

美国通过熔融二硝基吡唑和 1,2,3,4-四嗪获得一种性能优异的炸药

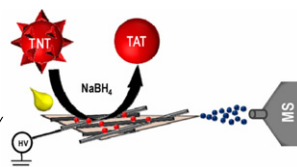
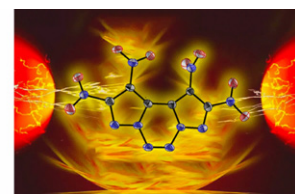
成功设计高性能、不敏感且可实际应用的高能化合物的关键在于调整分子结构,包括燃料和氧化剂。近来,美国科学家通过对化合物 4,4',5,5'-四硝基-2H,2'H-3,3'-联吡唑(4)进行 N 氨基化和 N 偶氮化获得了一种更高级的 5/6/5 稠环含能材料材料 1,2,9,10-四硝基吡唑并[1,5-d:5',1'-f][1,2,3,4]四嗪(6)。通过单晶 X 射线衍射测量,确定了化合物 5 和 6 的结构。化合物 6 室温下的实验密度为 $1.955 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,具有良好的爆轰性能。此外,它具有很高的分解温度,为 $233 \text{ }^\circ\text{C}$ 。这些迷人的特性,与 CL-20 的特性相当,使它在高性能应用中非常具有吸引力。

源自:Yongxing Tang, Dheeraj Kumar, Jeanne M. Shreeve, *Balancing Excellent Performance and High Thermal Stability in a Dinitropyrazole Fused 1,2,3,4-Tetrazine*. *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, 139 (39): 13684–13687.

印度用金属纳米管催化纸喷雾电离质谱分析检测 TNT

材料可以对质谱分析提供帮助,一个例子是可以通过使用先进的材料将一个不易电离的分子转化为容易电离的分子来增强电离。近来,印度作者展示了 Pt 纳米孔修饰的纳米管作为高度活性催化剂,将 2,4,6-三硝基甲苯还原为 2,4,6-三氨基甲苯,并可简单地通过原位环境电离质谱法对产物进行检测。

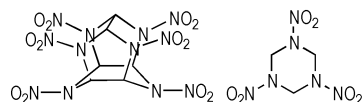
源自:Dejanjan Sarkar, Anirban Som, and Thalappil Pradeep. *Catalytic Paper Spray Ionization Mass Spectrometry with Metal Nanotubes and the Detection of 2,4,6-Trinitrotoluene*. *Anal. Chem.*, 2017, 89 (21): 11378–11382.



南京理工大学合成并表征了一种新的高能钝感炸药共晶

高能炸药经常面临高能量与低感度之间的矛盾,急需找到一种新型不敏感的高能炸药。近来,南京理工大学用一种简单的方法制备了一种由能量最高的炸药六硝基六氮杂异戊兹烷(CL-20)与军用炸药 1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂环己烷(RDX)形成的炸药共晶。扫描电子显微镜(SEM)揭示了其形状为棒状,与形成共晶的两种单质炸药本来形貌差别很大。利用傅里叶变换红外光谱(FTIR)、拉曼光谱、x 射线衍射谱(XRD)、差示扫描量热法(DSC)在分子水平上证明了共晶的形成。机械敏感性试验结果表明,该方法能有效地降低 CL-20 的感度。最后,讨论了一种可能的结晶机理。

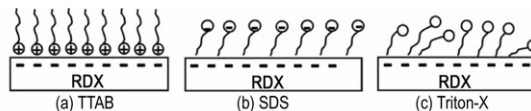
源自:Han Gao, Wei Jiang, Jie Liu, et al. *Synthesis and Characterization of a New Co-Crystal Explosive with High Energy and Good Sensitivity*, *JOURNAL OF ENERGETIC MATERIALS*. 2017, 35: 4.



美国陆军研究用阴离子、阳离子和非离子表面活性剂修饰硝胺炸药的润湿性

含能材料的润湿性对其在高效湿磨、涂层和造粒过程所需要的高能表面的形成起着非常重要的作用。近来,美国陆军通过测量非离子(Triton-X)、阴离子(SDS)和阳离子表面活性剂(TTAB)与 1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂环己烷(RDX)、1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷(HMX)和六硝基六氮杂异戊兹烷(CL-20)的接触张力研究了含能材料的表面润湿行为。结果表明,与 SDS 和 triton-x 相比,TTAB 显著降低了接触角,提高了润湿性。以 TTAB 表面活性剂浓度在水溶液中的作用测定液体-蒸汽表面张力,并建立了一个 Zisman 图,以确定 RDX、HMX 和 CL-20 的临界表面张力。结果表明,HMX 具有最高的润湿性,而 RDX 最不易湿润;接触角随着表面活性剂浓度的增加而减小;并发现 RDX 最受 TTAB 表面活性剂的影响,然而,TTAB 的加入对提高 HMX 和 CL-20 的润湿性也有显著的影响。

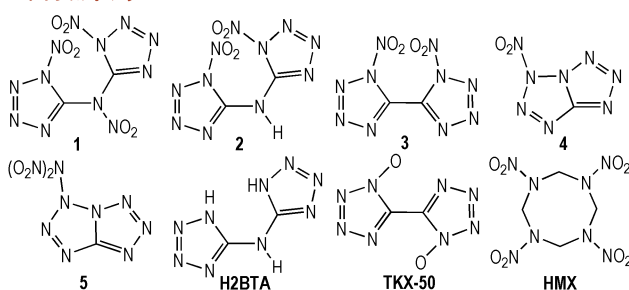
源自:Mouhcine Doukkali, Eric Gauthier, Rajen B. Patel, et al. *Modifying the Wettability of Nitramine Explosives using Anionic, Cationic and Nonionic Surfactants*, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2017, 42(10): 1185–1190.



伊朗合成了一系列可作固体推进剂中的高性能氧化剂的新型富氮炸药

高氮类含能化合物由于有更好的安全性能而受到广泛的关注。本研究基于密度泛函理论(DFT)的计算和最佳可用的可靠性预测方法研究了四种高氮含量的四唑含能衍生物的性能、热力学、物理性质和感度。这些化合物的爆轰压力和速度分别大于 470 GPa 和 $10.2 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ 。此外,还利用合适的方法研究了这些新化合物冷凝相的生成热、吉布斯自由能、升华热、燃烧热、熔点、熔融焓、熔融熵、比冲量、Gurney 速度、强度、爆燃温度、撞击感度和冲击感度。将这些新化合物的预测结果与 N,N-二(1-氢-5-四唑基)胺(HTBA)、1,1'-二羟基-5,5'-联四唑-1-草酰二肼盐(TKX-50)和 1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷(HMX)的计算与实验结果进行对比,表明所研究的新化合物可作为一种高性能含能材料。

源自:Mohammad Hossein Keshavarz, Yasin Hayat Abadi, Karim Esmailpour, et al. *A Novel Class of Nitrogen-rich Explosives Containing High Oxygen Balance to Use as High Performance Oxidizers in Solid Propellants*, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2017, 42(10): 1155–1160.



(中国工程物理研究院化工材料研究所 材料微结构与表界面团队 编译)