料，通过在不同的 NH 位点引入偕二硝甲基，成功实现了定向构建含能离子框架化合物。合成了两种具有离子框架结构的含能离子盐 GTO-NH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> 和 GTO-NH<sub>3</sub>OH，并通过 sc-XRD、NMR 和 FT-IR 等对其结构进行了表征。上述两种化合物相较于不能形成框架结构的化合物 GTM-NH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> 和 GTM-NH<sub>3</sub>OH，表现出更出色的爆轰性能 (GTO-NH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>: 9254 m s<sup>-1</sup> 和 35.4 GPa; GTO-NH<sub>3</sub>OH: 9504 m s<sup>-1</sup> 和 38.9 GPa) 以及更好的热稳定性，其中 GTO-NH<sub>3</sub>OH 的热分解温度为 177°C。随后对驱动构建框架结构的内在机理进行了探究，发现存在于偕二硝甲基四唑阴离子间的氢键作用是促进构建框架结构的关键因素。此外，离子框架化合物 GTO-NH<sub>3</sub>OH 的爆轰性能超越了 RDX 并与 HMX 相当，其与同样是单环含能化合物的羟胺盐或羟胺共晶的含能化合物相比，其能量水平以及热稳定性达到了较好的平衡，这表明其作为高能量密度材料的巨大潜力。

### D35-07

#### 功能基元指导创制高能钝感含能材料

郭国聪\*、崔猛

中国科学院福建物质结构研究所

功能材料的精准创制，首要是揭示构效关系规律。众所周知，结构决定性质，功能本质上源于材料在外场作用下的电子响应过程，这些响应过程会引起材料的微观结构发生细微变化，主要包括原子层次的排列结构和电子层次的密度分布和能量分布的变化，这两部分统称为电子结构。材料体系的绝大多数物理性质和全部的化学性质都取决于其电子结构，因此，更为深入的理解是，电子结构决定性质。通过课题组独创的“电子结构晶体学”方法，实现材料研究从原子层次到电子层次的跨越，揭示构效关系规律，挖掘材料中起决定功能作用的关键微观结构单元，并命名为“功能基元”，以缩短功能材料研发周期，指导创制新材料。近年来，课题组基于叠氮基含能配合物的感度功能基元研究，开展了多种类型的含能材料的创制工作：

(1) 揭示叠氮基配合物的感度基元为“叠氮-叠氮”的排斥作用；(2) 创新性提出利用配体位阻作用实现叠氮根之间的去相互作用，设计制备出较低感度且超强起爆性能的叠氮铜基起爆药（极限起爆药量 = 5 mg）；(3) 首次利用叠氮基调控获得 1 例极低感度的叠氮铜基配合物炸药（撞击感度 = 25 J，摩擦感度 = 80 N，静电感度 = 40 mJ，极限起爆药量 = 60 mg）；(4) 首次以叠氮配合物引入 RDX 基丁羟推进剂，推力提升 70%。(5) 首次将叠氮配合物引入 PBX 炸药配方，感度降低 5% 以上，毁伤效果增加 137%。(6) 首次揭示叠氮基配合物激光敏感性差异本质是结构诱导下的电子与能量行为的差异，并开发 1 例叠氮基高能激光敏感添加剂（使叠氮铅激光能量阈值降低至 1/1500）。

### D35-08

#### 面向先进超耐热高能分子的构建策略

杨红伟

南京理工大学

报告聚焦于新型耐热高能炸药的分子创制，旨在解决该领域长期存在的能量与热稳定性难以协同提升的关键挑战。介绍基于 C-C、C-N 硝基吡唑类联环耐热高能材料、新型氧化咪唑类稠环耐热高能材料的构建策略。具体而言：研究创新性地提出并实施了对硝基吡唑-1,2,4-三唑骨架进行氮杂环修饰的策略，成功实现了化合物性能的定向调控与优化；通过分子内整合邻位氨基-硝基吡唑单元与六元氮杂环，成功制备了一系列具有大共轭体系、超高耐热性的新型化合物；利用特定硝化体系，精准实现了乙酰基向氧化咪唑环的转化，并通过对硝化-开环-电子转移-环化四阶段反应历程的精确调控，在单步反应中完成目标结构的构筑。本报告所提出的分子设计理念、合成方法及反应调控机制，为耐热高能材料的分子创制可提供有效的合成路径和重要的研究思路

### D35-09

#### 多氨基稠环含能化合物的合成与衍生化研究

胡璐

## 北京理工大学

氨基作为兼具稳定化功能与硝化前体特性的关键基团，其分子设计与合成策略对新型含能材料的开发具有双重意义。本研究以多氨基稠环结构为设计核心，成功构建了吡唑并哒嗪稠环骨架体系。创新性地利用高氯酸/盐酸等诱导的氢键网络定向自组装策略，开发出具有优异热稳定性的潜在耐热炸药。进一步通过硝氨基精准修饰，合成得到高能量密度化合物。本研究为基于自组装策略的新型含能化合物设计提供了参考。

**D35-10****HMX 基 PBX 阻燃结构设计及燃烧抑制机理研究**

林聪妹\*、杨志剑、曾诚成、巩飞艳、文玉史

中国工程物理研究院化工材料研究所

现代战争面临复杂战场环境，尤其是火烧等场景下，武器装药在意外刺激下可能发生点火燃烧，并进一步演化发展为爆炸甚至爆轰等高烈度反应，导致武器系统的安全性面临很大挑战。因此，迫切需要探索高效的阻燃材料和阻燃策略，基于阻燃网络构筑，降低装药在异常热刺激下的反应演化烈度。作为高效阻燃剂，多巴胺及其衍生物具有很强的自由基捕获能力和成炭能力，广泛应用于聚合物基复合材料中。结合表面科学研究的最新进展，基于多巴胺的强界面粘结作用和高效阻燃特性，在炸药晶体表面构建纳米级聚多巴胺（PDA）阻燃结构，在低阻燃剂含量下实现 PBX 阻燃性能的显著提升。通过调控反应温度、反应时间、氧化剂种类以及多巴胺浓度等反应条件，在含能材料表面构筑坚固的阻燃包覆层。通过密度泛函理论和分子动力学模拟 PDA 与 HMX 不同晶面的相互作用，揭示相互作用机理。在此基础上，基于多巴胺表面大量的官能团，一步法原位还原 GO，将 PDA 与氧化石墨烯（GO）结合，构筑杂化协效型阻燃网络结构，进一步提升阻燃性能。基于实验研究和理论模拟，揭示了阻燃结构对 HMX 在火烧或热作用下的阻燃机制，建立多层次结构设计与 PBX 宏观阻燃性能之间的构效关系。在含能材料晶体表面构筑阻燃网络结构，具有阻燃材料所需含量低、界面作用强、调控空间大、易于工程放大等优点，为提升复合炸药面向典型火烧事故场景安全性提供新的技术策略。

**D35-11****具有弱 N-N 键的三唑酮高能分子创制**

陈春晖\*

南京理工大学

在高密度含能材料的构建中，引入致爆基团如 N-NO<sub>2</sub>，是一种提升爆轰性能的有效策略，但这一方法面临着严峻挑战：在同一分子中引入多个硝胺基团（N-NO<sub>2</sub>）时，分子稳定性会显著下降，极大地增加了合成难度。在硝胺分子中，由于强吸电子硝基的存在进一步破坏了 N-N 键的稳定。因此合成具有极弱 N-N 键的分子具有极大的挑战。本工作基于三唑酮合成一系列具有较弱 N-N 键的高能分子，为化学键的极限和高能量密度含能材料的发展提供了新的见解。

**D35-12****High-performance aluminium-based metastable intermolecular composites achieved by the regulation of metal oxide catalyst via electrostatic spray**Yuming Chen<sup>1,2</sup>, Yinglei Wang<sup>2</sup>, Chunlin He<sup>1</sup>, Siping Pang\*<sup>1</sup>

1. Beijing Institute of Technology

2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute

This study develops an enhanced aluminum-based metastable intermolecular composite (MIC) system through polyvinylidene fluoride (PVDF) encapsulation of metal oxides (Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MoO<sub>3</sub>) via electrostatic

spraying. Comprehensive structural and thermal characterization techniques including SEM, TEM, XRD and TG-DSC confirmed the formation of well-defined core-shell architectures with uniform interfacial integration. Molecular dynamics simulations revealed significantly enhanced interfacial adhesion between PVDF and metal oxides, primarily mediated by electrostatic polarity-driven hydrogen bonding interactions. The incorporated metal oxides reduced thermal decomposition temperatures by 3-5%, with  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  exhibiting particularly notable catalytic effects—reducing ignition delay by >30% while substantially boosting exothermic energy release. HMX-Bi $2\text{O}_3$  composites demonstrated a 20.2% increase in energy release, whereas ammonium perchlorate (AP)-based formulations prioritized rapid combustion profiles. This research establishes both a scalable and controllable electrostatic spray synthesis methodology as well as fundamental interfacial engineering principles, providing an integrated framework for designing high-performance MICs that achieve an optimal balance between catalytic efficiency and energy density for advanced applications in rocket propellants, high explosives and defense technologies.

### D35-13

#### 高能低感含能分子中的共振辅助氢键

张文全\*、曹玉腾、江天宇、单雨佳  
中国工程物理研究院化工材料研究所

能量与感度的平衡是含能材料研究的核心问题和挑战，是一个多尺度的问题，在分子层面实现对能量与安全性的有效调控依赖于对构效关系的准确认知。氢键作用广泛存在于各种含能分子结构之中，对含能分子的平面性、芳香性，堆积形式等有显著影响，从而影响含能材料的能量与感度。本报告主要介绍高能低感含能分子中的共振辅助氢键作用，通过构效关系研究，指导设计兼具高能、高稳定性的含能材料。

### D35-14

#### 激光点火的同步辐射原位研究

熊良华\*、董安平、孙宝德  
上海交通大学

含能材料在极端条件（如高温、高压、高速冲击）下的动态行为表征是揭示其能量释放机制与安全性能的关键，也是当前研究的前沿与难点。由于爆炸燃烧过程的瞬态性及反应环境的复杂性，传统实验手段难以实现实时、原位检测。本研究研发了激光点火同步辐射原位表征装置，利用快速成像和衍射技术，以微秒时间分辨和微米空间分辨实时原位观测激光与粉末材料超快交互作用下燃烧行为，高精度量化燃烧过程中材料内部缺陷演化、燃烧波传播路径及局部温度/压力分布，揭示中间产物的动态形成机制。未来研究将融合先进表征技术与人工智能驱动的跨尺度建模，为含能材料的可控设计与燃烧机理提供多尺度实验依据和理论支撑。

### D35-15

#### In Situ Physicochemical Enhancement of the Thermal Decomposition of Ammonium Perchlorate

Jinchao Ma\*

Nanjing University of Science & Technology

While converting solid propellants into porous structures can significantly enhance combustion speed, this often compromises energy density. To address this compromise, this work developed a series of metal-containing energetic composites engineered to boost the burning rate while maintaining high energy density. Comprehensive characterization of the samples was conducted using techniques including X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), scanning electron microscopy with energy-dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDS), transmission electron microscopy (TEM), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and Brunauer–

Emmett-Teller (BET) analysis. The catalytic effects of the composites were evaluated through thermogravimetric analysis (TG) and differential scanning calorimetry (DSC). These additives decompose prior to ammonium perchlorate (AP), undergoing rapid expansion that generates porous materials with well-defined three-dimensional structures incorporating nano metal oxides. This architecture enables a dual-mechanism enhancement effect: physical gas convection through the organic

### D35-16

#### 基于双-(2-甲基-3-氨基-1,2,4-三唑)-氧化呋咱含能离子盐的合成与性能研究

王法伟、王建华\*、王佳鹏、刘玉存

中北大学

本研究以双-(2-甲基-3-氨基-1,2,4-三唑)-氧化呋咱和双-(2-甲基-3-硝胺-1,2,4-三唑)-氧化呋咱为前体，合成了五种新型高能离子盐，以改善母体化合物的稳定性及爆轰性能，并评估离子盐合成作为一种提高含能材料性能策略的可行性。结果表明，与前体相比，绝大多数新合成出的含能离子盐的密度和爆速得到提高 ( $\Delta\rho = +0.01$  至  $+0.08 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\Delta D = +0.61\text{-}0.73 \text{ km s}^{-1}$ )，且均拥有较为优良的机械感度 ( $IS = 14 - 29 \text{ J}$ )，从而验证了这种改善含能材料性能策略的可行性。其中，由前体双-(2-甲基-3-硝胺-1,2,4-三唑)-氧化呋咱衍生出的铵盐和羟胺盐爆速分别达到了  $8.83 \text{ km s}^{-1}$  和  $8.75 \text{ km s}^{-1}$ ，同时保持了适中的机械感度 ( $IS = 29 \text{ J}$  和  $25 \text{ J}$ )，它们兼具优良的爆轰性能和稳定的机械性能，是一种优秀的高能钝感含能材料。离子结构修饰与爆轰性能增强之间的相关性证实了含能离子盐合成作为下一代含能材料合理设计策略的可行性。

### D35-17

#### 一种由肽启发的两性含能材料

姜延达、李生华\*

北京理工大学

由于结构的独特性和多功能性，两性含能分子受到了广泛关注。然而，在之前的研究中两性含能分子的构建依赖于试错法，缺乏有针对性的设计策略和高效的合成方法。本研究借鉴“肽”——自然界中典型两性生物分子——提出了一种涵盖元素、前体、合成、结构和聚合的综合能量优化策略，设计了一系列两性含能分子，并通过简单的酸碱缩合反应，实现了这些化合物的一步合成，例如 2-(胍羰基)-N-硝基胍-1-甲酰胺 (HNNC, 3b)，并对 HNNC 合成机制进行了阐明，更实现了 10 克量级的制备。HNNC 表现出优异的性能，包括高能量密度 ( $\rho: 1.906 \text{ g cm}^{-3}$ ;  $D: 9034 \text{ m s}^{-1}$ ) 和高稳定性 ( $IS: 40 \text{ J}$ ;  $T_d: 191 \text{ }^\circ\text{C}$ )。同时本研究通过合成 HNNC<sup>+</sup> 和 HNNC<sup>-</sup> 盐，探究了质子的增添和移除对分子结构及物理化学性质的影响：HNNC<sup>+</sup> 盐表现出更高的能量，而 HNNC<sup>-</sup> 盐则显示出更高的稳定性。值得注意的是，[HNNC<sup>+</sup>][NO<sub>3</sub><sup>-</sup>] 展现出超高的能量 ( $D: 9462 \text{ m s}^{-1}$ ;  $P: 37.6 \text{ GPa}$ )，可媲美 FOX-7、RDX 和 HMX。此外，通过在特定位置去除氨基/硝基基团对 HNNC 进行结构拆解，揭示了其高性能的机制：强烈的氢键作用是其高性能的关键。这项研究不仅为合理设计两性含能材料提供了新的见解，更扩展了肽启发材料在能量存储和分子工程领域的应用范围。

### D35-18

#### 新型多硝基富氮杂环氧化剂设计与合成

李生华

北京理工大学

氧化剂是固体推进剂的重要组分，决定能量水平的关键物质。本报告将介绍高性能固体推进剂对氧化剂的关键性能需求。基于这些需求，重点介绍多硝基富氮杂环共价氧化剂和多硝基离子共晶氧化剂的设计与合成。并且，与 ADN 和 AP 等传统氧化剂进行性能对比，揭示它们的稳定性和密度的作用机制。同时，介绍这两类氧化剂应用典型固体推进剂中的初步性能。

## D35-19

## 混合炸药表界面微结构的定量表征及构效关联研究

徐金江、黄石亮、朱春华、张浩斌、李洁、李诗纯、刘渝\*

中国工程物理研究院化工材料研究所

混合炸药表界面微结构的定量表征及构效关联研究是保障先进武器稳定性和可靠性的关键。含能晶体作为炸药部件的核心组份，其晶相结构、晶面取向、表界面状态、缺陷分布及颗粒聚集态等多尺度微结构特征，在制造、使用和贮存过程中受造粒工艺、成型条件及温压、剪切力等因素影响而演变，如颗粒破碎、界面脱粘、微裂纹扩展等，显著制约着部件的力学性能。为深入理解这一过程，本研究建立了炸药晶体特性敏感参量表征方法，重点发展组份间界面作用定量表征技术。通过颗粒修饰探针结合二维力谱成像，并辅以探针弹性系数与作用面积归一化策略，系统量化了粘结剂/键合剂特征官能团（如氨基、羟基、海因岛结构）、晶体晶面粗糙度及粘结剂聚集态（晶态/非晶态）对界面粘附力的影响规律，揭示了氟聚物在炸药晶体表面的包覆机制及其热老化过程中的聚集态演变：热刺激下氟聚物非晶态粘附力大于晶态，且温度升高显著加速其片晶或颗粒结晶速率与规整性，链段运动自由度变化导致的微晶化是长时老化下 PBX 脆化的主因。同时，基于原位 SAXS 和 SCXRD 技术，揭示了 HMX 晶体热致膨胀引发的纳米缺陷演化及相变前动力学，并开发了模拟压制工艺的原位力/热加载装置，为理解包覆改性、共颗粒等对晶体结构稳定性的抑制机制提供了支撑。进一步聚焦界面作用增强与结构演变机制解析。发展了氟聚物官能团（-OH, -NH<sub>2</sub>）接枝改性技术，在不破坏链段整体结构前提下实现聚合物一体化改性，显著提升了与 HMX 等炸药的界面粘附力。结合原位热加载 AFM 表征，明确了炸药晶体/氟聚物界面粘附力随温度的变化行为，并发现键合剂（如 LBA332）在压制成型工艺条件（尤其是真空热处理）下粘附功及粘附力下降的现象，其机制与三嗪环结构破坏密切相关。这些成果系统阐释了界面脱粘行为的内因与粘结现象的本质，不仅为 PBX 炸药配方设计、压制成型工艺优化及贮存有效性评估提供了关键技术支撑，也为产品质量控制与性能提升建立了微观层面的理论依据。

## D35-20

## 氢键组装高密度含能唑类化合物：1,3,4-噁二唑桥联三硝基甲基-1,2,4-三唑的爆炸性能与感度调控

于琼

南京理工大学

氢键是降低含能材料感度（钝感）的核心策略之一。本研究将作为 HB 受体的单-1,3,4-噁二唑或双-1,3,4-噁二唑单元，与作为 HB 供体的三唑骨架相结合，设计并合成了系列具有增强氢键能力的 1,3,4-噁二唑桥接、三硝基甲基取代的 1H-1,2,4-三唑化合物。通过晶体结构和静电势能面分析，探究了氢键形成的驱动力及其对分子堆积模式的影响。系统评估了目标化合物的机械感度（撞击感度 IS 和摩擦感度 FS）、爆速 ( $D$ ) 及爆压 ( $P$ )。结果显示：单-1,3,4-噁二唑桥联化合物 **6** 在 230 K 下具有高晶体密度 ( $1.925 \text{ g/cm}^3$ ) 和优异的爆速 ( $9271 \text{ m/s}$ )，但其感度仍然较高 ( $IS = 1 \text{ J}$ ,  $FS = 240 \text{ N}$ )。其二胍盐 **6a** 则展现出高能量与低感度的良好平衡 ( $D = 9019 \text{ m/s}$ ,  $P = 36.6 \text{ GPa}$ ;  $IS = 15 \text{ J}$ ,  $FS = 252 \text{ N}$ )。双-1,3,4-噁二唑桥联化合物 **10** 显示出更高的晶体密度 ( $1.958 \text{ g/cm}^3 @ 130 \text{ K}$ )，能量性能稍低 ( $D = 8968 \text{ m/s}$ ,  $P = 35.5 \text{ GPa}$ )，但感度相比于 **6** 改善了很多 ( $IS = 10 \text{ J}$ ,  $FS = 240 \text{ N}$ )。本研究展示的氢键增强策略及其对含能材料物理与能量性能影响规律的解析，为开发新型氢键组装的含能化合物提供了指导。

## D35-21

## 含能复合材料的界面仿生结构设计 with 性能提升

曾诚成\*、杨志剑、郑胜军、巩飞艳、聂福德

中国工程物理研究院化工材料研究所

高聚物粘结炸药 (PBX) 是一种以炸药单质、高分子为主要组成的复合含能材料，由于炸药的含量占到 90% 以上，这种高固相填充体系具有界面作用薄弱的缺点，会影响复合材料的爆轰、安全、力学、热物

理等多方面性能。因此，如何在炸药表面设计、构建一个功能针对性强、微结构精细化可调、机械强度高、通用性强的包覆结构，就成为 PBX 微结构调控和性能提升的关键策略。基于聚多巴胺（PDA）的强粘附特性，在多种炸药表面开展了仿生界面设计，修饰含量 1% 以下，炸药压缩、拉伸力学性能、抗蠕变性能均提升 30% 以上。进一步，利用 PDA 表面羟基、胺基等官能团作为二级反应平台，化学接枝界面增强高分子。通过线性、超分子支化等不同类型聚合物接枝，炸药表面物理锚点和氢键作用增强，力学性能显著提升。同时，利用“graft to”和“graft from”等方式，在炸药表面形成多级结构设计，炸药的力学性能增加的同时，热膨胀性能进一步抑制 8% 左右，提升应用潜力。仿生结构设计克服炸药界面弱缺点，有效解决了炸药的热稳定性和力学问题，为 PBX 力学增强增韧提供新思路，具有一定工程现实意义，有望为武器用炸药优化设计提供规律性认识和技术支撑。

### D35-22

#### F 掺杂 Cu<sub>2</sub>O 催化 AP/Al 能量释放的双重策略：表面氧空位和 Cu<sup>+</sup>的协同效应

马远远、孙成辉\*

北京理工大学

缺陷工程已被证明是改善过渡金属催化剂理化性质和提高表面催化活性的有效途径。然而，将其应用于调节燃烧催化剂活性的研究仍然有限。通过非金属 F 掺杂，在 Cu<sub>2</sub>O 中引入了高浓度、稳定的氧空位缺陷。实验和理论模拟研究了过渡金属氧化物及其表面氧空位之间的协同催化作用对含能配方中 AP 分解和能量释放行为的影响。结果表明，在 300°C 时，F 掺杂导致 Cu<sub>2</sub>O 表面大量存在稳定的氧空位缺陷。值得注意的是，引入了 1wt% 的含氧空位 F-Cu<sub>2</sub>O 催化剂对 AP 热分解有显著的催化作用。其中，AP 分解温度降低 105°C，热分解活化能降低 103.4 kJ/mol。此外，该催化剂还显著提高了 AP/Al 配方的能量性能，使 AP/Al 复合材料的峰值压力提高了 461.8 kPa，增压速率提高了 40.6 倍。这些发现突出了缺陷工程催化剂在优化含能材料的实际应用性能方面的潜力。

### D35-23

#### 浅谈笼形高能分子设计策略——从历史发现中寻找思路

刘英哲\*、文琳元

西安近代化学研究所

笼形高能分子因其骨架具有张力能可进一步提高能量密度而备受关注。CL-20、ONC 是上世纪成功合成的最为知名的笼形高能分子。如何设计出类似的对称笼形高能分子是含能材料领域的研究焦点。本报告深入挖掘了 CL-20、ONC 的设计理念，从分子结构演化角度出发，提出了环内桥联、数据库筛选等设计新策略，并结合合成难度打分模型，从理论上设计出了多个新型笼形高能分子，为笼形高能分子的快速发现提供了新视角。

### D35-24

#### 多尺度计算方法与软件的发展及其在离子型全氮含能材料设计中的应用

米文慧\*

吉林大学

从原子尺度开展多尺度含能材料的设计，是确定其晶体结构及关键爆轰性能的基础。针对含能材料，其晶体结构与爆轰性能的预测面临多重挑战：（1）如何准确且高效地计算给定晶体结构的能量；（2）如何在势能面上高效搜索全局能量最低结构或亚稳态结构；（3）在保证计算精度的同时，如何构建连接原子尺度动力学与宏观爆轰性能的多尺度模拟方法。为应对上述挑战，我们发展了非定域子系统密度泛函理论，用于大规模第一性原理电子结构计算；在结构预测方面，扩展了 CALYPSO 方法，显著提升了预测效率；在爆轰性能计算方面，通过结合大尺度第一性原理方法与原子尺度有效势模型，建立了面向含能材料的快速爆轰性能计算方案。上述方法已成功应用于离子型全氮含能材料的设计中。

**D35-25****DNTF 的合成新方法**

许元刚

南京理工大学

为提高 3,4-二硝基呋喃基氧化呋喃 (DNTF) 合成过程的安全性、降低工艺的毒性, 以 1,3-丙酮二羧酸为原料, 经过脗化、成环、氧化、硝化四步反应, 经过氨基呋喃乙酸、硝基呋喃乙酸两个重要中间体合成了 DNTF, 总收率为 22%, 纯度达 98% 以上。通过单晶 X-射线衍射、核磁共振、红外光谱等表征了关键中间体和产物的结构。通过单因素实验确定了较优的合成工艺, 其中氧化反应收率可达 97%, 硝化反应收率可达 56.5%。通过 DSC、ARC 和 RC1 研究了四步反应的工艺安全风险, 结果表明, 氧化反应工艺危险度较高, 硝化反应的工艺危险度为 2 级。将氧化-硝化进一步优化为一锅法, 期望进一步降低工艺危险度, 增加工程化前景。

**D35-26****含氟高能钝感材料的合成及其应用研究**

鄂秀天凤

北京理工大学

本研究针对含能材料领域的关键科学问题——能量密度与安全性能的协同优化展开深入探索。当前, 以 CL-20 为代表的第三代含能材料虽具有超高能量密度, 但其本征感度制约了工程化应用; 而以 HMX、RDX 为典型代表的第二代材料虽机械感度较低, 但能量性能已逼近理论极限。基于此, 本研究创新性地采用杂合甘脲作为骨架分子, 通过分子设计与调控, 成功合成了一系列新型 CHNOF 系高能化合物。实验结果表明, 所设计化合物实现了爆速与感度的协同提升, 能量密度较 RDX 分别提高了 4% 和 11%, 同时机械感度显著优于 CL-20。此外, 该系列化合物展现出独特的双功能特性: 一方面可作为高能组分提升配方能量; 另一方面, 其含氟特性使其成为一种理想的含能包覆剂, 通过表面修饰可显著改善固体推进剂中铝粉的点火延迟, 并有效解决氧化铝壳层的阻燃问题。本研究为发展高能低感含能材料提供了新的分子设计策略和理论基础。

**D35-27****基于生长机理模型与定制力场的 LLM-105 晶体形貌预测研究**

李永杰\*

中国工程物理研究院化工材料研究所

LLM-105 是一种性能优良的低感高能炸药, 但其晶体形貌受工艺条件影响很大, 从而影响其产品性能的稳定性。如何依据应用需求实现对 LLM-105 晶体形貌的调控, 是当前工程化研究的热点与难点问题, 这需要深入理解其晶体形貌生长的微观机制。本研究通过优化力场参数和引入生长机理模型, 对 LLM-105 的晶体形貌预测展开研究, 同时探讨了溶剂效应以及过饱和度对其形貌的影响, 预测结果与实验结果非常吻合, 所采用的生长机理模型通过考虑生长动力学对 LLM-105 晶体形貌的影响, 提供了更大的可解释性, 与传统的修正附着能 (MAE) 模型有着根本区别。此外, 通过结合独立梯度 (IGM) 模型和对称适应微扰理论 (SAPT) 方法, 发现 LLM-105 晶体中存在着强烈的  $\pi$ - $\pi$  堆积作用和氢键相互作用。本研究为 LLM-105 的可控制备提供了一定的理论指导。

**D35-28****基于乳液法的 TKX-50 氧平衡调节研究**

张宝\*

中国工程物理研究院化工材料研究所

在对外工作过程中，负氧平衡的 5,5'-双四唑-1,1'-二氧羟铵盐 (TKX-50) 的能量没有得到充分释放，导致能量利用效率低，产生污染环境的有害气体。在此基础上，为了调节 TKX-50 的氧平衡，采用乳液法制备了正、零、负氧平衡的纳米 TKX-50/AP 复合材料。纳米 TKX-50/AP 复合材料的形貌与刺猬状球形颗粒相似，表面形成了许多致密的孔隙，平均粒径约为 30  $\mu\text{m}$ 。在合成过程中，部分 TKX-50 与 AP 反应生成 5,5'-双四唑 1,1'-二氧化酰胺 (ABTOX)。零氧平衡 TKX-50/AP 复合材料的第一个热分解峰温度为 236.0 $^{\circ}\text{C}$ ，与 TKX-50 相比略有降低。第二热分解峰温度为 275.1 $^{\circ}\text{C}$ ，比 TKX-50 高 22.2 $^{\circ}\text{C}$ 。零氧平衡 TKX-50/AP 复合材料的放热量达到 2206  $\text{Jg}^{-1}$ ，比 TKX-50 提高了 35.9%，能量利用效率也大大提高。零氧平衡 TKX-50/AP 复合材料 50% 爆炸概率下落高度 ( $H_{50}$ ) 为 63.5 cm，摩擦敏感性爆炸概率为 72%。与 TKX-50 相比，分别上升 15.1 cm 和下降 28%。结果表明，TKX-50 的机械安全性能得到了改善。

### D35-29

#### 用于复杂 N-苄基化合物氢解的高活性蜂群式移动催化剂的设计策略

王俊杰、孙成辉、庞思平\*

北京理工大学

六硝基六氮杂异伍兹烷 (HNIW 或 CL-20) 是含能材料领域最重要的分子之一，而六苄基六氮杂异伍兹烷 (HBIW) 是合成 CL-20 的重要前体，开发在近室温下 HBIW 氢解脱苄基的高效催化剂意义重大。通常，这些催化剂中的金属位点被认为是静态的，这限制了具有特殊笼形结构的复杂有机分子 (如 HBIW) 的反应效率。本研究提出并验证了基于“锚定-限域效应”协同诱导的蜂群式移动催化剂设计策略，通过增加活性位点和反应物及中间体之间的碰撞概率来提高催化效率。使用实验结合模拟的研究方法，证明在协同效应下形成的超小  $\text{Pd}(\text{OH})_2$  纳米颗粒 (约 1.85 nm) 迅速转化为参与反应的可移动 Pd 物种，具有分级大-中-微孔的特殊载体有效增强了传质过程。在近室温下，该催化剂在 HBIW 氢解脱苄基反应中表现出最高的活性，实现了 161.4 的高周转数 (TON) 和 91.4% 的产品收率，Pd 用量仅为 HBIW 的 0.85 wt%。这一策略的成功实施为用于多维复杂分子的高效多相催化剂的设计和合成提供了新的思路。

### D35-30

#### 通过新型叠氮离子液体安全、绿色、高效合成叠氮聚合物

李霄羽\*

北京理工大学材料学院

叠氮聚合物在点击化学、光交联材料、含能材料等领域表现出多种独特且优异的性质，一直是化学和材料科学领域的热点之一。由于多数含叠氮基团的单体具有较高的感度，叠氮聚合物的合成通常需要先合成带有离去基团的聚合物前驱体，然后再对其进行叠氮化反应。然而，为保证叠氮化反应完全，通常需要在高温下 (>100  $^{\circ}\text{C}$ ) 长时间 (>24h) 与易爆、强碱性、剧毒的叠氮化钠反应，并大量使用 DMF 等有毒溶剂，这将造成叠氮聚合物产物的分子量降低，分子量分布变宽，分子链端基不可控等问题，并带来环境污染、安全等风险，严重阻碍了其进一步的应用研究。在此，我们报道一种基于新型叠氮离子液体的聚合物叠氮化方法。作者通过分子结构设计，在离子液体的阳离子结构中引入三甘醇基团，使离子液体具有合适的极性，良好的热稳定性和机械感度、低玻璃化转变温度和粘度，并极大提高了多种聚合物前驱体和产物在其中的溶解度。相比于传统基于叠氮化钠的叠氮化反应，利用叠氮离子液体对模型小分子进行叠氮化的反应速率常数更高，对功能基团的耐受性更好。在对多种聚合物前驱体的叠氮化的实验中，叠氮离子液体均可以在温和的条件下实现几乎定量的叠氮化反应，且多数情况下无需加入其它有机溶剂。基于该方法，作者首次合成了数均分子量达 10 万以上的超高分子量聚叠氮缩水甘油醚 (GAP)。叠氮离子液体在完成叠氮化反应后，还可以通过离子交换进行再生进行循环利用，进一步降低其使用成本。这一研究结果为叠氮聚合物的合成提供了一条更加安全、绿色、高效的路线。

### D35-31

#### 高维度无溶剂 EMOFs 的构筑

李劲松, 张锦浩, 郝文嘉, 罗利琼, 金波  
(西南科技大学, 四川 绵阳 621010)

金属-有机框架材料 (metal-organic framework, MOFs)<sup>1</sup> 是一类由金属离子或金属簇与多齿有机配体通过配位键桥连自组装构筑的周期性网络结构的晶态材料。采用含能配体和金属中心通过配位作用构筑而成的 MOFs 材料展现出高能量密度的特征,因此也称为含能金属有机骨架 (EMOFs),为协调含能材料内部高能量和低感度的矛盾和发展新型高能低感含能材料提供了新的思路<sup>2,3</sup>。本课题组选用唑类单环、联环及稠环为配体,从金属中心、温度、溶剂以及阴离子的引入等方面着手,力求构筑无溶剂分子的三维 EMOFs。前期利用羟基四唑联三唑(TzTO)与 Pb(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> 分别在 120°C 和 160 °C 下的水热反应合成了两种具有不同维度的 EMOFs, 1D 链状结构的 [Pb(TzTO)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> (CCDC: 2243290) 和 3D 框架结构的 [Pb<sub>2</sub>(TzTO)<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> (CCDC: 2243585)。与 1D 链状结构相比, 3D 框架结构表现出更高的密度、更优异的热稳定性和更低的机械感度,这对于 Pb 基 EMOFs 具有重要的意义。以氨基咪唑联羟基四唑 HAFTO 作为配体,探究了不同金属中心、温度和溶剂对构筑高维度或无溶剂 EMOFs 的影响,进一步研究了其结构对性能的影响,初步获得了构筑高维度或无溶剂 EMOFs 的策略<sup>4</sup>。研究表明,高维度的 EMOFs 也表现出了更高热稳定性和更低机械感度。利用 3-氨基-6-(3,5-二甲基吡唑)-1,2,4-三唑[4,3-b][1,2,4,5]四嗪 (AMPTTz) 与不同金属盐反应,通过水热法制备了 9 种含有配阴离子的 EMOFs,初步探索了构建策略的可行性。目前 EMOFs 材料还存在应用出口不明晰、爆轰性能预测准确度低等问题,但我们针对高氮金属配合物进行了激光起爆特性研究,已经完成了 [Co<sub>2</sub>(DNBT)<sub>2</sub>(4-ATr)<sub>3</sub>] (CCDC:2297046)、[Cu<sub>2</sub>(DNBT)<sub>2</sub>(4-ATr)<sub>3</sub>] (CCDC:2266997)<sup>5</sup>、[Pb(DNOBT)]<sub>n</sub> (CCDC:2297530)、[Ba(DNOBT)]<sub>n</sub> (CCDC:2297535)、[Cu(AzTTO)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> (CCDC: 2297536)及 [Zn(AzTTO)(4-ATr)]<sub>n</sub> (CCDC: 2248833)等含能金属有机框架材料的激光起爆试验。

(1) Li, H.; Eddaoudi, M.; O’Keeffe, M.; Yaghi, O. M. Design and Synthesis of an Exceptionally Stable and Highly Porous Metal-Organic Framework. *Nature* **1999**, *402* (6759), 276–279. <https://doi.org/10.1038/46248>.

(2) Feng, Y.; Liu, X.; Duan, L.; Yang, Q.; Wei, Q.; Xie, G.; Chen, S.; Yang, X.; Gao, S. In Situ Synthesized 3D Heterometallic Metal–Organic Framework (MOF) as a High-Energy-Density Material Shows High Heat of Detonation, Good Thermostability and Insensitivity. *Dalton Trans.* **2015**, *44* (5), 2333–2339. <https://doi.org/10.1039/C4DT03131H>.

(3) Zhang, Q.; Shreeve, J. M. Metal–Organic Frameworks as High Explosives: A New Concept for Energetic Materials. *Angew Chem Int Ed* **2014**, *53* (10), 2540–2542. <https://doi.org/10.1002/anie.201310014>.

(4) Zhang, J.; Guo, Z.; Song, Y.; Hao, W.; Peng, R.; Jin, B. Hydrogen Bond and 3D Frameworks to Reconcile the Conflict between Safety and Detonation Performance in Energetic Metal–Organic Frameworks. *Chem. Eng. J.* **2023**, *453*, 139762. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.139762>.

(5) Li, J.; Hao, W.; Zhang, T.; Xu, D.; Liu, Q.; Deng, H.; Shen, J.; Peng, R.; Feng, C.; Jin, B. Coordination Competition Strategy for Constructing High-Energy Photosensitive Complexes. *Inorg. Chem.* **2025**, *64* (8), 3771–3779. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c04650>.

## D35-32

### 含能材料：吡唑类含能材料、含能增塑剂、含能聚合物的创制

周昌林\*

三峡大学

本课题组围绕含能材料的稳定性和爆轰性能,以分子设计为核心、贯通含能晶体、含能增塑剂至含能聚合物全链条创制的新策略,以解决传统含能材料在能量、安全及加工性能间的权衡难题。研究聚焦于高

能分子骨架的模块化设计与功能化衍生：首先，在含能晶体分子工程方面，通过精准调控高氮稠环、多硝基/硝胺基团分子间作用力（氢键、 $\pi$ - $\pi$ 堆积等），创制出兼具高能量密度与低感度的新型含能晶体（2-脒基-3-偕二硝基吡啶内盐），为下游提供高能晶体。其次，基于含能晶体优势基元（偕二硝基硝基、吡啶环），通过官能团修饰（引入醚键、酯键、叠氮基）与柔性链段结合，合成出兼具高能量、低熔点、低粘度、低迁移率及优异相容性的新一代含能增塑剂[3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙基 3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙酸酯(BAAMP-P)]，用以克服传统硝化甘油迁移性高、稳定性差的瓶颈。最后，通过叠氮基丙烯酸单体的合成，利用乳液聚合技术与常规丙烯酸酯、苯乙烯、醋酸乙烯等单体，精准构筑侧链含能化的高性能聚合物，其分子结构可调控玻璃化转变温度 ( $T_g$ )、力学强度及相容性。核心突破在于建立了“含能基元→分子设计→性能调控→应用验证”的创新链条，实现了能量-安全协同（分子内/间协同作用及能量释放优化，在提升能量水平[爆速 $>8000$  m/s, 爆压 $>29$  GPa]的同时显著降低感度 ( $IS>30$  J,  $FS>300$  N)]、加工-性能协同（新型增塑剂与聚合物改善复合材料低温韧性、加工流变性 & 长期稳定性）以及结构-功能一体化（聚合物集成能量承载、力学支撑、钝感包覆的功能），为先进武器系统小型化、高能化、钝感化提供核心材料支撑。本工作展示了分子设计在打通含能材料“基础单元-功能助剂-基体材料”全链条创制中的强大力量，奠定了下一代高安全、高能量、多功能含能材料发展的科学基础与技术路径。

### D35-33

#### 含能材料在冲击载荷下的分子动力学响应研究

吴双、鲁寨军\*

中南大学交通运输工程学院

含能材料因其优异的能量密度广泛应用于航空航天、兵器与民用爆破等领域，但其在外界冲击作用下的响应复杂且难以预测，成为制约其安全应用的关键问题。本研究采用分子动力学方法，从原子尺度出发，模拟含能材料在冲击载荷下的结构演化和分解行为，探索其微观机制与性能关联。通过构建典型模型体系，分析不同含能材料在冲击过程中的能量转化、键断裂路径与主要气体产物演化趋势，揭示其力学稳定性与能量释放模式的内在联系。研究表明，含能材料的分子结构特征在很大程度上影响其响应行为，部分新型不敏感含能材料在保持能量输出的同时展现出良好的冲击稳定性。该工作有助于理解含能材料的冲击诱导演化规律，为其安全设计与性能预测提供理论支持。

### D35-34

#### 基于高密度氢键网络的高聚物粘结炸药构筑与性能

刘佳辉\*、潘丽萍、杨志剑、聂福德

中国工程物理研究院化工材料研究所

高聚物粘结炸药 (polymer bonded explosive, PBX) 是高固体颗粒填充的含能复合材料，为了确保能量输出特性，炸药颗粒含量通常大于 90%。力学性能是 PBX 重要的设计性能之一。炸药晶体、高分子粘结剂、功能助剂之间界面相异性使得 PBX 界面作用较弱，如何提升界面强度已成为制约力学性能提升的关键和技术难题。相转变溶菌酶(PTL)和聚醚硫脲(TUEG)是两种均含丰富的活性基团、非极性不水解的新材料，具备与含硝基的炸药分子形成氢键作用的潜力。本研究以提高 PBX 的力学性能为目标，基于界面增强的思路，引入相转变溶菌酶和聚醚硫脲为界面增强剂，进而在氢键对 PBX 界面增强作用机制研究基础上，提出构筑高密度氢键网络 PBX 的界面增强调控思路。结果表明，以富含氢键活性位点的相转变溶菌酶和聚醚硫脲为键合剂，均可在 PBX 中起到力学增强的效果。含溶菌酶的 HMX 基 PBX 巴西强度为 7.9MPa，较不含溶菌酶的 PBX 可提高 31.7%。溶菌酶包覆对 HMX 的  $\beta \rightarrow \delta$  相变有显著抑制作用，可将 HMX 的相转变温度由 198°C 提高到 234°C。以 0.25wt% 聚醚硫脲为键合剂时，PBX 的巴西强度为 8.5MPa，断裂功为  $1.69 \times 10^4$  J  $m^{-3}$ ，较使用 F2314 为粘结剂的 PBX 巴西强度可提高约 39.6%，断裂功可提高约 74.2%。以溶菌酶为界面层，以聚醚硫脲为粘结剂设计得到的 HMX 基高密度氢键网络 PBX，随着氢键层次的不断增加，PBX 的力学性能递进提升，基于高密度氢键网络的复合炸药设计可达到力学增强的目的。

**D35-35****Synthesis of insensitive high-density energetic materials through molecular self-assembly**Jinhao Zhang<sup>a</sup>, Jichuan Zhang<sup>a,b\*</sup>, Jiaheng Zhang<sup>a,\*</sup><sup>a</sup> Sauvage Laboratory for Smart Materials, Harbin Institute of Technology, Shenzhen 518055, China; <sup>b</sup> Department of Chemistry, University of Idaho, Moscow, Idaho 83844-2343, USAEmail: [jichuanz@uidaho.edu](mailto:jichuanz@uidaho.edu), [zhangjiaheng@hit.edu.cn](mailto:zhangjiaheng@hit.edu.cn)

The development of insensitive high energy materials through a simple strategy is a challenge.<sup>1-2</sup> Molecular self-assembly, which depends on intermolecular interactions, such as hydrogen bonding,  $\pi$ - $\pi$  stacking or halogen bonding, has demonstrated huge promises in various fields of chemical materials, such as molecular recognition, medicine cocrystal, transportation of active pharmaceutical ingredients, and gas separation, etc.<sup>3-5</sup> In the previous work, we made a breakthrough through self-assembly of TNPDO (2,4,6-triamino-5-nitropyrimidine-1,3-dioxide) and TNBI (4,4',5,5'-tetranitro-2,2'-bi-1*H*-imidazole) sensitive molecule, to be a high-energy insensitive material (TNPDO-TNBI). More excitingly, TNPDO-TNBI shows higher density and higher thermal stability than that of either precursor. In this work, five insensitive high energy materials: TNPDO-ADNP (**1**), TNPDO-DNBT (**2**), TNPDO-55BT (**3**), TNPDO-DNABO (**4**), and TNPDO-BTO (**5**) were prepared by reaction between TNPDO, a high density insensitive base and five high energy acids: ADNP (4-amino-3,5-dinitro-1*H*-pyrazole), DNBT (3,3'-dinitro-5,5'-bis-1,2,4-triazole), 55BT (5,5'-bitetrazole), DNABO (2,2'-dinitramino-5,5'-bis-1*H*,1'*H*-oxa-3,4-diazole), and BTO (1*H*,1'*H*-5,5'-bitetrazole-1,1'-diol) through molecular self-assembly in aqueous solution. All compounds exhibit high density ( $>1.85 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ), acceptable decomposition temperature ( $>185 \text{ }^\circ\text{C}$ ), high detonation performance ( $>8376 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ,  $>27.80 \text{ GPa}$ ) and insensitivity ( $>40 \text{ J}$ ,  $>360 \text{ N}$ ). The detonation properties of **3** are higher than either of its corresponding precursors, and the density of **4** is  $1.96 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ , with detonation velocity and pressure of  $8895 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  and  $33.32 \text{ GPa}$ , respectively, which is comparable with that of RDX. The density of **5** is  $1.87 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ , higher than either of its precursors. Simple preparation, insensitivity, acceptable thermal stability and excellent detonation properties make these five materials promising. This work may pave the way to the preparation of low sensitive or insensitive high energy materials through simple preparation.

**References**

- [1] J. Zhang, L. A. Mitchell, D. A. Parrish and J. M. Shreeve, *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, **137** (33), 10532-10535.
- [2] J. Zhang, J. Zhang, D. A. Parrish and J. M. Shreeve, *J. Mater. Chem. A*, 2018, **6** (45), 22705-22712.
- [3] Q. Lai, L. Pei, T. Fei, P. Yin, S. Pang and J. M. Shreeve, *Nat. Commun.*, 2022, **13** (1), 6937-6946.
- [4] A. J. Bennett, L. M. Foroughi and A. J. Matzger, *J. Am. Chem. Soc.*, 2024, **146** (3), 1771-1775.
- [5] Q. Lai, Y. Long, P. Yin, J. M. Shreeve and S. Pang, *Acc. Chem. Res.*, 2024, **57** (19), 2790-2803.

**D35-36****从甲基桥到羰基桥——一步修饰带来含能材料稳定性和能量水平的双提升**

杨易岭、孙成辉\*

北京理工大学

为了解决高能和稳定性之间的矛盾，研究人员提出了桥联策略，旨在利用电子效应和共轭来提高化合

物的稳定性。然而，这种策略并不总是完美的。桥联方式的改变可能会导致化合物能量性能的不确定性，另外更换一种桥需要重新合成整个化合物，增加实验工作量。为了简化策略，在这项工作中，对桥联化合物的桥的修饰被证实是一种有效的方法。随着氧原子的引入，化合物 4（双（3,5-二硝基-1H-吡唑-4-基）甲酮）表现出优异的密度（ $1.91 \text{ g/cm}^3$ ），热分解温度从 HL-9 的  $261^\circ\text{C}$  提高到  $270^\circ\text{C}$ ，表现出良好的爆轰性能（ $V_d=8604 \text{ m/s}$ ）和灵敏度（ $IS>40\text{N}$ ），是一种潜在的钝感炸药。此外，化合物 7 双（1-氨基-3,5-二硝基-1H-吡唑-4-基）甲酮显著缓解了引入  $\text{N-NH}_2$ （从 1 的  $192^\circ\text{C}$  到 7 的  $242^\circ\text{C}$ ）后 HL-9 热稳定性降低的问题，具有良好的爆轰性能（ $V_d=9044 \text{ m/s}$ ），接近 HMX，使其成为一种潜在的二次炸药。这两种化合物在能量和稳定性方面实现了双重提高，证实了引入共轭效应来修饰桥可以全面提高含能化合物的性能。

## 墙报

### D35-P01

#### 交联剂对结晶高增塑 PEG 基体的力学性能调节机制

王耀霄、刘耀华、周星\*

国防科技大学

增强粘合剂基体的承载能力是提高高能硝酸酯增塑聚醚（NEPE）推进剂力学性能的主要技术途径。NEPE 推进剂基体作为一种高增塑聚乙二醇（PEG）聚氨酯弹性体，存在抗拉强度差的明显力学短板，且其网络结构、氢键作用和结晶性能决定其力学性能，但影响机制尚不明确。本研究通过制备含不同交联剂和交联参数的三乙酸甘油酯增塑 PEG 弹性体，结合单轴拉伸、溶胀法、XRD 和 ATR-FTIR，揭示了网络结构、氢键程度及结晶性的对基体力学性能影响关系，并找准了抗拉强度的关键影响因素。研究表明，PAO(3)交联剂主要通过影响交联网链进而对基体力学性能产生显著影响。三星型聚氧化烯烃（PAO(3)）交联参数从 0.01 到 0.1，网链密度变化率高达 9%，随着交联网链比例增大，弹性体抗拉强度和最大伸长率均先增大后减小。三羟甲基丙烷（TMP）交联参数从 0.10 增加到 0.30，氨基甲酸酯  $\text{C=O}$  总氢键化程度变化率高达 9%，其中主要为无序氢键的变化（7%）。随着  $\text{C=O}$  总氢键化程度增加，弹性体抗拉强度和最大伸长率均降低。蓖麻油（CTO）交联剂对弹性体综合力学性能无明显提升作用。

### D35-P02

#### 合成可行性评估及其在含能分子高通量设计中的应用

张益宁<sup>1,2</sup>、张志翔<sup>1,2</sup>、文琳元<sup>1,2</sup>、刘英哲<sup>\*1,2,3,4</sup>

1. 西安近代化学研究所
2. 西安市液晶与有机光电转换材料重点实验室
3. 含能材料全国重点实验室
4. 氟氮化工新材料全国重点实验室

对现有合成可行性打分模型工作原理的探讨，有助于开发适用于含能分子的打分模型。本研究首先简要回顾了传统的合成可行性评估方法，包括依赖经验直觉的方法和基于反应能垒计算的方法，并指出这两种方法难以满足高通量筛选的需求。接着，系统梳理了当前主流的 10 种合成可行性打分模型，并根据打分原理将其划分为基于分子结构的打分模型和基于合成路线的打分模型。最后，进一步探讨了现有合成可行性打分模型在含能分子高通量设计中的应用情况。研究表明，现有合成可行性打分模型在含能分子领域的适用性尚未明确，存在数据样本不足等问题，导致开发专用的打分模型极具挑战。

### D35-P03

#### 一种具有高合成效率、爆轰性能和铝反应活性的对偶网络多离子含能材料

闫赞帆、郭铭禹、张伟雄\*、陈小明

中山大学

钙钛矿型氧燃一体化结构已被用作一种可靠的平台,用于直接从非含能有机前体出发,通过一锅法非共价组装来制备新兴的多元离子集成含能材料。<sup>1-6</sup>探索非钙钛矿结构以克服其化学计量限制,对于定向设计构筑这类新兴含能材料至关重要,但当前缺乏指导原则。在此,我们提出了一种“互穿对偶网络策略”,设计出一例空前的多离子含能材料 $(\text{H}_2\text{eda})_2(\text{NH}_4)(\text{ClO}_4)_5$ (命名为EAP-4,其中 $\text{H}_2\text{eda}^{2+}$ =乙烷-1,2-二铵阳离子)。在EAP-4中,一个钨酸钙型网络(其中 $\text{NH}_4^+$ 和 $\text{ClO}_4^-$ 占据特殊位置)与其对偶的氟化钙型网络(由 $\text{H}_2\text{eda}^{2+}$ 和剩余的 $\text{ClO}_4^-$ 离子构成)相互穿插,形成了一个非钙钛矿的 $I4_1/a$ 结构。这种独特的结构特征赋予了EAP-4罕见的正氧平衡(+6.3%,超过了所有已知的含能钙钛矿材料)、高合成效率(在10分钟内实现超过70%的产率)以及高达 $1.912\text{克}\cdot\text{厘米}^{-3}$ 的晶体密度。这个创新设计使EAP-4成为一种双功能材料:(1)作为炸药,可比军用标杆炸药黑索今(RDX)爆轰性能更高且更易规模化制备;(2)作为固体氧化剂:可比常用氧化剂高氯酸铵(AP)有显著提升的热分解效率(24.5倍)且更强的铝反应活性。这项工作不仅为调控含能材料提供了一个非钙钛矿氧燃一体结构范例,而且可促进多离子杂化材料的系统开发。

#### 参考文献:

- [1] S.-L. Chen, Z.-R. Yang, B.-J. Wang, Y. Shang, L.-Y. Sun, C.-T. He, H.-L. Zhou, W.-X. Zhang, X.-M. Chen, *Sci. China Mater.* **2018**, *61*, 1123-1128.
- [2] Y. Shang, R.-K. Huang, S.-L. Chen, C.-T. He, Z.-H. Yu, Z.-M. Ye, W.-X. Zhang, X.-M. Chen, *Cryst. Growth Des.* **2020**, *20*, 1891-1897.
- [3] W.-X. Zhang, S.-L. Chen, Y. Shang, Z.-H. Yu, X.-M. Chen, *Energ. Mater. Front.* **2020**, *1*, 123-135.
- [4] Y. Shang, S.-L. Chen, Z.-H. Yu, R.-K. Huang, C.-T. He, Z.-M. Ye, W.-X. Zhang, X.-M. Chen, *Inorg. Chem.* **2022**, *61*, 4143-4149.
- [5] Z.-H. Yu, D.-X. Liu, Y.-Y. Ling, X.-X. Chen, Y. Shang, S.-L. Chen, Z.-M. Ye, W.-X. Zhang, X.-M. Chen, *Sci. China Mater.* **2022**, *66*, 1641-1648.
- [6] S.-L. Chen, Y. Shang, J. Jiang, M. Huang, J.-t. Ren, T. Guo, C.-x. Yu, W.-x. Zhang, X.-m. Chen, *Energ. Mater. Front.* **2022**, *3*, 122-127.

#### D35-P04

##### 叠氨基丙烯酸酯乳液聚合技术: 新型含能粘合剂绿色合成与性能调控

雷润民、周昌林\*

三峡大学

尽管以端羟基聚丁二烯(HTPB)和聚叠氮缩水甘油醚(GAP)为代表的传统聚氨酯黏接体系已实现能量输出与反应调控的优化,但其复杂的合成工艺(如多步反应及苛刻条件)限制了含能粘合剂的发展。例如,采用阳离子开环聚合合法合成双叠氮甲基氧杂环丁烷聚醚-四氢呋喃共聚物(PBT)时,单体双叠氮甲基氧杂环丁烷(BAMO)需经氯化、关环及叠氮取代三步反应制得,且共聚反应需在 $0^\circ\text{C}$ 以下进行并依赖有机溶剂,不符合绿色合成要求。本研究突破传统工艺局限,通过两步法高效合成叠氨基丙烯酸酯单体:首先以卤代醇经叠氮取代反应制备叠氨基醇,再与丙烯酰氯酯化制得目标含能单体。进而利用乳液聚合技术,将叠氨基丙烯酸酯等含能单体与丙烯酸正丁酯(低玻璃化转变温度单体)共聚,调控链段结构,实现高生成焓与柔韧性的平衡。该体系无需有机溶剂,可水分散化合成,既解决了传统合成中条件苛刻、环境风险高的难题,又为含能黏合剂在含能晶体表面的安全包覆提供了绿色技术路径,推动其工程应用与环保性能的提升。

**D35-P05****含能增塑剂 3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙基 3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙酸酯的合成与性能**

高均熠、周昌林\*

三峡大学

本研究针对叠氮基含能增塑剂对双叠氮甲基氧杂环丁烷聚醚-四氢呋喃共聚物(PBT)体系的增塑效果开展系统性研究,旨在构建兼具高能量密度与优异力学性能的高性能含能材料体系。通过分子设计策略合成新型叠氮基增塑剂分子,通过氧化的方法,使氧化后的三叠氮新戊醇单体和另一个三叠氮新戊醇发生酯化,合成 3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙基 3-叠氮基-2,2-双(叠氮甲基)丙酸酯(BAAMP-P),缩短了分子链,提高了能量密度。反应采用核磁共振光谱(NMR)、傅里叶变换红外光谱(FT-IR)、差示扫描量热法(DSC)等表征技术,系统解析增塑剂与 PBT 基体的相容性机制、分子链相互作用及热力学行为。研究结果显示,叠氮基增塑剂通过有效削弱 PBT 分子间非共价相互作用,实现玻璃化转变温度(T<sub>g</sub>)的显著降低,并显著提升材料的柔韧性与加工窗口温度范围。结果表明,BAAMP-P 对 PBT 体系具有预期的调节作用,在理论模拟部分,通过构建分子模型、无定形模型,分析体系平衡,计算均方位移(MSD)、径向分布函数(RDF)以及相互作用能和结合能,系统评估 BAAMP-P 与 PBT 的结合强度、扩散行为及动力学性质。BAAMP-P 与 PBT 具有良好的相容性和稳定的结合能力,其中平均结合能可以达到 442 kcal/mol,体系整体表现为强吸引作用,验证了其在实际应用中的可行性。在 PBT 体系中具有广泛的应用前景。本研究揭示了叠氮基增塑剂对 PBT 体系的微观塑化机制及结构-性能关联规律,为高能推进剂、柔性炸药等领域的新型含能材料分子设计与工程应用提供了理论依据与实验支撑。

**D35-P06****官能团协同策略构建高能钝感含能化合物**

寇奥、何春林\*

北京理工大学材料学院

官能团协同策略在设计 and 开发强大的高能分子中发挥着重要作用。在该研究中,我们设计并合成了由多基团和稠环系统组合的新型含能化合物: (5-氨基-8,9-二硝基吡唑并[1,5-a][1,2,4]三唑并[1,5-c][1,3,5]三嗪-2-基)二硝基甲基铵盐 (5); 2-(二硝基甲基)-8,9-二硝基吡唑并[1,5-a][1,2,4]三唑并[1,5-c][1,3,5]三嗪-5-胺 (6) 和 8,9-二硝基-2-(三硝基甲基)吡唑基[1,5-a][1,2,4]三唑基[1,5-c][1,3,5]三嗪-5-胺 (7)。其中化合物 5 展示出最高的热分解温度(T<sub>d</sub> = 183 °C), 化合物 6 与化合物 7 表现出高于 RDX 的密度(6: ρ = 1.818 g·cm<sup>-3</sup>; 7: ρ = 1.856 g·cm<sup>-3</sup>)以及 RDX 相当的爆轰性能(6: D<sub>v</sub> = 8433 m·s<sup>-1</sup>, P = 30.0 GPa; 7: D<sub>v</sub> = 8787 m·s<sup>-1</sup>, P = 33.5 GPa)。三种化合物均表现出较低的感受度(5: IS = 18 J, FS = 96 N; 6: IS = 20 J, FS = 112 N; 7: IS = 18 J, FS = 80 N)。综上所述化合物 7 作为一种高能钝感含能化合物有着巨大的应用潜力。

**D35-P07****分子内环化与含能基团修饰制备兼具热稳定性与低感度的偕二硝基单环吡唑内盐**

谢青山、周昌林\*

三峡大学

两性离子盐(内盐)含能材料兼具高爆轰性能与稳定性的特点,但其合成与稳定性提升仍是重大挑战。本研究报道了一种高稳定性的二硝基甲基官能化两性离子化合物——2-脒基-3-偕二硝基吡唑内盐(4)的合成,其热分解温度高达 215 °C,显著优于先前报道过的大多数单环含能内盐(T<sub>d</sub> < 150 °C)。该化合物系通过三硝基甲基功能化脒前体的分子内环化反应合成。基于此,通过对化合物 4 进行硝化、氟化等化学修饰,成功实现了向硝胺类化合物(10 与 12)的转化。此外,合成了化合物 4 的高氯酸盐(8),以及由化合物 10 衍生得到的铵盐(13)、胍盐(14)和钾盐(15),上述盐类均保留了其内盐特征。理化性能测试表明,硝胺类两性离子化合物 12 具有优异的热稳定性(T<sub>d</sub> = 181 °C),并在高能量输出(爆速 8329 m·s<sup>-1</sup>;

爆压 29.4 GPa) 与低感度 (撞击感度 35 J; 摩擦感度 320 N) 之间实现了良好平衡; 尤其值得注意的是, 钾盐 15 展现出卓越的热稳定性 ( $T_d = 233\text{ }^\circ\text{C}$ ), 其值已超越 RDX (黑索金)。本研究拓展了含能两性离子盐的设计框架, 为发展高能低感含能材料提供了重要参考。

### D35-P08

#### 含能材料机器学习研究的数据优化策略

刘辰昊, 张蕾, 庞思平

北京理工大学

机器学习作为新兴的数据驱动技术, 为含能材料的智能化研发提供了新的技术途径。然而, 含能材料的数据稀缺与数据异构性并存的难题, 已成为制约其建模精度与推广应用的核心瓶颈。围绕当前含能材料数据的获取路径与存在的问题, 从“数量扩展”与“质量提升”两个维度评述了主流的数据优化策略。在数据数量扩展方面, 介绍了 SMILES 枚举、生成对抗网络与迁移学习等技术在提升模型泛化能力中的应用进展; 在数据质量提升方面, 探讨了异常值识别、预处理规范、特征工程对增强模型鲁棒性与可解释性的作用。研究表明, 合理的数据优化不仅能有效缓解数据匮乏问题, 还能显著提升模型在小样本和复杂结构条件下的预测稳定性与结构外推能力。最后, 提出构建高通量实验平台、统一数据标准及发展智能化闭环体系的未来方向, 为推动含能材料的数据生态构建与智能研发提供了可行路径与方法参考。

### D35-P09

#### Advancing green primary explosive design: A methyl-driven strategy for aromaticity modulation and safety enhancement

Benyue Guo

Beijing Institute of Technology

The synthesis of conventional organic primary explosives poses significant safety challenges. A novel strategy for designing primary explosives has been developed, featuring the incorporation of a non-energetic methyl group into a fused ring system. This approach enabled the safe and efficient preparation of 2-methyl-4,7-nitroamino-1H-imidazo[4,5-d]pyridazine (**MNIP**), a compound demonstrating considerable potential as a primary explosive. **MNIP** demonstrates superior energetic performance and enhanced safety parameters ( $v = 7710\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ;  $FS = 120\text{ N}$ ), significantly outperforming the classical organic primary explosive **DDNP**. Theoretical and experimental analyses reveal that the methyl group effectively modulates the aromaticity of the fused ring system and weakens intermolecular hydrogen bonding interactions, resulting in enhanced sensitivity characteristics. Furthermore, energetic salts derived from **MNIP** were synthesized and characterized, exhibiting favorable thermal stability ( $T_d \geq 185\text{ }^\circ\text{C}$ ) while maintaining appropriate impact sensitivity ( $< 2\text{ J}$ ). Synthesis of **MNIP** is efficient and economical in terms of material costs, suggesting its considerable potential as a next-generation metal-free primary explosive for practical use.

### D35-P10

#### 结构诱导含能配位化合物作为激光起爆药添加剂的研究

范博文, 崔猛, 郭国聪\*

中国科学院福建物质结构研究所, 福建 福州, 350002

\*Email: gcguo@fjirsm.ac.cn

激光起爆技术其中之一的有效解决方案是通过激光刺激激光敏感型起爆药能快速实现燃烧转爆轰, 并因其抗电磁干扰、可控性强等优势, 让其可成为电起爆的安全替代方案。商用叠氮化铅 (LA) 激光起爆阈值高 (最小起爆能量  $E_{\min} = 2402\text{ mJ}$ ), 现有金属配合物起爆药则存在起爆能力弱、阈值高等局限。因此改良

或开发一款激光起爆阈值低、爆轰能力强、机械和静电感度相对较低、热稳定性高的起爆药仍然是一个艰巨挑战。为解决上述问题，本研究首次提出以含结构诱导的高能配位化合物（ECCs）作为 LA 添加剂，通过溶剂热反应合成两例结构诱导的叠氮钴基四唑配合物  $[\text{Co}(\text{N}_3)(2\text{-bmtz})(\text{H}_2\text{O})_2]_2$  **1** 和  $[\text{Co}(\text{N}_3)(2\text{-bmtz})(\text{MeOH})_2]_2$  **2**。

### D35-P11

#### 面向绿色固体推进剂：兼具高抗湿性与可规模化的 ADN 含能共晶

王影，荆建权，夏宏蕾，张庆华\*

固体推进国家重点实验室，西北工业大学，陕西西安，710072

\*E-mail: qinghuazhang@nwpu.edu.cn

作为新一代绿色固体推进剂氧化剂，二硝酰胺铵（ADN）兼具高比冲和低燃烧信号特征，展现出极高的应用前景。然而其严重的吸湿性始终阻碍着 ADN 的实际应用。为应对这一挑战，我们打破了传统的经验发现模式，开创性地提出了一种性能导向的设计策略，用于设计耐湿的 ADN 基离子共晶。基于改进的团簇结合能（IBEC）分析，我们发现 ADN 的湿敏性源于阳离子-阴离子的协同相互作用。因此，我们引入了一种“双重相互作用”策略，要求共晶配体（coformer）能够同时与  $\text{NH}_4^+$  和  $\text{N}(\text{NO}_2)_2^-$  作用，筛选出 3,4-二氨基咪唑（DAF）作为共晶配体。由此获得的新型 ADN/DAF 共晶实现了前所未有的耐湿性：在所有 ADN 共晶中展现出最高的临界相对湿度（CRH = 84.0%，25 °C）；在 75% RH/35°C 条件下放置 175 小时后，吸湿量接近于 0 ( $\Delta m < 0.25\%$ )。该共晶在保持高性能（基于 GAP 推进剂的比冲  $I_{sp} = 267.73$  s）的同时，显著提高了安全性（撞击感度：16 J vs. ADN: 5 J）。ADN/DAF 共晶展现出优异的工程应用潜力，且已通过连续生产工艺成功实现百克级规模合成，且收率高 (>88%)。本研究为设计耐湿 ADN 基离子共晶提供了新思路，展示了其在绿色推进剂工业应用中的巨大潜力。

### 仅发表论文

### D35-PO01

#### 高活性金属配合物燃料合成与性能研究

李小龙、葛明成、徐鲜、张建国、李志敏\*

北京理工大学 爆炸科学与安全防护国家重点实验室，北京 100081

含能材料是一种能快速释放能量，产生热、气体、光等效应的特殊功能物质，完成毁伤、运载或特种效应，在武器系统、航天工程、民用爆破等领域发挥着不可替代的作用，燃料是混合含能材料的重要组分，与氧化剂快速反应释放出大量能量。高活性金属配合物一般由强还原活性阴离子、高能配体和金属中心离子组成，具有反应活性高、结构可设计性强、能量释放可控、感度低等特点，作为一类新型燃料展现出良好的应用潜力。（1）以氰基硼氢根（CBH）为阴离子，4,4'-重氮-1,2,4-三唑（ATRZ）为配体，Zn 为中心金属离子，设计合成了一种高活性金属配合物燃料 ( $[\text{Zn}(\text{ATRZ})_4(\text{CBH})_2]_n$ , HACC-296)，X-射线单晶衍射测得 HACC-296 的分子结构为三维骨架结构，晶体密度  $1.548 \text{ g/cm}^3$ 。（2）差示扫描量热分析表明 HACC-296 的分解温度为 179 °C；采用氧弹量热仪测试其燃烧热为  $-15.88 \text{ kJ/g}$ ，由此计算出质量能量密度为  $15.8 \text{ kJ/g}$ ，体积能量密度为  $24.5 \text{ kJ/cm}^3$ ，生成焓为  $510.6 \text{ kJ/mol}$ ；采用 BAM 落锤仪和摩擦感度仪测试了 HACC-296 的机械感度，撞击感度为 30 J，摩擦感度为 288 N。（3）以 HACC-296 为燃料， $\text{KClO}_4$  为氧化剂，酚醛树脂为粘结剂，设计并制备了基于高活性金属配合物的点火药，测得点火药的燃烧热为  $5.25 \text{ kJ/g}$ ，点火测试峰值压力及响应时间分别为 3.23 MPa 和 11.07 ms，线燃速为  $124.6 \text{ mm/s}$ ，作为一种新型点火药，表现出良好的应用前景。

### D35-PO02

#### 采用电化学法在多孔碳骨架中原位制备钝感复合含能材料

李宗佑\*

## 北京理工大学

金属有机骨架 (MOFs) 材料因其独特的多孔结构在含能材料领域展现出应用潜力, 但其本征导电性不足的特性限制了其在电化学合成过程中的传质效率。本研究创新性地采用碳化处理策略, 将 MOF 材料 UiO-66 前驱体转化为多孔碳基载体。结果显示, 所得碳化 UiO-66 在保持原有三维多孔结构的同时, 导电率得到明显优化, 且表面暴露出丰富的活性位点。基于此优势, 我们设计了一种电化学原位合成体系: 以碳化 UiO-66 骨架作为工作电极, 通过精确调控电解液成分和电沉积参数, 实现了偶氮四氢唑啉 (ATHF) 在碳骨架内的沉积生长。实验证实, 这种空间限域效应使 ATHF 的机械感度显著降低, 同时碳骨架表面的活性位点对其热分解行为具有催化作用。通过电化学合成法使含能材料沉积在多孔碳骨架中的策略使复合含能材料的机械感度降低, 且生产过程有效规避了传统合成工艺的安全风险。

## D35-PO03

基于 AgN<sub>5</sub> 的高能释放复合体系构筑及其性能研究

尹磊、秦凯毅、尹鹏超、林秋汉\*

南京理工大学化学与化工学院

为优化五唑银 (AgN<sub>5</sub>) 的分解和燃烧性能, 提高其能量释放速率, 采用溶剂挥发和共沉淀法制备了 AgN<sub>5</sub> 和氧化石墨烯 (GO)、聚多巴胺 (PDA) 复合含能材料。通过 SEM、FT-IR、XPS 确定含能材料的形貌和结构, 通过 TG-DSC 和反应动力学模拟讨论了材料的热分解性能和机理, 通过热丝点火确定 AgN<sub>5</sub> 的燃烧爆炸性能。结果表明, AgN<sub>5</sub>-3%GO-1%PDA 的结构从片状变成具有较厚涂层的颗粒, 粒径明显减小; N<sub>5</sub><sup>-</sup> 红外吸收峰增强, 结合能增加, 材料之间紧密结合; AgN<sub>5</sub>-3%GO-1%PDA 与 AgN<sub>5</sub> 的热分解相比, 逐级分解温差缩小了 25.4 °C, 活化能降低 19.5 kJ mol<sup>-1</sup>, 热分解机理为随机成核和随后生长; 爆轰增长时间从 33.33 μs 缩减到 16.67 μs, 证明了 AgN<sub>5</sub>-3%GO-1%PDA 具备更快的能量释放速率。这些研究可为五唑金属盐的性能优化及其复合材料制备提供参考。

## D35-PO04

## 不同锂含量的铝锂合金热氧化特性及其燃烧特性研究

陈珊珊\*、黄蕾、周星

国防科技大学

铝粉是固体推进剂中最常用的金属燃料, 但其存在燃烧效率偏低、燃烧过程容易聚集结块等问题。合金粉可通过熔点、微爆炸效应等方面有效抑制铝粉结块和提高燃烧效率。基于此, 本文选用 Al-Li 合金作为研究对象, 研究了不同 Li 含量对 Al-Li 合金粉的热氧化和燃烧性能的影响, 并对其燃烧产物进行表征。结果表明, 与纯 Al 相比, 铝基合金粉的燃烧热更高, 且随 Li 含量增加, Al-Li 合金粉的低温氧化放热量增大, Al-Li 合金粉热氧化温度降低, 有利于 Al 的氧化。在燃烧产物中发现有铝锂氧化物生成, 随 Li 含量增加, 该产物含量增大, 说明燃烧进一步反应的更加充分。

## D35-PO05

## 基于 Python 语言的 hexaazaisowurtzitane 笼型骨架的前体筛选方法

王余\*

Hexaazaisowurtzitane 笼型骨架的合成一直是含能材料领域研究热点之一。这里, 基于 pubchem chemistry database, 利用 python 语言命令对 liquid primary amine 进行了筛选和分析, 得到了 14 种潜在合成 Hexaazaisowurtzitane 笼型骨架的 liquid primary amine。