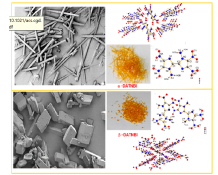


中物院化工材料研究所研究人员发现不敏感高能材料 4,4',5,5'-四硝基-1*H*,1'*H*-[2,2'-咪唑]-1,1'-二胺 (DATNBI)的新晶型

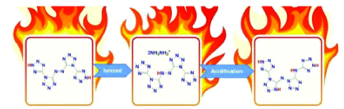
在材料化学与药物化学领域多晶型现象引起了人们的广泛关注。对含能材料而言,多晶型将影响其物理化学性质包括:能量、感度以及热稳定性等。4,4',5,5'-四硝基-1*H*,1'*H*-[2,2'-咪唑]-1,1'-二胺 (DATNBI)是一种高密度($d:1.93$)、高能量($D:9063\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)且感度($IS:15\text{ J}$)较好的不敏感高能材料。中物院化材所研究人员首次发现了 DATNBI 一种新晶型(β -DATNBI)。研究人员采用单晶 X-射线衍射,变温粉末衍射, DSC-TG 及扫描电镜等方法研究了 DATNBI 的相变行为。此外,还研究了溶剂以及温度对 DATNBI 相变的影响。



源自: Zhang, Z., Qian, W., Lu, H., et al. Polymorphism in a Nonsensitive-High-Energy Material: Discovery of a New Polymorph and Crystal Structure of 4,4',5,5'-Tetranitro-1*H*,1'*H*-[2,2'-imidazole]-1,1'-diamine. *Cryst. Growth Des.* 2020, 20, 568–579.

南京理工大学研究人员制备出 $\text{C}_4\text{N}_{18}^{2-}$, $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ 和 $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ 高氮离子盐

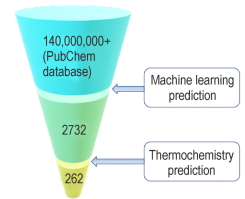
南理工研究人员发现四个四唑环(CN₄)可通过[—N=N—]连接形成高氮的 $\text{C}_4\text{N}_{18}^{2-}$ 阴离子(氮含量 84.0%)。 $\text{C}_4\text{N}_{18}^{2-}$ 阴离子可进一步与胍反应还原成 $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ 阴离子。此外通过与 HCl 反应可生成 $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ 阴离子。并研究了这些新的化合物的物理化学性质。通过单晶 X-射线衍射表征了它们的晶体结构。这些化合物具有比较高的热稳定性($T_d: 165\sim 202$)和爆速($D: 8750\sim 9332\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)。



源自: Dong Z., Ye Z. Synthesis and properties of salts derived from $\text{C}_4\text{N}_{18}^{2-}$, $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ and $\text{C}_4\text{N}_{18}\text{H}^{3-}$ anions. *J. Mater. Chem. A* 2020, 8, 25035–25039.

加拿大麦吉尔大学研究人员采用机器学习方法进行含能材料筛选

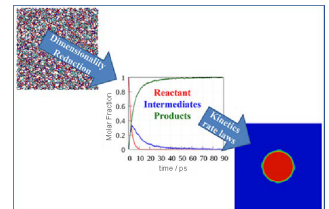
过去 10 年里,数据驱动,机器学习以及材料信息学对于材料研究越来越重要。加拿大麦吉尔大学研究人员采用材料信息学、热化学数据结合机器学习方法进行含能材料筛选。他们采用爆热值衡量含能材料的性能并进行筛选。在众多的描述符中,研究人员发现内聚能和氧平衡是关键的特征值。根据这些描述符和爆热值数据研究人员建立了机器学习模型。并将这一模型应用于 ICSD 和 PubChem 数据库中的化合物,预测它们的爆热值。通过此模型从 1 亿 4000 万化合物中筛选出 2732 个含 CHNO 的候选化合物。在此基础上又筛选出 262 个爆热大于 1.5 倍 TNT 当量的化合物,29 个爆热大于 1.8 倍 TNT 当量的候选物,这些化合物均不是目前常见的含能材料。



源自: Kang, P., Liu, Z., Abou-Rachid, H., Guo H. Machine-learning Assisted Screening of Energetic Materials *J. Phys. Chem. A* 2020, 124, 5341–5351.

美国普渡大学研究人员采用无监督学习的多尺度模型研究 RDX 的热化学

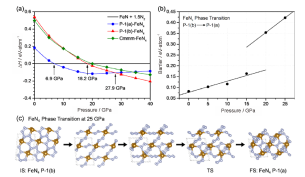
含能材料的热力响应包含了热、机械以及不同尺度化学过程的耦合,因此无法采用单一模型对其进行描述。因此,普渡大学研究人员开发了基于反应动力学与非反应动力学描述化学反应与热传导的 RDX 多尺度连续介质模型。使用均相等温和绝热反应动力学开发了一个简化的化学反应动力学模型。通过非负矩阵分解的无监督学习完成了模型的粗粒化。采用反应动力学方程来描述反应物、中间体以及产物的演化。研究人员对比了分子动力学与连续模型的热点演化结果验证了模型的有效性。研究发现这一多尺度模型很好地模拟了 RDX 热点转爆燃过程的温度场演化。这一模型还被用于评估 RDX 爆轰点火热点临界尺寸,而这一问题在分子动力学模拟无法实现的。



源自: Sakano M., Hamed A., Kober M. et al. Unsupervised Learning-Based Multiscale Model of Thermochemistry in 1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazinane (RDX). *J. Phys. Chem. A* 2020, 124, 9141–9155.

中物院化材所研究人员研究了高压下 FeN_x 结构的稳定性、相变和能量特征

近年来高压下聚合氮引起了人们的广泛关注。Bykov 等人最近在温度 2000 K,压力 106.8 GPa 条件下合成了具有聚合氮链的 P1- FeN_4 。释放压力后,该材料在室温下可存在至 22.7 GPa,这与理论上预测的环境压力下的动态稳定性不一致。为了澄清这种差异,中物院化材所研究人员采用 CALYPSO 软件搜索了高压下 FeN_x 的结构,并采用可变晶胞两端势能面行走法研究了 P1- FeN_4 结构在高压下的相变。结果表明,压力释放时相变势垒呈减小的趋势,而且在 15~20 GPa 时相变路径的改变将势垒减小了一半以上。此外,还评估了富氮高压 FeN_x 化合物的能量特性。尽管 P1- FeN_4 的能量比 RDX 和 HMX 差,但 P1- FeN_5 , C2/m- FeN_6 和 Pnnm- FeN_8 材料仍是潜在的高能量密度材料。



源自: Jiao, F.; Zhang, C.; Xie, W. High-Pressure FeN_x : Stability, Phase Transition, and Energetic Characteristic. *J. Phys. Chem. C*. 2020, 124, 19953–19961.

(中国工程物理研究院化工材料研究所 薛向贵)