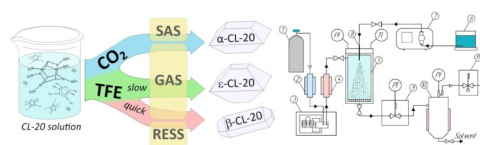


泽林斯基有机化学研究所应用超临界和液化CO₂气体方法制备超细CL-20颗粒

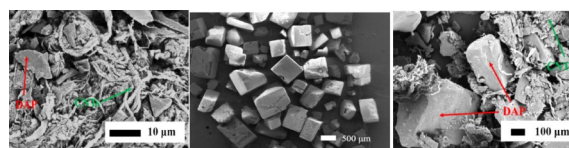
泽林斯基有机化学研究所在液体和超临界CO₂及 TFE 介质中进行CL-20重结晶,选择性制备出了CL-20超细颗粒,这种新的制备方法可以有效地抑制多晶形微晶体的生成。将CO₂作为反溶剂应用于SAS和气体(GAS)制备方法,无论在何种工艺条件下都可以生成 α -CL-20-CO₂溶剂化物。在温和的工艺条件下,将TFE作为活性介质应用于气体(GAS)和RESS制备工艺中,可以高选择性地制备出均匀的超细 β -或 ϵ -CL-20颗粒。采用新方法合成的 ϵ -CL-20具有比初始产品(没有经过重结晶处理过的粗CL-20)更高的稳定性,环境和工业安全性显著提高,显示了该合成工艺在制备单一产物、控制产物颗粒形态和晶相方面的独特优势。



源自: Mikhail N. Zharkov, Ilya V. Kuchurov, Sergei G. Zlotin. Micronization of CL-20 using supercritical and liquefied gases[J]. CrystEngComm, 2020, DOI: 10.1039/D0CE01167C.

中北大学合成了钙钛矿(H₂dabco)[NH₄(ClO₄)₃]/碳纳米管含能复合材料

中北大学以三乙二胺、高氯酸(PCA·HClO₄)和AP为原料,通过分子组装反应合成了钙钛矿型DAP样品,并制备了高氯酸铵(AP, NH₄(ClO₄)₃)基分子钙钛矿型含能材料(H₂dabco)[NH₄(ClO₄)₃]/碳纳米管(DAP/CNT)复合材料。分析测试发现,由于CNTs的混合脱敏机理,DAP/CNTs含能复合材料(10wt.% CNTs)的机械感度(冲击感度>120cm,摩擦感度>20%)

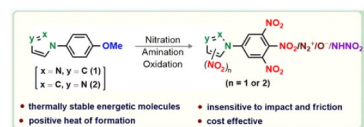


和静电火花感度(8.90 J)低于DAP(冲击、摩擦和静电火花感度分别为112.3 cm、45%和5.39 J)。与纯DAP相比,DAP/CNTs含能复合材料具有更好的热稳定性、放热性能、良好的连续燃烧性能和更高的安全性能,具有在武器系统中潜在应用前景。

源自: Li-shuang Hu, Yang Liu, Dan He, et al. Study of Molecular Perovskite (H₂dabco)[NH₄(ClO₄)₃]/Carbon Nanotubes Energetic Composite[J]. Cent. Eur. J. Energ. Mater., 2022, 19(1): 91-105; DOI: 10.22211/cejem/147766.

海德拉巴大学合成了具有热稳定-钝感的聚硝基-N-芳基-C-硝基-吡唑咪唑衍生物含能材料

海德拉巴大学合成了一系列甲氧基取代的聚硝基芳基吡唑/咪唑,这些吡唑/咪唑具有易氧化的一NH/NO/NHNO/重氮官能团。单晶X射线衍射(XRD)分析证实了这些化合物的分子结构。通过理论和实验研究确定了合成化合物的能量性质。合成的这些物质大多具有较高的热稳定性,对冲击和摩擦反应不敏感,一些分子的爆速和爆压超过了TNT炸药。



源自: Srinivas Vangara, Nagarjuna Kommu, Vikranth Thaltiri, et al. Polynitro-N-aryl-C-nitro-pyrazole/imidazole Derivatives: Thermally Stable-Insensitive Energetic Materials[J]. Journal of organic chemistry, 2022, 87(11): 7202-7212.

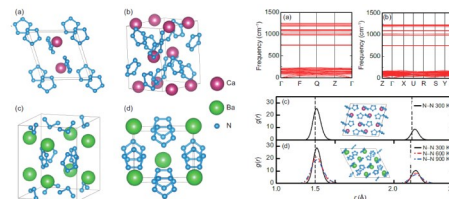
塞门诺夫联邦化学物理研究中心编制了大量含能材料的爆轰参数数据集

塞门诺夫联邦化学物理研究中心编制了260种CHNOFCI含能化合物的几个爆轰参数的数据集,包括实验密度、最大密度、固态生成焓、爆速、Chapman-Jouguet压力、爆轰量热和金属加速能力。首先对该数据集进行分析,以捕捉含能材料发展的趋势,例如向高氮和高焓化合物的转变。然后,以现有的经验和热力学方法作为预测爆轰特性的基准。对于爆速,具体比较了15种文献方法,并提出了一个新的公式,该公式比其他经验方法具有更好的精度,比基准热力学程序EXPLO5更好。此外,还提出了一个新的金属加速能力方程式,提供了一些推荐的经验方法,借助推荐的方法,分析了化学组成变化较大的普通和新型含能材料的爆轰参数,将为新型含能材料的设计提供了一些启示。

源自: Nikita V. Muravyev, Dominique R. Wozniak, Davin G. Piercey. Progress and performance of energetic materials: open dataset, tool, and implications for synthesis[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2022, 10(20): 11054-11073.

南京大学计算了高能量密度材料五唑盐CaN₁₀和BaN₁₀性能

聚合物氮化合物中的高能量密度材料(HEDM)的研究受到了广泛的关注。先前的理论预测和实验表明,金属离子可用于稳定五氮唑(N₅⁻)阴离子。本文利用机器学习加速的晶体结构搜索方法和第一原理计算,发现新的五氮唑盐CaN₁₀和BaN₁₀在高压下具有能量上的优势。声子色散计算表明,它们在环境压力下是可猝灭的。从头算分子动力学模拟证实了它们在有限温度下的动态稳定性。Bader电荷和电子局域化函数说明碱土金属原子作为电子给体,有助于N₅环的稳定性。成键计算揭示了氮原子之间的共价键和N₅环之间的弱相互作用。与其它五氮唑盐相似,这些聚合物氮化物的高能量密度约为2.35 kJ·g⁻¹(CaN₁₀)和1.32 kJ·g⁻¹(BaN₁₀)。对CaN₁₀和BaN₁₀结构的预测表明,这些盐是绿色富氮HEDM的潜在候选物。



源自: JiaNan Yuan, Kang Xia, Jue-fei Wu, et al. High-energy-density pentazolite salts: CaN₁₀ and BaN₁₀[J]. Sci. China-Phys. Mech. Astron., 2021, 64(1).

(湖北航天化学技术研究所 庞爱民 黎小平 编译)