

含能材料化学基础研究发展方向及思考

岳秦^{1,2}, 康强^{1*}

1. 国家自然科学基金委化学科学部, 北京 100085

2. 电子科技大学基础与前沿研究院, 成都 610054

*通讯作者, E-mail: kangqiang@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2024-08-25; 接受日期: 2024-09-28; 网络版发表日期: 2024-11-01

摘要 国家自然科学基金委员会于2018年对学科布局进行了优化, 设立了材料化学与能源化学学科(B05)一级代码, 增设了“含能材料化学”二级申请代码。本文通过梳理“含能材料化学(B0510)”在2018~2023年间的申请和资助情况, 论述含能材料化学的学科内涵, 分析含能材料化学基础研究现状及存在的问题, 并对该方向未来的发展和布局提出了思考和建议。

关键词 国家自然科学基金委, 含能材料化学, 学科布局, 申请代码

1 引言

含能材料是一类储存有大量化学能、在特定外界刺激下能以爆炸或燃烧等方式快速释放能量的亚稳态物质, 可以是单质化合物或混合物^[1]。在技术应用领域, 含能材料是实现设备发射、推动和特定作业效果的重要能源, 对相关工业的发展起着核心作用。在民用应用中, 含能材料在建筑拆除、资源开发、节日庆典等活动中扮演着关键角色, 为经济发展提供了有效支持^[2]。因此, 对含能材料进行系统化和创新性的研究, 是推动该学科进步的基础, 对于提升国家综合实力和促进经济繁荣具有显著影响。

含能材料是集计算化学、合成化学、分析化学、晶体科学、复合材料、燃烧学、爆炸力学等多学科为一体的综合性学科。2018年, 国家自然科学基金委员会化学科学部对学科布局进行了优化, 设立了材料化学与能源化学学科(B05)一级代码, 增设了“含能材料化

学”二级申请代码(B0506), 下设“含能分子设计与合成”、“含能材料性能调控与评价”、“超高能材料化学”、“含能材料安全性与稳定性”4个三级代码(B0506, 01-04)^[3]。2021年, 化学三处遵循国家自然科学基金委员会改革精神进一步优化学科布局, 将材料化学和能源化学学科进行重新布局, 取消三级代码, 材料化学保留B05学科申请代码, 将下设的“含能材料化学”代码调整为B0510。本文将通过梳理2018~2023年间“含能材料化学”领域申请与资助情况, 论述含能材料化学的学科目标内涵, 分析含能材料化学基础研究现状及存在的问题, 并对其未来发展方向提出了一些思考和展望。

2 含能材料化学的目标和内涵

根据不同的能量释放方式和应用场景, 含能材料可分为炸药、发射药与推进剂、火工药剂三大类^[4]。

引用格式: Yue Q, Kang Q. The development and perspectives of fundamental research on chemistry of energetic materials. *Sci Sin Chim*, 2025, 55: 302–309, doi: [10.1360/SSC-2024-0187](https://doi.org/10.1360/SSC-2024-0187)

其中, 炸药是以爆轰形式做功的一类含能材料, 主要用作导弹、炮弹等战斗部的毁伤单元, 或用于定向爆破拆除、爆炸焊接等民用领域; 发射药与推进剂是以燃烧形式释放能量, 主要用作弹丸、导弹、火箭等推进系统的动力来源; 火工药剂是以爆炸或爆燃的形式释放能量, 作为起爆/传爆单元完成战斗部的引爆、火箭推进器分离等功能, 或产生声、光、烟、热等效应。因此, 含能材料相关研究涵盖了分子、晶体、配方、部件等多个层面, 其研发、生产、储存与应用均涉及多个层面的基础性科学问题。

含能材料化学的研究重点是关注高密度化学能的储存、快速释放及应用等基础性科学问题, 按照研究方向可分为(图1): (1) 新型含能分子设计与合成; (2) 含能材料的理论模拟与计算; (3) 含能晶体工程调控; (4) 纳米含能材料的制备与调控; (5) 复合含能材料的制备与调控; (6) 含能材料的性能评价与构效关系。

3 2018~2023年含能材料化学的申请与资助概况

3.1 面上、青年基金

面上项目(面上)、青年科学基金项目(青年)是基金委项目中涵盖面最广、数量最多的基金类型。图2总结了自2018年“含能材料化学”二级代码启用以来, 面上和青年项目申请与资助的总体情况。2018~2020年, 含能材料化学面上项目申请数由2018年的64项, 逐年增加至86项和92项, 分别占同年B05面上项目总数的4.7%、6.2%和5.7%。青年项目从2018年的85项, 增加至106、130项, 分别占比于同年B05青年基金总数的5.7%、6.6%和6.4%。2021年, 能源化学作为单独的新一级代码(B09)从原B05(材料化学与能源化学)中分出来; 同时, 国家自然科学基金委出台新的限项政策将“2020年起获批/申请项目的主要参与人也计入限项”。在代码调整和限项政策的引导下, 2021年面上和青年项目的申请数量有所下降, 分别为69项和117项, 但其在同年B05面上和青年项目总数中占比明显提升, 分别为7.3%和9.4%。之后, 面上和青年项目申请数基本保持稳定, 含能材料化学B0510项目资助率和同年B05的平均资助率相当。除2020年外, 面上项目的资助率均维持在20%以上, 近6年平均资助率为21.7%, 高于青年项目4.2个百分点, 说明青年项目竞争更为激烈。在项



图 1 (网络版彩图)含能材料化学的细分研究方向

Figure 1 (Color online) The subdivision directions on chemistry of energetic material.

目申请总数方面, 青年项目的平均申请量为114项/年, 明显高于面上项目(75.2项/年), 也是青年学者积极参与含能材料研究的具体表现, 为含能材料化学的创新发展注入了新鲜活力。总体而言, 每年度面上项目的申请总量较为稳定, 青年项目申请总量稳中有升, 每年度的面上和青年项目资助率均较为稳定, 在20%左右上下浮动。

表1梳理了2018~2023年含能材料化学面上和青年项目申请数量最多的前7家依托单位, 面上项目申请数最多的单位依次是中国工程物理研究院化工材料研究所、南京理工大学、北京理工大学、西安近代化学研究所、西南科技大学、湖北航天化学技术研究所以及中北大学。这7家单位的面上项目申请数量占含能材料化学申请总数的74.7%。资助率以中国工程物理研究院化工材料研究所居首, 达37.8%, 南京理工大学、北京理工大学和西安近代化学研究所资助率均超20%。青年项目申请数量最多的单位依次是西安近代化学研究所、中国工程物理研究院化工材料研究所、北京理工大学、湖北航天化学技术研究所、南京理工大学、中北大学以及西南科技大学。这7家单位的青年项目申请数占含能材料化学申请总数的70.9%, 资助率以南京理工大学居首, 达39.2%, 中国工程物理研究院化工材料研究所和北京理工大学的项目资助率也均超

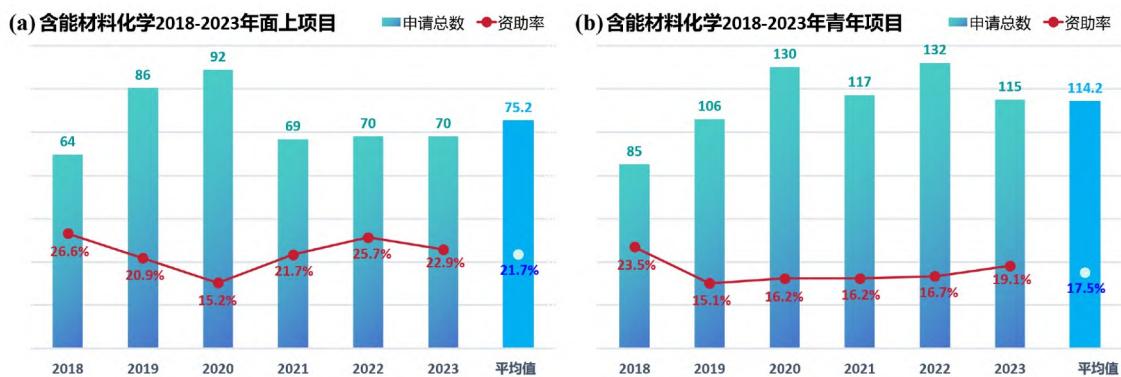


图2 (网络版彩图) (a, b) 2018~2023年含能材料化学的面上项目和青年项目申请及资助总体情况

Figure 2 (Color online) (a, b) The application and funding of general, youth, and regional programs in chemistry of energetic material from 2018 to 2023.

表1 2018~2023年含能材料化学面上和青年项目申请数量前七家依托单位分布情况

Table 1 The top seven affiliations for the applications of general and youth programs on chemistry of energetic material from 2018 to 2023

面上项目				青年项目			
依托单位	申请	批准	资助率(%)	依托单位	申请	批准	资助率(%)
中国工程物理研究院化工材料研究所	82	31	37.8	西安近代化学研究所	168	22	13.1
南京理工大学	55	16	29.1	中国工程物理研究院化工材料研究所	111	32	28.8
北京理工大学	49	13	26.5	北京理工大学	51	14	27.5
西安近代化学研究所	48	11	22.9	湖北航天化学技术研究所	45	4	8.9
西南科技大学	38	4	10.5	南京理工大学	41	16	39.0
湖北航天化学技术研究所	34	5	14.7	中北大学	41	1	2.4
中北大学	31	3	9.7	西南科技大学	29	5	17.2

过20%。

图3和4分别总结了炸药、发射药与推进剂、火工药剂三类含能材料的面上和青年基金申请和资助情况。总体而言,无论是面上还是青年项目,都以炸药、发射药与推进剂两类材料的研究为主,年均申请数量占比含能材料化学项目总数量的90%左右(其中炸药占比近50%,发射药与推进剂占近40%),火工药剂约占10%。从申请总量来看,项目分布情况基本合理,与它们在装备中所承担的功能、重要程度以及需求等较为匹配。在资助率方面,炸药相关研究项目的资助率最高(近6年合计:面上项目为25.5%,青年项目为19.8%),火工药剂类的资助率次之(近6年合计:面上项目为22.9%,青年项目为16.7%),发射药与推进剂资助率最低(近6年合计:面上项目为16.4%,青年项目为14.6%)。

表2梳理了2018~2023年间不同类型含能材料在主

要依托单位的分布情况。可以看出,炸药相关的面上项目主要来自于中国工程物理研究院化工材料研究所(63项)、南京理工大学(28项)、北京理工大学(27项)、西南科技大学(23项)、中北大学(21项)和西安近代化学研究所(20项);而发射药与推进剂相关的面上项目主要来自于湖北航天化学技术研究所(30项)、西安近代化学研究所(28项)。对于青年项目,炸药相关项目主要来自于中国工程物理研究院化工材料研究所(82项)、西安近代化学研究所(77项)、北京理工大学(37项)和中北大学(22项);发射药与推进剂相关的项目主要来自于西安近代化学研究所(91项)、湖北航天化学技术研究所(37项)和南京理工大学(20项);火工药剂相关的面上和青年项目主要来自于中国工程物理研究院化工材料研究所、南京理工大学、北京理工大学和中北大学。

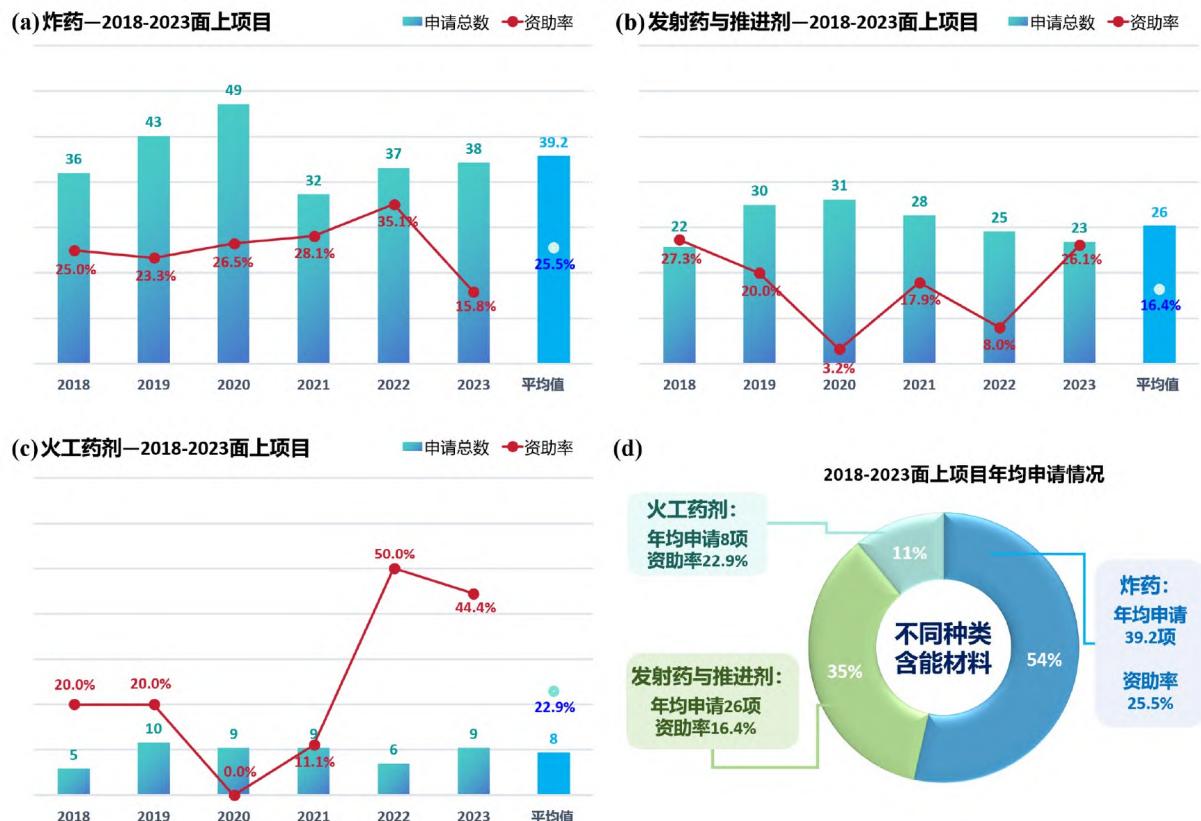


图 3 (网络版彩图) (a-d) 2018~2023年不同类型含能材料的面上项目申请及资助情况

Figure 3 (Color online) (a-d) The application and funding of general programs for different types of energetic materials from 2018 to 2023.

表 2 2018~2023年不同类型含能材料在主要依托单位的分布情况

Table 2 The distribution of different types of energetic materials in the main applicant affiliations from 2018 to 2023

依托单位	面上项目(申请)			青年项目(申请)		
	炸药	发射药与推进剂	火工药剂	炸药	发射药与推进剂	火工药剂
中国工程物理研究院化工材料研究所	63	6	13	82	15	14
南京理工大学	28	18	9	19	20	2
北京理工大学	27	15	7	37	9	5
西安近代化学研究所	20	28	0	77	91	0
西南科技大学	23	11	4	16	11	2
湖北航天化学技术研究所	2	30	2	8	37	0
中北大学	21	4	6	22	14	5

表3和图5汇总了含能材料化学领域不同研究方向的面上和青年项目申请和资助情况。其中,含能材料分子设计与合成研究方向的项目申请数均最高(近6年合计: 面上项目为142项, 青年项目为206项), 资助率也较高(近6年合计: 面上项目为26.1%项, 青年项目为

24.3%), 分别处于面上和青年项目资助率的第二和第一位置。新型含能分子创制属于含能材料的源头创新, 高的申请项目数和资助率将有效保障含能材料化学的高质量发展。值得关注的是, 含能晶体工程调控研究方向面上项目近6年的合计资助率为31.4%, 是各细分研

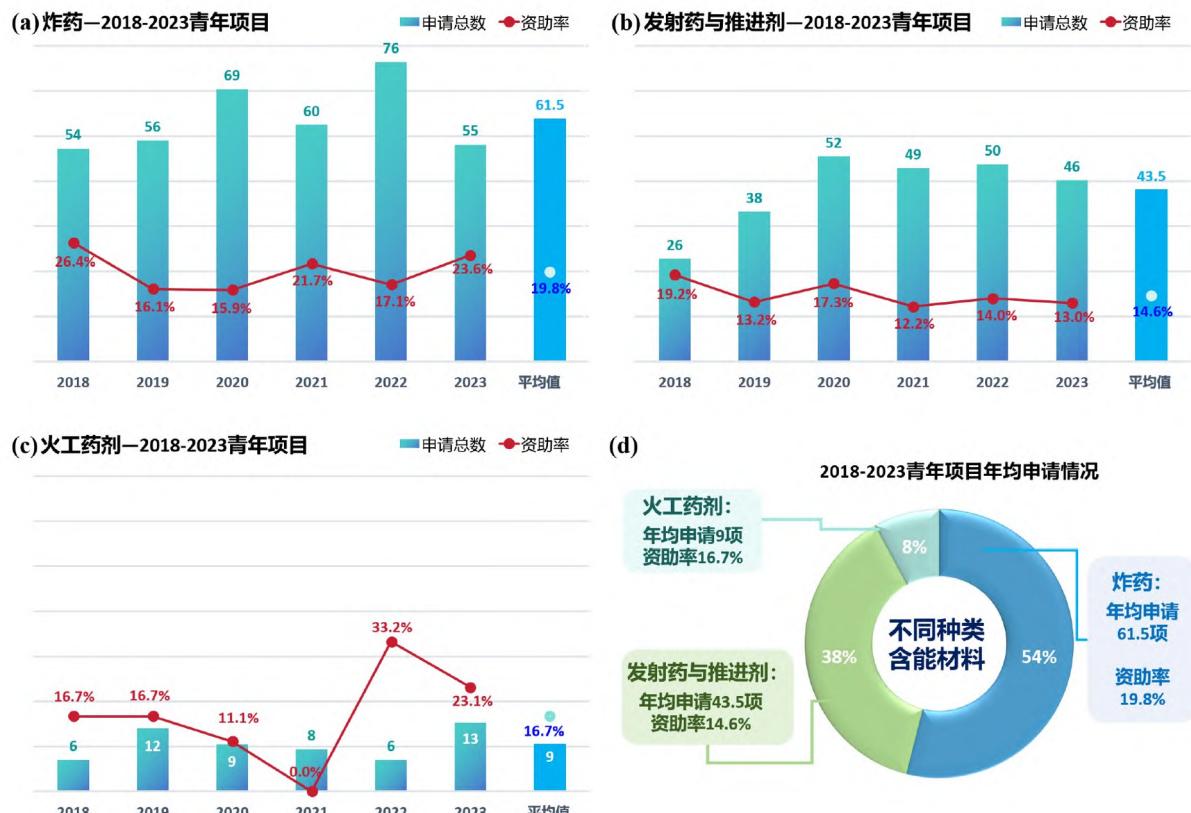


图 4 (网络版彩图) (a-d) 2018~2023年不同类型含能材料的青年项目申请及资助情况

Figure 4 (Color online) (a-d) The application and funding of youth programs for different types of energetic materials from 2018 to 2023.

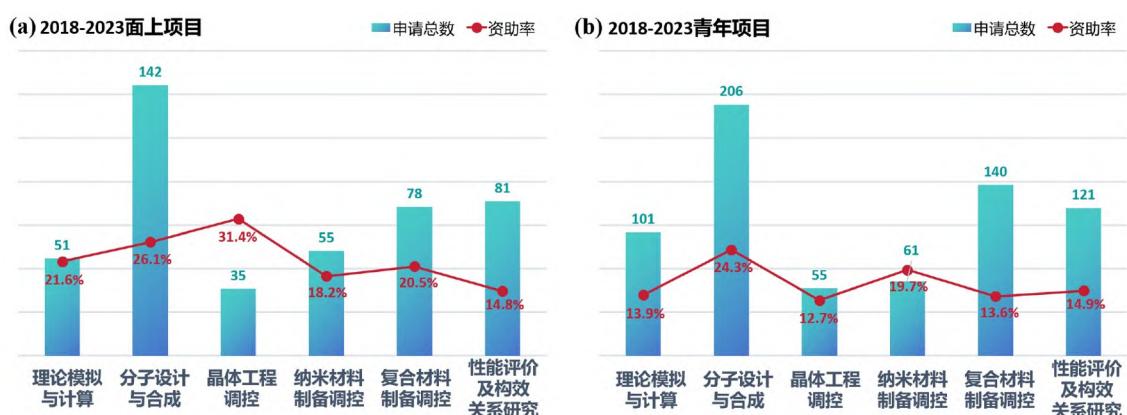


图 5 (网络版彩图) (a, b) 2018~2023年含能材料化学面上和青年项目申请总量及资助率(按研究方向划分)

Figure 5 (Color online) (a, b) Applications and funding of the general and youth programs on chemistry of energetic material from 2018 to 2023 (classified by research direction).

究方向的最高资助率，体现出领域内对该研究方向的关注；而该方向青年项目近6年的合计资助率仅为12.7%，处于各细分研究方向的最低位置。类似的问题

也存在于理论计算与模拟、复合材料制备与调控这两个研究方向，这些方向的青年研究人员需投入更多精力，加强科学问题的凝练、夯实研究基础，提高项目

表 3 2018~2023年含能材料化学面上和青年项目汇总(按研究方向划分)**Table 3** Summary of the general and youth programs on chemistry of energetic material from 2018 to 2023 (classified by research direction)

研究方向	类型年份	面上项目						青年项目					
		2018	2019	2020	2021	2022	2023	2018	2019	2020	2021	2022	2023
理论模拟与计算	申请数	7	14	8	4	11	7	13	11	20	1-	23	24
	获批数	3	2	1	1	2	2	3	2	1	1	2	5
	资助率(%)	42.9	14.3	12.5	25.0	18.2	28.6	23.1	18.2	5.0	10.0	8.7	20.8
分子设计与合成	申请数	25	21	32	23	17	24	34	35	32	36	41	28
	获批数	6	6	9	10	4	2	9	6	8	8	9	10
	资助率(%)	24.0	28.6	28.1	43.5	23.5	8.3	26.5	17.1	25.0	22.2	22.0	35.7
晶体工程调控	申请数	5	9	5	5	7	4	8	8	10	12	8	9
	获批数	2	3	0	1	4	1	1	0	2	3	0	1
	资助率(%)	40.0	33.3	0.0	20.0	57.1	25.0	12.5	0.0	20.0	25.0	0.0	11.1
纳米材料制备控	申请数	4	7	7	16	9	12	9	11	8	20	8	5
	获批数	1	1	1	1	2	4	4	1	0	5	0	2
	资助率(%)	25.0	14.3	14.3	6.3	22.2	33.3	44.4	9.1	0.0	25.0	0.0	40.0
复合材料制备调控	申请数	15	13	15	12	11	12	10	11	35	24	31	29
	获批数	4	2	1	2	2	5	2	1	6	2	5	3
	资助率(%)	26.7	15.4	6.7	16.7	18.2	41.7	20.0	9.1	17.1	8.3	16.1	10.3
性能评价与构效关系调控	申请数	7	19	22	9	13	11	11	30	25	15	21	19
	获批数	0	4	2	0	4	2	1	6	4	0	6	1
	资助率(%)	0.0	21.1	9.1	0.0	30.8	18.2	9.1	20.0	16.0	0.0	28.6	5.3

资助率.

3.2 其他项目

2018~2023年其他项目类型申请和资助情况如下:国家重大科研仪器研制项目申请2项, 资助1项; 重点项目申请3项、资助2项; 杰出青年科学基金申请7人次, 资助1项; 优秀青年科学基金申请20人次, 资助1项; 联合基金重点支持项目申请18人次, 资助4项。

4 含能材料化学的发展布局

含能材料是实现设备破坏和运输任务的关键能源, 同时也是航天推进和民用爆破活动的能量来源。加强含能材料化学的基础研究, 致力于提高我国在含能材料理论和应用领域的基础水平, 是增强国家综合实力以及有效应对复杂国际环境的必要条件。目前, 含能材料化学的创新发展主要面临基础理论和研发模式

两个方面的挑战。

基础理论方面, 当前的主要挑战集中在“如何突破能量密度极限”和“如何实现能量与安全性平衡”两个关键问题上。更高的能量密度和毁伤效能是新型含能材料研发追求的目标。传统CHON类炸药, 从TNT、RDX、HMX到CL-20, 能量水平一直在提高。然而, 理论预测表明, CHON类炸药的理论最大密度为 2.2 g/cm^3 , 其能量上限约为HMX的130%左右, 向上空间已相对有限^[5,6]。理论上, 全氮化合物、聚合氮、金属氢等被预测是潜在的高能物质, 但稳定性和安全性较差, 目前还处在探索研究阶段^[7-9]。因此, 如何突破CHNO类炸药的能量极限仍是未来一段时间内基础科学研究所面临的重要挑战之一。此外, 含能材料的能量水平与其分子稳定性相互制约, 能量越高, 分子化学键减弱, 安全性降低^[10]。过去, 含能材料研究更多基于化学储能与释能而实现做功目标, 相对缺乏基础性原理上的重大创新, 导致能量与安全性矛盾无法从根本上

解决, 高安全性含能材料的设计理论和创制技术尚未取得实质性突破。随着未来技术系统对能量和安全性的双重要求, 开发具有更高能量效率和更优安全性的含能材料是当前的重点和紧迫任务^[11]。

研发模式方面, 由于含能材料用途的特殊性和危险性, 与其他领域相比存在一定壁垒, 常将一些新技术拒之门外, 导致整体发展相对缓慢。目前, 含能材料的基础研究仍缺乏原创性的设计理论、制备技术以及研发模式的创新, 主要表现为: 一是新型含能材料的设计与制备主要依赖于现有的科学知识和研究框架, 其创新速度可能无法满足未来国家发展的需求; 二是新型含能材料研发多以“试错法”模式为主, 研发效率低、应用面狭窄; 三是技术运行所需的含能材料数据库尚不完善, 大量实验数据分散在不同机构中, 建立通用、可交换、可更新的含能材料数据库仍存在一定困难。

针对当前含能材料发展面临的挑战, 建议未来含能材料化学在以下研究方向重点开展研究(图6): (1) 加快推进新型含能分子设计与计算模拟技术的发展, 建立含能材料数据库平台, 促进人工智能技术在含能材料设计中的应用, 提升含能材料的设计水平; (2) 借助高通量实验和自动化技术, 提升含能材料制备水平, 实现含能材料制备的自动化与智能化; (3) 开展含能材料表界面基础研究, 掌握含能材料结构与性能的内禀关系及多尺度、多物理场耦合关系, 实现含能材料性能的按需定制; (4) 发展新概念含能材料, 加强基于颠覆性设计原理的新一代含能材料探索研究, 认识其能量储存-释放机制及基础规律; (5) 加快推进含能材料与其他技术(如光电催化、增材制造、微流控等)的交

叉融合及应用, 为新一代含能材料的创新发展提供关键技术支撑; (6) 针对含能材料性能评价, 开展新方法新原理探索, 发展高通量、快速、小药量、无损评价性能方法, 提升性能评价效率, 突破对新型含能材料难以进行性能实测性能的瓶颈。

5 展望

含能材料是关键基础材料, 先进的含能材料技术是应对现代挑战的重要支撑。当前, 国际环境多变, 国家发展和民族复兴面临复杂的安全挑战, 加强含能材料化学的基础性、系统性研究, 研发新一代含能材料势在必行。

(1) 自2018年基金委化学部启用“含能材料化学”二级代码以来, 在学科布局的不断优化下, 含能材料化学学科展现出良好的发展势头, 项目申请数基本保持稳定, 资助率与B05的平均资助率相当。作为基础性材料, 随着含能材料化学与其他学科的进一步交叉融合, 相关研究的广度和深度上有较大提升的空间。

(2) 从含能材料类型的资助情况来看, 建议科研人员加强对发射药和推进剂类含能材料的基础性研究; 从含能材料化学的细分研究方向的资助情况来看, 建议含能材料性能评价与构效关系、含能晶体工程调控、含能材料的理论模拟与计算、复合含能材料性能调控这些研究方向的研究人员加强基础研究的深度。

(3) 加强含能材料传统研究手段与新兴前沿技术的交叉融合, 尤其是与人工智能、高压科学、流动化学等新技术的耦合, 丰富含能材料化学的研究手段, 支撑含能材料基础研究的创新发展。



图 6 (网络版彩图)含能材料化学未来发展方向

Figure 6 (Color online) Future development directions on chemistry of energetic material.

参考文献

- 1 Klapötke TM. *Chemistry of High-energy Materials*. Berlin: De Gruyter, 2011
- 2 Wang ZS. *Introduction to Energetic Materials*. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2006 (in Chinese) [王泽山. 含能材料概论. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2006]
- 3 National Natural Science Foundation of China. *National Natural Science Fund Guide to Programs 2018*. Beijing: Science Press, 2018 (in Chinese) [国家自然科学基金委员会. 2018年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2018]
- 4 Luo YJ, Pang SP, Li GP. *Novel Energetic Materials*. Beijing: National Defence Industry Press, 2015 (in Chinese) [罗运军, 庞思平, 李国平. 新型含能材料. 北京: 国防工业出版社, 2015]
- 5 Sun Q, Ding N, Zhao C, Zhang Q, Zhang S, Li S, Pang S. *Sci Adv*, 2022, 8: eabn3176
- 6 Zhang W, Zhang J, Deng M, Qi X, Nie F, Zhang Q. *Nat Commun*, 2017, 8: 181
- 7 Zhang C, Sun C, Hu B, Yu C, Lu M. *Science*, 2017, 355: 374–376
- 8 Xu Y, Wang Q, Shen C, Lin Q, Wang P, Lu M. *Nature*, 2017, 549: 78–81
- 9 Loubeyre P, Occelli F, Dumas P. *Nature*, 2020, 577: 631–635
- 10 Zhang MX, Eaton PE, Gilardi R. *Angew Chem Int Ed*, 2000, 39: 401–404
- 11 Wang Y, Liu Y, Song S, Yang Z, Qi X, Wang K, Liu Y, Zhang Q, Tian Y. *Nat Commun*, 2018, 9: 2444

The development and perspectives of fundamental research on chemistry of energetic materials

Qin Yue^{1,2}, Qiang Kang^{1*}

¹ Department of Chemical Science, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

² Institute of Fundamental and Frontier Science, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China

*Corresponding author (email: kangqiang@nsfc.gov.cn)

Abstract: The National Natural Science Foundation of China optimized the layout of disciplines in 2018, which has established the primary code for Materials Chemistry and Energy Chemistry (B05), and added the secondary application code for “Chemistry of Energetic Materials”. This article comprehensively reviews the application and funding summary of “Chemistry of Energetic Materials (B0510)” from 2018 to 2023. We herein discuss the disciplinary connotation about the chemistry of energetic materials, analyze the current status and outstanding problems of fundamental research on the related field, and put forward thoughts and suggestions for the future development.

Keywords: National Natural Science Foundation of China, chemistry of energetic materials, disciplinary layout, application code

doi: [10.1360/SSC-2024-0187](https://doi.org/10.1360/SSC-2024-0187)