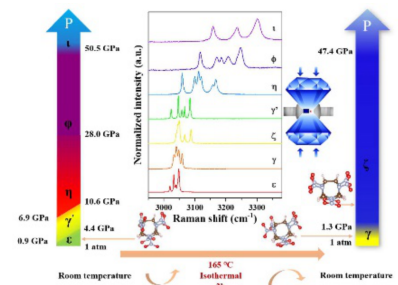


### 中国科学技术大学阐明了 $\epsilon$ -和 $\gamma$ -CL-20在高压下的相变路径

CL-20的多晶型现象引起了广泛关注。中国科学技术大学利用拉曼和中红外光谱研究了压力诱导CL-20相变过程。结果表明,在压力为0.9~4.4 GPa时, $\epsilon$ 晶相的CL-20开始转变为 $\gamma'$ 晶相, $\gamma'$ 晶相明显区别于 $\gamma$ 晶相。当压力进一步增加时 $\gamma'$ 晶相会进一步转变为其它晶相。当压力降低到常压时,相变过程均可逆,新生成的晶相能转变为初始晶相。结果证实了不同晶相CL-20的结构对外界压力具有依赖性。

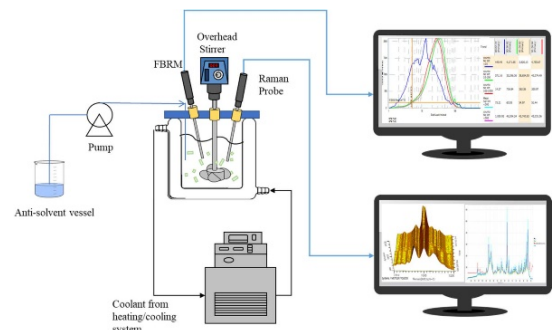
源自: Sun X, Sui Z, Wang J, et al. Phase Transition Routes for  $\epsilon$ - and  $\gamma$ -CL-20 Crystals under High Pressure up to 60 GPa[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, 124: 5061–5068.



### 韩国韩巴大学研究了 $\beta$ -和 $\gamma$ -CL-20的结晶速率

采用原位拉曼光谱和聚焦光束反射率测量系统研究了溶剂/反溶剂法CL-20的重结晶过程。反溶剂的滴加速率对产物晶相转变有重要影响。较高的反溶剂滴加速率会导致 $\beta$ -CL-20首先生成,随后 $\beta$ -CL-20转变为更稳定的 $\epsilon$ -CL-20;而较低的反溶剂滴加速率则导致 $\epsilon$ -CL-20首先生成。晶体生长速率与反溶剂的滴加速率有关。

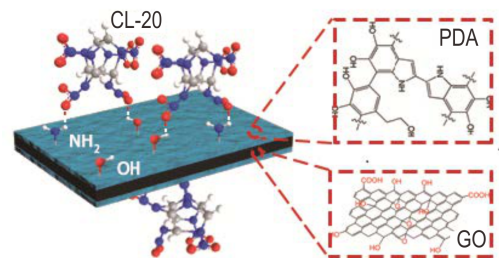
源自: Yang H, Kim J, Kim K. Study on the Crystallization Rates of  $\beta$ - and  $\epsilon$ -form HNIW in in-situ Raman Spectroscopy and FBRM[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2020, 45(3): 422–430.



### 西北工业大学采用包覆的方法降低了CL-20的感度同时提高了晶型稳定性

CL-20的感度高和多晶型互变现象是限制CL-20基炸药广泛应用的瓶颈问题。在溶剂/反溶剂重结晶过程中,使用多巴胺掺杂的氧化石墨烯来包覆 $\epsilon$ -CL-20。选择合适的聚多巴胺和氧化石墨烯的使用量,通过分子间相互作用,使得包覆后 $\epsilon$ -CL-20的感度降低、热稳定性提高,同时晶体密度没有明显降低。

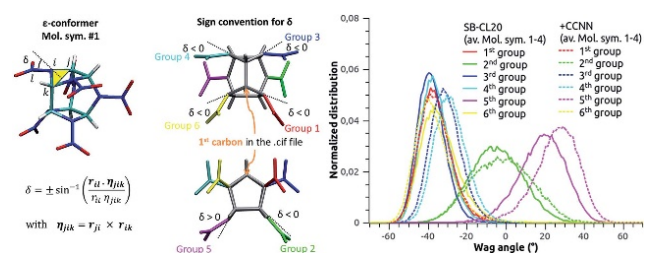
源自: Huang B, Xue Z, Chen S, et al. Stabilization of  $\epsilon$ -CL-20 Crystals by a Minor Interfacial Doping of Polydopamine-Coated Graphene Oxide[J]. *Applied Surface Science*, 2020, 510(1): 145454.



### 美国伊利诺大学模拟计算了极限条件下CL-20的多晶型互变现象

采用分子动力学计算方法研究常温和90 GPa压力下CL-20的晶型转变规律。结果表明,在一定压力范围内增加压力会导致 $\epsilon$ -CL-20的硬度增加。压力诱导 $\epsilon$ -CL-20结构变化与分子中硝基转动的难易程度有关。研究结果为共晶炸药的结构设计提供参考。

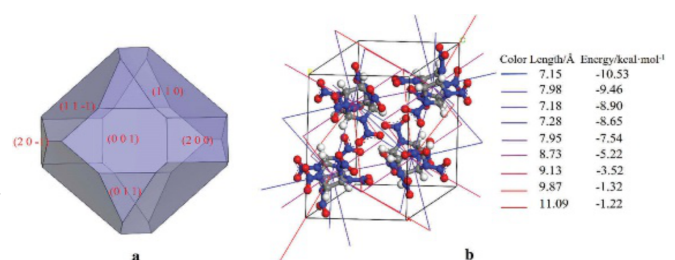
源自: Bidault X, Chaudhuri S. A flexible-molecule force field to model and study hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20)-polymorphism under extreme conditions[J]. *RSC Advances*, 2019, 9(68): 39649–39661.



### 北京理工大学研究了CL-20晶体生长过程中的形貌演化机理

采用分子动力学模拟计算的方法,通过构建合适的模型研究了真空以及乙酸乙酯溶液中CL-20晶体形貌演化过程。结果表明外界环境对CL-20晶体形貌的形成具有重要影响,这一结论为设计得到具有特定形貌的CL-20晶体具有指导意义。

源自: Lan G, Jin S, Li J. Molecular Dynamics Investigation on the Morphology of HNIW Affected by the Growth Condition[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2019, 37(1): 44–56.



(中国工程物理研究院化工材料研究所 刘慧慧 编译)