factor[J]. *J Cryst Growth*,1980,49: 145 – 156.

[11] Bravais A. Etudes cristallographiques[M]. Paris: Gauthier-Villars, 1866.

[12] Donnay J D H, Harker D. A new law of crystal morphology extending the law of Brayals[J]. *Amer Mineral*,1937,22: 446 – 467.

[13] Berkovitch-Yellin Z. Toward an ab initio derivation of crystal morphology [J]. *J Am Chem Soc*,1985,107(26): 8239 – 8253.

[14] Berkovitch-Yellin Z, van Mil J, Addadi L. Crystal morphology engineering by "tailor-made" inhibitors: A new probe to fine intermolecular interactions[J]. *J Am Chem Soc*,1985,107(11): 3111 – 3122.

Prediction of Crystal Morphology of HMX

DUAN Xiao-hui[1], WEI Chun-xue[1], PEI Chong-hua[1], LI Jin-shan[2]

(1. *College of Materials Science and Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang* 621010, *China*;
2. *Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: The crystal morphologies of α- and β-HMX were predicted by using attachment energy (AE) and Bravais-Friedel-Donnary-Harker (BFDH) models. The important crystal surfaces are (020), (011), (10-2), (11-1), (100) for β-HMX and (040), (220) and (111) for α-HMX. The analyses of the crystal surface structures show that (100) and (111) are greatly polar, and (020), (011), (11-1) and (220) are polar, while (10-2) and (040) are non-polar. It can be predicted that (100) and (111) are the important crystal surfaces in the proton solvents with strong polarity, and the appearance area of (020), (011), (11-1) and (220) is increased, and the (10-2) and (040) surfaces diminishes or disappeares, while the contrary cases occurs in the non-polar solvents.

Key words: physical chemistry; HMX; crystal morphology; attachment energy (AE) model; Bravais-Friedel-Donnary-Harker (BFDH) model; surface structure

读者·作者·编者

第一届韩国国际高能材料研讨会概况

第一届韩国国际高能材料研讨会由韩国仁荷大学(Inha University)于 2009 年 10.6 – 10.9 举办。会议研讨范围主要包括炸药的合成与表征,配方与工艺,炸药的处理及环境影响,模型设计与理论计算等四个方面。参加会议人员 100 多位,分别来自于德国、英国、美国、瑞典、俄罗斯、荷兰、日本、葡萄牙等 15 个国家。参会文章 94 篇,其中合成 18 篇,爆轰 16 篇,推进剂 11 篇,性能及测试研究 11 篇,理论研究 13 篇,晶体制备及结构研究 9 篇,微纳米材料 7 篇,其他 9 篇。本次研讨会分特邀报告(10 篇)、大会报告(24 篇)和海报(52 篇)三个部分进行学术交流。

本次会议内容丰富、完整、系统、水平高。从参会文章看,美国在炸药合成方面的研究较系统,规划了近几年的研究方向。根据目前武器对低感高能炸药的追求,他们认为硝基咪唑类化合物有可能成为钝感弹药的侯选炸药。瑞典从实用出发,加强对现有炸药(FOX-7, FOX-12, ADN, CL-20 等)合成路线进行改进,并对炸药品质(晶体质量或颗粒外貌)进行优化。无论是基础研究,还是应用研究,俄罗斯的研究广泛、深入且系统,例如,他们基于"Evaporation-in-flow" 技术,设计了一种制备亚微米和纳米金属颗粒的装置,可制备分散性好、粒度不同的金属颗粒,用于炸药、推进剂等配方中,可很好控制能量的释放速度。日本着重于基础学术研究,日本 "University of Tokyo" 学者 Mitsuo Izumo 在"Shock compression of a sulfur crystal" 中,通过激光产生的冲击压缩研究了硫单晶的相变、冲击波在晶体中的传播情况、温度和压力在晶体中的变化和分布等,其目标是通过对硫单晶的研究扩展到炸药单晶。从其会议报告可以看出:他们的实验设施先进,基础研究工作深入、系统且理论水平高。韩国的合成工作主要集中在呋咱和含能粘结剂方面,在理论计算方面也很有研究。

(中国工程物理研究院化工材料研究所　李洪珍　供稿)