

文章编号: 1003-1480 (2022) 03-0032-06

# 添加剂对工业酒精体系中NTO晶体形貌的模拟研究

葛 铭, 李丽洁, 宁丽媛, 陈 锐, 黄 伦, 金韶华

(北京理工大学材料学院, 北京, 100081)

**摘 要:** 为改善工业酒精体系中 NTO 晶体形貌, 通过分子动力学方法构建了溶剂分子-晶面双层模型, 对真空中和工业酒精体系中 NTO 晶体形貌和晶面性质进行了模拟和分析, 在此基础上研究了聚乙烯醇、丙酮、十二烷基苯磺酸钠、十六烷基三甲基溴化铵、N-酰基氨基酸、单硬脂酸甘油酯 6 种添加剂对工业酒精体系中 NTO 晶体形貌的影响。结果表明: 工业酒精体系中 NTO 晶体形貌较差; 6 种添加剂均会改善 NTO 晶体形貌, 其中单硬脂酸甘油酯的改善效果最好。研究结果可为重结晶体系添加剂的筛选提供理论指导。

**关键词:** NTO; 分子模拟; 晶体形貌; 添加剂

中图分类号: TQ560.1 文献标识码: A DOI: 10.3969/j.issn.1003-1480.2022.03.008

## Simulation Study on the Morphology of NTO Crystal in Industrial Alcohol with Additives

GE Ming, LI Li-jie, NING Li-yuan, CHEN Kun, HUANG Lun, JIN Shao-hua

(Beijing Institute of Technology, Beijing, 100081)

**Abstract:** In order to improve the NTO crystal morphology in industrial alcohol system, a solvent molecule-crystal plane bilayer model was constructed by molecular dynamics method. The crystal morphology and crystal plane properties of NTO in vacuum and industrial alcohol system were simulated and analyzed. On this basis, the effects of 6 additives including polyvinyl alcohol, acetone, sodium dodecyl benzene sulfonate, cetyltrimethyl ammonium bromide, N-acylamino acids, glycerol monostearate on the NTO crystal morphology in industrial alcohol system were studied. The results show that the NTO crystal morphology in industrial alcohol system is poor; 6 additives can improve the NTO crystal morphology, and glycerol monostearate has the best effect. The results can provide theoretical guidance for the screening of additives in recrystallization system.

**Key words:** NTO; Molecular simulation; Crystal morphology; Additive

3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮 (NTO) 的爆轰能量接近黑索今 (RDX), 撞击感度近似于三氨基三硝基苯 (TATB), 安全性能优越<sup>[1]</sup>, 且合成工艺简单、应用前景广阔<sup>[2]</sup>。反应直接制得的 NTO 结晶多为锯齿形等类杆状晶形, 影响 NTO 的加工和安全性能<sup>[3]</sup>。工业上常利用工业酒精对 NTO 进行重结晶来降低晶体长径比, 但重结晶后的 NTO 晶体形貌并不能得到较好的改善<sup>[4]</sup>。在结晶体系中加入添加剂是一种常用的改善晶体形貌的手段。Xiong Shuling 等<sup>[5]</sup>研究发现添加剂

乙醇、乙二醇和乙酸均有利于改善 TKX-50 的晶体形貌, 促使晶体向球形化生长。周畅<sup>[6]</sup>研究发现表面活性剂十二烷基磺酸钠及十六烷基三甲基溴化铵能够改善以水为溶剂重结晶得到的 TKX-50 的晶体形貌。田颖<sup>[7]</sup>研究发现通过添加剂可以有效调控太安 (PETN) 的晶体形貌。刘立媛<sup>[8]</sup>研究了 FOX-7 的结晶过程, 发现在 DMF/H<sub>2</sub>O 体系中, 以聚乙二醇 400 为添加剂且其用量为 0.5% 时, 能够得到形貌接近球状的晶体。Sajjad Damiri 等<sup>[9]</sup>研究溶剂/反溶剂体系中

收稿日期: 2021-12-30

作者简介: 葛铭 (1996-), 女, 硕士, 从事分子模拟和含能材料研究。

通讯作者: 李丽洁 (1978-), 女, 高级实验师, 从事材料分子模拟研究、组分定量分析方法研究、仪器分析研究、小分子有机合成研究。

HMX 晶体形貌的调控,发现低温条件下,在以丙酮为溶剂,水为反溶剂的体系中,添加 0.5wt%水溶性聚乙二醇 PEG-400,可以得到近球形的晶体。而 NTO 也是一种单质炸药晶体,具有与 HMX、TKX-50、FOX-7、PETN 相似的结构和物理化学性质,因此通过添加剂调控其晶体形貌是可行的。

为改善工业酒精体系中 NTO 晶体形貌,本文通过分子动力学方法建立了溶剂-晶面双层模型,对真空中 NTO 晶体形貌和晶面性质进行了模拟和分析,并对工业酒精体系中 NTO 晶体形貌及 6 种添加剂对 NTO 晶体形貌的影响进行了模拟和实验研究。

## 1 理论和计算细节

### 1.1 附着能模型

附着能为单层晶片附着到晶体上正在生长的某个特定晶面上释放的能量,可通过非成键原子间作用力和分子间作用力计算求得。晶体生长的附着能模型,即 AE 模型,认为各晶面的相对生长速率 ( $R_{ij}$ ) 与附着能  $E_{att}$  成正比<sup>[10]</sup>。即:

$$R_{ij} = \frac{R_i}{R_j} = \frac{E_{att,i}}{E_{att,j}} \quad (1)$$

最低附着能的晶面生长得最慢,具有形态学上最大重要性;附着能越大,晶面生长速率越快,在生长过程中最容易消失。该方法基于晶体结构特性(对称性、分子间键链特性等)和晶面能量性质,计算晶体分子不同晶面的附着能,确定不同晶面的生长速度,可预测真空环境下 TKX-50 等含能晶体的形貌<sup>[11]</sup>。

### 1.2 修正附着能理论

溶剂分子或添加剂分子与晶面存在相互作用,会影响晶体生长单位在各晶面上的附着,从而对晶体形貌产生显著影响。这种相互作用包括范德华作用、静电力作用及氢键作用,因此晶体生长单位在晶面上附着要克服溶剂层的阻力<sup>[12]</sup>,需按溶剂可接触面积占比去除其对附着能的影响,修正公式见式(2):

$$E_{att}^s = E_{att} - E_{int} \frac{A_{acc}}{A_{hkl}} \quad (2)$$

式(2)中: $E_{att}^s$ 为有溶剂作用时修正的晶面附着

能,kJ/mol; $E_{att}$ 为无溶剂作用时晶面的附着能,kJ/mol; $A_{acc}$ 为溶剂可触及的单元晶胞的表面面积, $\text{\AA}^2$ ; $A_{hkl}$ 为晶面表面面积, $\text{\AA}^2$ ; $E_{int}$ 为溶剂与晶面间的结合能,kJ/mol,其数值为溶剂层和晶面的总能量  $E_{tot}$  减去晶面的能量  $E_{sur}$  和溶剂层的能量  $E_{sol}$  之和:

$$E_{int} = E_{tot} - E_{sur} - E_{sol} \quad (3)$$

修正后的附着能与晶面生长速率成正比,可预测含溶剂或添加剂体系中 FOX-7 等含能晶体的形貌<sup>[13]</sup>。

### 1.3 模拟细节

晶胞构建:从 CCDC 剑桥晶体结构数据库可得, $\beta$ -NTO 属于单斜晶系,CS 点群,晶胞参数为: $a=9.33$ , $b=5.45$ , $c=9.04$ , $\beta=101.50^\circ$ 。建立初始模型后,采用 Discover 模块中的 Smart Minimizer 方法进行几何优化,其中力场选择 Compass 力场,收敛水平选择 Fine,优化方法选择 Steepest Descent。

真空形貌模拟:利用 Morphology 模块的 Growth Morphology 方法进行真空形貌模拟。设置力场为 Compass 力场,其针对含硝基的炸药做过高精度的量子力学参数化;并设置温度为 298K,收敛水平为 Fine;范德华力计算采用原子截断半径求和法(Atom based 方法),静电相互作用采用 Ewald 求和方法计算。

双层模型构建:先构建晶面层,即超晶胞。为使 NTO 晶面在真空中暴露出来,用 Cleave Surface 模块切割真空环境下 NTO 晶体模拟得到的特征晶面,不同晶面切割的分子数不同,从而保证其厚度均为略大于动力学截断半径  $d_c$  ( $d_c=15.5 \text{\AA}$ ),再利用 Build 模块下 Supercell 方法构建超晶胞,超晶胞的长宽大于截断半径的 2 倍与溶剂分子直径之和。

溶剂层构建:用 Amorphous Cell 模块建立溶剂非晶盒子,设置温度为 298 K;密度为溶剂在 298 K 下的真实密度;并设置溶剂盒子的长和宽(参数  $a$  和  $b$ )与各个特征晶面的超晶胞的参数一致,厚度由填入溶剂盒子的分子数决定。当溶剂盒子的厚度大于动力学截断半径时,溶剂层厚度不会影响整个体系能量特性,因此为减少计算量,选择合适的分子数,使溶剂盒子厚度略大于动力学截断半径,并使乙醇分子和水的质量比为 99:1。按质量比为 1% 计算加入溶剂盒

子的添加剂数目。

得到溶剂盒子后，建立溶剂-晶面双层模型。设置晶面层与溶剂层间真空层厚度为 3Å，以消去 2 个界面间相互影响。为避免周期性边界条件的影响，需在溶剂层上方设置真空层，NTO 体系中，当真空层厚度大于截断半径时，体系能量变化不大<sup>[4]</sup>。本实验中设置真空层厚度为 30Å。具体过程如图 1 所示。

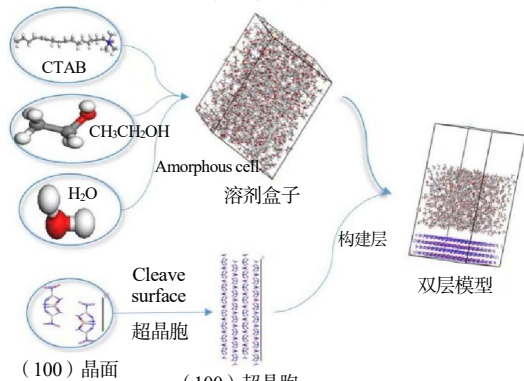


图 1 双层模型

Fig.1 Double-layer model

动力学模拟参数：用 Forcite 模块对双层模型进行动力学模拟。温度设置为 298K，力场为 Compass 力场，系综采用正则系综 (NVT 系综)；控温方法选择 Andersen 方法，范德华力计算采用 Atom based 方法，静电相互作用计算采用 Ewald 求和方法。整个模拟过程共设置 200 000 步，用时 200ps，每步用时 1fs，模拟结束后，体系能量和温度都达到平衡（波动小于 10%）。对最终平衡构象进行分析，得到溶剂或添加剂条件下溶剂层与各晶面的结合能。通过公式 (2)~(3) 可计算得到修正附着能。

## 2 真空中 NTO 晶体形貌和晶面性质

### 2.1 力场适用性

$\beta$ -NTO 晶胞优化前后的晶胞参数见表 1。

表 1 优化前后晶体参数

	$a/\text{Å}$	$b/\text{Å}$	$c/\text{Å}$	$\beta/^\circ$
实验值	9.33	5.45	9.04	101.50
计算值	9.25	5.60	9.20	104.70
相对误差/%	-0.86	2.75	1.77	3.15
绝对误差	-0.08	0.15	0.16	3.20

由表 1 可知，优化前后最大相对误差不超过 3.2%，说明 Compass 力场适用于 NTO 晶胞的分子模拟。

### 2.2 真空形貌模拟

温度为 298K 时，NTO 真空形貌预测结果如图 2 所示。由图 2 可知，NTO 晶体在真空中呈梭状，长径比为 3.212。NTO 形态学重要晶面相关性质见表 2。

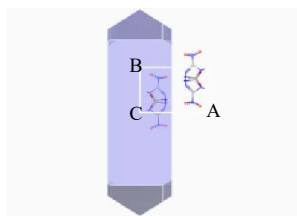


图 2 NTO 真空形貌图

Fig.2 Crystal morphology of NTO in vacuum

表 2 NTO 形态学重要晶面相关性质

Tab.2 The parameters of the main crystal faces for NTO

晶面	晶面数量	表面积	$E_{att}(tot)$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )	晶面间距	面积占比 /%
(100)	2	51.50	-21.77	21.77	49.42
(110)	4	97.08	-59.23	59.23	8.59
(011)	4	97.22	-60.71	60.71	12.79
(002)	2	51.76	-36.23	36.23	26.71
(11-1)	4	103.68	-66.82	66.82	0.40
(111)	4	116.01	-57.67	57.67	2.09

由表 2 可知，NTO 晶体有 6 类、共 20 个晶面显露。6 类晶面的 NTO 面积占比由大到小依次为 (100)、(002)、(011)、(110)、(111)、(11-1)。(100) 面是附着能  $E_{att}(tot)$  最小、生长速率最慢的晶面，也是面积占比最大、形态学中最重要的一面，可作为生长速率较慢的晶面代表；(11-1) 面与之相反，可作为生长速率较快的晶面代表。有效的添加剂能达到抑制快面生长或加速慢面生长的作用，从而改善晶体形貌。

### 2.3 NTO 各晶面性质

通过对 NTO 表面性质的研究，尤其是表面光滑程度、晶面的原子排布和表面电荷分布，可以判断添加剂对晶面附着能的影响，为筛选合适的添加剂提供理论基础。NTO 晶体习性表面参数见表 3。

表 3 NTO 晶体习性表面参数

Tab.3 The parameters for the crystal habit surfaces for NTO

晶面	$E_{att}(tot)$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )	$A_{hkl}/\text{Å}^2$	$A_{acc}/\text{Å}^2$	$A_{acc}/A_{hkl}$
(002)	-36.23	51.76	81.94	1.58
(110)	-59.23	97.08	168.45	1.74
(111)	-57.67	116.01	174.68	1.51
(100)	-21.77	51.50	62.25	1.21
(011)	-60.72	97.22	168.27	1.73
(11-1)	-66.82	103.68	189.14	1.82

由表 3 可知，不同晶面的可接触面积 ( $A_{acc}$ ) 差异较大。晶面生长结构可附着的相对面积可用晶面的可接触面积与晶面面积的比值 ( $A_{acc}/A_{hkl}$ ) 定义。 $A_{acc}/A_{hkl}$  值可表征晶体表面光滑程度，预测添加剂与晶面结合

难易程度及添加剂对不同晶面附着能的影响,从而指导添加剂的选择。其中,(100)面的 $A_{acc}/A_{hkl}$ 最小,说明(100)面晶体表面光滑、裸露原子少或晶面沟壑少,不利于溶剂分子和添加剂的吸附,使得晶面/溶剂分子间的相互作用较弱,附着能较小。而(11-1)面的 $A_{acc}/A_{hkl}$ 最大,说明(11-1)面晶体表面较粗糙、裸露原子多或晶面沟壑多,可以提供给溶剂分子和添加剂的附着位点多,使得晶面/溶剂分子间的相互作用增强。晶面光滑程度由大到小依次为(100)、(111)、(002)、(011)、(110)、(11-1)。

NTO不同晶面原子排布如图3所示,用gasteriger方法计算特征晶面单位面积上的表面电荷分布,如表4所示。由图3可知,(100)和(002)晶面表面无裸露原子,(011)面和(111)裸露原子为氧、氢原子,且氧原子个数较多,显负电;(11-1)面裸露原子多为氧原子,显负电,(110)裸露原子多为氮原子,显正电。由表4可知,NTO各晶面单位面积的表面电荷 $Q_{sp}$ 由大到小的顺序为(11-1)、(111)、(011)、(110),即(11-1)面的负电性最强,易与溶剂分子或添加剂分子上某些特征基团有相互作用。

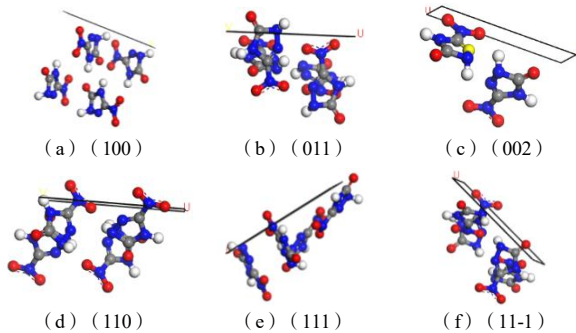


图3 NTO不同晶面原子分布

Fig.3 Atom distribution of different crystal faces of NTO

表4 晶面电荷分布

Tab.4 Charge distribution of NTO

晶面	$Q_{sp}/e$	$A/\text{Å}^2$	$Q_{sp}/(e \cdot \text{Å}^2)$
(011)	-0.0087	4192.96	$-2.07 \times 10^{-6}$
(110)	0.779	2816.52	$2.77 \times 10^{-4}$
(111)	-0.075	684.12	$-1.10 \times 10^{-4}$
(11-1)	-0.5	130.62	$-3.83 \times 10^{-3}$

注: $Q_{sp}$ 表示1个晶胞单元面积的表面电荷, $Q_{sp}$ 表示单位面积的表面电荷。

NTO晶面多带电荷,结合晶面光滑程度、原子排布和表面电荷分布,可为添加剂的选择提供理论指导。如带电荷的添加剂分子,其与带电的晶面结合能力较强,可能会显著改变(11-1)晶面的附着能;但

(100)面晶面较为光滑,不利于添加剂分子附着在生长位点上,且表面无原子裸露,极性不强,与添加剂分子的结合能力弱,带电荷的添加剂分子对其附着能影响不大。此外,NTO晶面裸露原子多为N、O原子,如选用含有多羟基的添加剂,可形成氢键,加大添加剂分子和晶体生长位点的结合概率,也可能改善晶体形貌。

### 3 工业酒精体系中 NTO 晶貌的预测

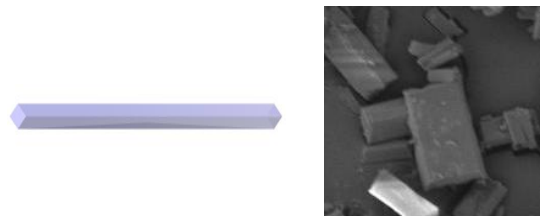
工业酒精体系中,NTO不同晶面与溶剂间的修正附着能结果见表5。

表5 工业酒精体系中 NTO 不同晶面的附着能

Tab.5 Corrected attachment energies of NTO crystal faces

晶面	(002)	(110)	(111)	(100)	(011)	(11-1)
$E'_{att}/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	-5.43	9.81	-0.15	-9.84	8.84	12.31

附着能大小代表相互作用强弱,附着能越大,则表示溶剂分子与晶体分子相互作用越强,形成的体系越稳定。由表5可知,工业酒精会抑制NTO各个晶面的生长,但对不同晶面生长速率的抑制作用是不同的。工业酒精对(002)、(111)面抑制作用较大,使得其附着能显著下降,生长速度减慢,成为NTO最主要的晶面。但对(100)面抑制作用较弱。这是由于(100)面表面较为光滑,无电荷分布,溶剂分子不易附着,因此工业酒精对(100)面抑制作用弱,晶面生长速率快,易尖灭。但是不同晶面附着能差异过大,NTO晶体形貌模拟结果并不理想,计算得到其长径比为13.172,各向异性差异较大。NTO晶体形貌模拟结果如图4(a)所示。利用工业酒精重结晶得到了NTO样品,其电镜图如图4(b)所示。



(a) 模拟结果

(b) 样品电镜图

图4 工业酒精体系中 NTO 晶体形貌

Fig.4 The morphology of NTO in the industrial alcohol system

由图4可知,NTO晶体形貌呈长棒状,其棱角

较多, 长径比较大, 模拟结果与实验样品较为吻合。工业酒精重结晶得到的 NTO 形貌并不理想, 需加入合适添加剂以改善晶体形貌。

#### 4 6 种添加剂对晶体形貌的影响

由于 NTO 有 4 个晶面带电荷, 因此添加剂是否有带电基团可能会显著影响 NTO 晶体形貌。选取带正电荷的十六烷基三甲基溴化铵 (CTAB)、带负电荷的十二烷基苯磺酸钠 (SDBS)、不带电的有机小分子丙酮 (AC)、不带电的大分子有机物聚乙烯醇 (PVA)、两性氨基酸分子 N-酰基氨基酸 (CAA) 为添加剂。此外, 考虑到 NTO 多个晶面裸露出 N 或 O 原子, 可能与羟基形成氢键, 选取带多羟基的单硬脂酸甘油酯 (GM) 为添加剂。研究这 6 种添加剂对 NTO 晶体形貌的影响。溶剂修正后的附着能如表 6 所示。

表 6 不同种添加剂体系中 NTO 不同晶面的附着能

Tab.6 Corrected attachment energies of NTO crystal faces in different additive systems

晶面	$E_{att}/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$						
	无添加剂	CAA	CTAB	SDBS	GM	PVA	AC
(002)	5.43	4.33	4.74	5.84	5.33	-3.58	2.92
(110)	9.81	6.04	8.91	5.62	9.06	9.18	4.33
(111)	-0.15	6.82	6.16	4.42	15.03	7.91	7.31
(100)	9.84	9.84	8.95	9.38	10.07	-9.35	10.04
(011)	8.84	4.28	10.49	3.97	9.13	8.60	7.33
(11-1)	12.31	14.94	43.72	2.92	6.73	32.81	12.40

由表 6 可知, 添加剂作用下, 溶剂体系与 NTO 晶面的附着能有较大改变, 表明添加剂会显著影响 NTO 晶面在工业酒精体系中的附着能, 促进或抑制某些晶面的生长, 从而使得形态学上最重要的晶面发生改变。不同添加剂对晶面附着能所起的促进或抑制效果不同。晶体形貌模拟结果如图 5 所示, 长径比如表 7 所示。

由图 5 可知, 6 种添加剂对 NTO 在工业酒精体系中的晶体形貌均有所改善。带多个羟基的 GM 和带正电荷的 CTAB 这 2 种添加剂改善作用更加明显, 计算得到的 NTO 晶体棱角较少, 长径比更接近 1。这是由于 NTO 表面生长速率较快的面多带负电荷, 与带正电荷的添加剂分子结合能力较强, 结合能增大会抑制其生长, 有利于晶体形貌的改善。且 NTO 晶体生长速率较快的面裸露原子多为 N、O 原子, 与含有多羟基的添加剂可形成氢键, 有利于其与添加剂分子

的结合, 显著阻碍晶面的生长, 从而改善晶体形貌。

以酒精 (质量分数为 99%) / 水为溶剂, 加入质量分数为 1% 的 CTAB, 重结晶得到的 NTO 晶体形貌如图 6 所示。由图 6 可知, 加入 CTAB 得到的 NTO 单晶为球形, 晶体形貌优良, 与模拟结果一致。

表 7 NTO 在不同添加剂体系中的长径比

Tab.7 Aspect ratio of NTO in different additive systems

体系	无添加剂	CAA	CTAB	SDBS	GM	PVA	AC
长径比	59.538	2.838	2.642	2.709	2.222	3.421	3.310

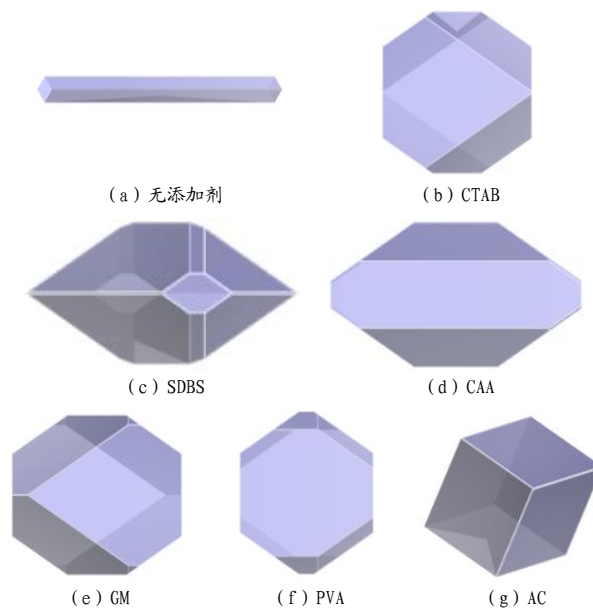


图 5 NTO 在添加不同添加剂的工业酒精溶剂中的形貌

Fig.5 Crystal morphology of NTO in industry alcohol systems with different additive

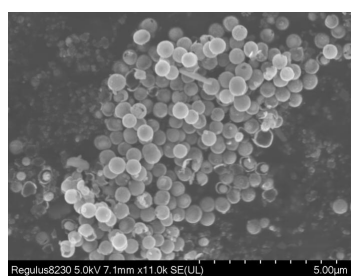


图 6 重结晶得到的 NTO 晶体形貌电镜图

Fig.6 SEM of the NTO crystal morphology obtained by recrystallization

## 5 结论

(1) 真空中, NTO 晶体的主要生长面为 (100)、(002)、(011)、(11-1)、(111) 和 (110)。(100) 面是 NTO 各晶面中附着能最小、生长速率最慢、面积

占比最大的面,可作为生长速率较慢的晶面代表,(11-1)面与之相反,附着能绝对值最大,可作为生长速率较快的晶面代表。

(2)利用分子动力学的方法计算 NTO 晶体在工业酒精体系中的附着能和晶体形貌,结果表明在工业酒精体系中 NTO 晶体形貌较差,与实验结果一致。

(3)6种添加剂均会改善 NTO 在工业酒精体系中的晶体形貌,含多个羟基的单硬脂酸甘油酯(GM)和带正电基团的十六烷基三甲基溴化铵(CTAB)这2种添加剂改善作用更加明显。添加质量分数为1%的CTAB,重结晶得到的 NTO 晶体形貌较为理想,棱角较少,且长径比更接近1。模拟结果与实验结果一致。

#### 参考文献:

- [1] 刘鑫,李亚南,常佩,等. NTO 及其衍生物合成与应用研究进展[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2021, 19(02): 18-23.
- [2] 杨雄,黄亚峰,王晓峰. NTO 在混合炸药中的应用及其酸性问题的研究进展[J]. 材料导报, 2019, 33(z2): 627-629, 633.
- [3] 周群,王伯周,周诚,等. 球形化 NTO 晶体的制备及机械感度研究[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2019, 17(02): 23-26.
- [4] 吴娜娜. NTO/HMX 基钝感压装炸药研究[D]. 山西 太原: 中北大学, 2016.
- [5] Xiong Shuling, Chen Shusen, Jin Shaohua, et al. Additives effects on crystal morphology of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate by molecular dynamics simulations [J]. Journal of Energetic Materials, 2016, 34(4):384-394.
- [6] 周畅. TKX-50 结晶工艺的研究[D]. 北京:北京理工大学, 2017.
- [7] 田颖. 添加剂对 PETN 晶形的影响研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2016.
- [8] 刘立媛. FOX-7 结晶过程研究[D]. 山西 太原: 中北大学, 2020.
- [9] Damiri S, Namvar S, Panahi H. Micro-seeding and soft template effects on the control of polymorph and morphology of HMX micro particles in solvent-antisolvent process[J]. Defence Technology, 2017, 13(6):392-396.
- [10] Zhao Li, Li Jing, He Jinxuan, et al. A study of solvent and antisolvent influence on the crystal morphology of  $\epsilon$ -CL-20 by a modified attachment energy model[J]. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 2020, 45(7): 1 117-1 128.
- [11] 刘英哲, 毕福强, 来蔚鹏, 等. 5,5'-联四唑-1,1'-二氧二羟铵在不同生长条件下的晶体形貌预测[J]. 含能材料, 2018, 26(3): 210-217.
- [12] Liu Ning, Zhou Cheng, Wu Zongkai, et al. Theoretical study on crystal morphologies of 1,1-diamino-2,2-dinitroethene in solvents: modified attachment energy model and occupancy model[J]. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2018 (85):262-269.
- [13] 樊思琪, 顾晓飞, 段晓惠, 等. FOX-7 在八种不同溶剂体系下的晶体形貌预测[J]. 含能材料, 2021, 29(11): 1 132-1 141.
- [14] Li Jing, Jin Shaohua, Lan Guanchao, et al. Morphology control of 3-nitro-1,2,4-triazole-5-one (NTO) by molecular dynamics simulation[J]. CrystEngComm, 2018(20): 6 252-6 260.