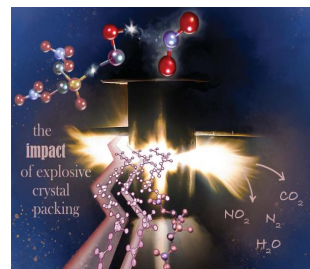


含能快递

美国 LANL 研究了影响含能硝酸酯感度的化学和结构特性

影响炸药感度的因素,包括化学反应性和分子间作用,介观结构和缺陷。美国洛斯阿拉莫斯国家实验室(LANL)研究人员采用实验和计算结合的方法研究了影响含能硝酸酯感度的化学和结构特性:通过将季戊四醇四硝酸酯(PETN)中一个 $-\text{CCH}_2\text{ONO}_2$ 部分用 $-\text{CH}$, $-\text{CNH}_2$, $-\text{CNH}_3\text{X}$, $-\text{CCH}_3$ 或 $-\text{PO}$ 等其他取代基进行取代,合成了一系列具有不同感度特性的PETN衍生物,并将每一种PETN衍生物感度与结构进行了关联,讨论了热容、生成热、热稳定性、晶体结构、压缩性和分子内/分子间氢键等热力学参数对撞击感度的潜在影响;对C/H/N/O基PETN衍生物进行了烤燃条件下的反应分子动力学模拟,推断了化学变化对后续分解路径的影响。

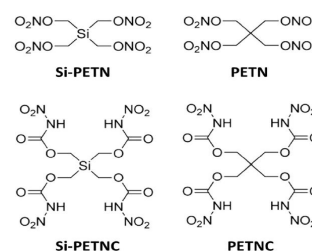
源自: Virginia W. Manner, Marc J. Cawkwell, Edward M. Kober, et al. Examining the chemical and structural properties that influence the sensitivity of energetic nitrate esters[J]. Chem. Sci., 2018, 9: 3649–3663.



北京应用物理与计算数学研究所计算了含硅硝酸酯化合物的受热反应机理和感度

北京应用物理与计算数学研究所与美国加州理工大学、北京理工大学合作采用量子反应动力学(QM-MD)研究了季戊四醇四硝酸酯(PETN)、季戊四醇四硝基氨基甲酸酯(PETNC)及其硅衍生物(Si-PETN、Si-PETNC)的受热反应机理和感度,发现受热反应机理及能量差异是导致感度不同的原因:Si衍生物的较高感度来自于高放热Si—O键分解,作为主要初始反应促进了其它的反应,导致多种中间物和最终产物的生成,因此加速分解过程和能量释放;由于硝基氨基甲酸酯具有大的复杂分支,阻碍了放热的Si/C—O键形成,激发了多种具有较高能垒的初始吸热反应,延迟了次级吸热反应和能量释放,因此具有较低感度;建立了从吸热到放热发生能量变化的温度、以及总吸收能与感度的关联。

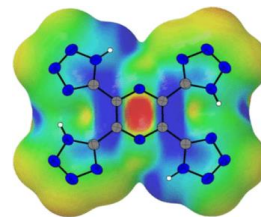
源自: Tingting Zhou, Tao Cheng, Sergey V. Zybin, et al. Reaction mechanisms and sensitivity of silicon nitrocarbamate and related systems from quantum mechanics reaction dynamics[J]. J. Mater. Chem. A, 2018, 6: 5082–5097.



加拿大渥太华大学研究了一类热稳定的高氮含能化合物

加拿大渥太华大学研究人员成功合成了一类富氮(71.58% N)含能的吡嗪化合物H4TTP,采用质谱、核磁共振波谱、红外和拉曼光谱、单晶X射线衍射对其分子和晶体结构进行了表征,发现了该化合物具有高氮含量和分子相对平面性;计算其爆速达到 $8655 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,爆压达到28.0 GPa,测试其热分解温度达到 $260 \text{ }^\circ\text{C}$;该化合物水解稳定性、热稳定性、密度和爆轰性能良好,有望应用于先进含能材料。

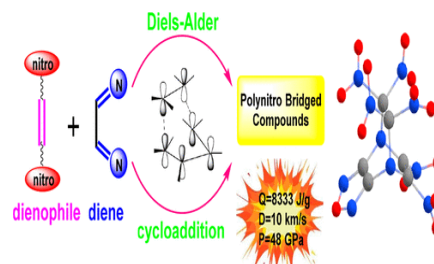
源自: Tomasz G. Witkowski, Elena Sebastiao, Bulat Gabidullin, et al. 2,3,5,6-Tetra(1H-tetrazol-5-yl)pyrazine: A thermally stable nitrogen-rich energetic material[J]. ACS Appl. Energy Mater., 2018, 1 (2): 589–593.



北京理工大学设计了新型桥环含能化合物及其合成反应

北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室与以色列特拉维夫大学合作采用密度泛函理论方法计算了一系列新奇结构含能化合物,这些桥环结构化合物分子可通过富氮二烯和四硝基乙烯的Diels-Alder反应合成;采用分子轨道理论预测了反应的可行性,二烯的HOMO轨道、电子转移基团以及四硝基乙烯的LUMO轨道之间的强相互作用表明反应在热力学上是有利的;计算了物化和能量性质,发现由于紧密的桥环结构,这种新含能分子具有高的正生成热(达到 $1124.90 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)和高密度(达到 $2.04 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$);由于氮氧比合适,这类新化合物具有高爆速($8.28 \sim 10.02 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$)和高爆压(30.87~47.83 GPa),其爆轰性能优于HMX,并与CL-20和ONC相当。

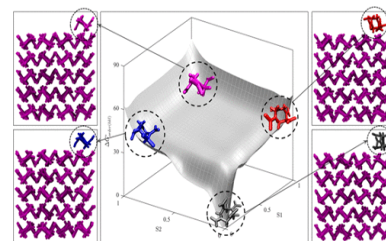
源自: Piao He, Haozheng Mei, Le Wu, et al. Design of new bridge-ring energetic compounds obtained by Diels-Alder reactions of tetra-nitroethylene dienophile[J]. J. Phys. Chem. A, 2018, 122 (12): 3320–3327.



韩国首尔大学发展了预测含能晶体形貌的广义界面结构分析模型

韩国首尔国立大学研究人员采用一种广义界面结构分析模型预测了 β -HMX的晶形:通过定义晶体的分子序参数来识别 β -HMX界面处吸附分子的取向和构型,而基于序参数的meta-dynamics方法将所有吸附分子作为等效生长单位,采用这些生长单元的各向异性聚集结合螺旋生长模型预测了晶体形貌,结果与实验形貌一致,证明了界面处生长单元的各向异性局域聚集对慢生长晶面的不同相对生长率具有显著影响。

源自: Bumjoon Seo, Seulwoo Kim, Minhwan Lee, et al. Prediction of the crystal morphology of β -HMX using a generalized interfacial structure analysis model[J]. Cryst. Growth Des., 2018, 18 (4): 2349–2357.



(中国工程物理研究院化工材料研究所 计算含能材料学团队 钱文 编译)