

《太赫兹光谱学研究 CL-20/MTNP 共晶振动特性*》的补充材料

刘泉澄^{1)†} 杨富^{1)‡} 张祺²⁾ 段勇威¹⁾ 邓琥³⁾ 尚丽平¹⁾

1) (西南科技大学信息工程学院, 绵阳 621000)

2) (中国工程物理研究院化工材料研究所, 绵阳 621050)

3) (西南科技大学四川天府新区创新研究院, 成都 610299)

附录 A 结构优化后晶体参数结果

表 A1 CL-20 结构优化参数对比

Table A1. Comparison of structure optimization parameters for CL-20.

原始参数	默认 $s_R=1.055$		$s_R=1$	
	优化结果	偏差/%	优化结果	偏差/%
Angle α	90	90	90	0.00
Angle β	106.87	107.817	107.626	0.71
Angle γ	90	90	90	0.00
Volume V	1426.97	1446.68	1415.4	-0.81
Length a	8.855	8.94305	8.85271	-0.03
Length b	12.579	12.6759	12.5339	-0.36
Length c	13.387	13.4046	13.3845	-0.02

表 A2 MTNP 结构优化参数对比

Table A2. Comparison of structure optimization parameters for MTNP.

原始参数	默认 $s_R=1.055$		$s_R=1$	
	优化结果	偏差/%	优化结果	偏差/%
Angle α	90	90	90	0.00
Angle β	90	90	90	0.00
Angle γ	90	90	90	0.00
Volume V	842.61	817.172	837.136	-0.65
Length a	11.9211	11.7991	11.8769	-0.37
Length b	8.3391	8.26914	8.30592	-0.40
Length c	8.476	8.37541	8.48605	0.12

表 A3 CL-20/MTNP 结构优化参数对比

Table A3. Comparison of structure optimization parameters for CL-20/MTNP.

	原始参数	默认 $s_R = 1.055$	
		优化结果	偏差/%
Angle α	90	90	0.00
Angle β	98.639	98.6971	0.06
Angle γ	90	90	0.00
Volume V	1126.95	1128.34	0.12
Length a	8.3536	8.32068	-0.39
Length b	11.4249	11.4805	0.49
Length c	11.9436	11.9493	0.05

附录 B 三种分子振动模式分解结果

表 B1 CL-20 振动分解结果

Table B1. CL-20 vibrational decomposition results.

基团	振动频率/分子间振动							平均
	0.88	1.33	1.43	2.07	2.68	2.75	3.48	
笼形骨架/%	35.9	44.3	45.3	41.9	42.3	44.9	39.7	42
1-硝基/%	6.6	4.8	2.7	4	5.7	2.6	1.5	4
2-硝基/%	4.7	4.2	2.3	1.9	5.6	2	9.6	4.3
3-硝基/%	9.4	1.7	2.1	4.6	5.1	4.3	0.7	4
4-硝基/%	3.5	1.7	2.7	3	2.9	4.5	4	3.2
5-硝基/%	2.4	5.9	1.9	4.2	2.1	0.9	6.4	3.4
6-硝基/%	10.1	1.5	2	8.2	7.8	2	5.9	5.3
基团	振动频率/分子内振动							平均
	0.88	1.33	1.43	2.07	2.68	2.75	3.48	
笼形骨架/%	3.5	7.9	9.1	6.5	6.1	8.6	5.7	6.8
1-硝基/%	1.5	2.6	4.7	4.3	2.5	5.1	7.6	4
2-硝基/%	3.9	3.5	5.4	7.2	2.6	6	3.3	4.6
3-硝基/%	2.4	6.8	5.5	3.4	3.2	2.9	8.8	4.7
4-硝基/%	5.6	6.8	4.8	5.6	6.3	2.6	4.2	5.1
5-硝基/%	7.1	1.1	5.9	3.9	7.4	7.5	1	4.8
6-硝基/%	3.4	7.2	5.7	1.5	0.4	6.1	1.7	3.7

表 B2 MTNP 振动分解结果

Table B2. MTNP vibrational decomposition results.

基团	振动频率/分子间振动								平均
	0.53	0.88	0.91	1.54	1.77	2.16	2.83	3.41	
吡啶环/%	43.8	43.8	43.8	43.3	43.8	43.8	44.2	44.5	43.9
1-硝基/%	1.6	0.1	0.2	0.5	0.6	0.2	0.1	0	0.4
2-硝基/%	0.1	0.3	0.2	1	0.2	0.2	0.1	0.2	0.3
3-硝基/%	0.2	0.4	0.2	1.6	0.2	0.3	0.1	0.4	0.4
1-甲基/%	0.7	0.3	0.2	0.4	0.2	0.2	0.7	1.3	0.5

基团	振动频率/分子间振动								平均
	0.53	0.88	0.91	1.54	1.77	2.16	2.83	3.41	
吡啶环/%	20.4	20.7	20.8	20	20.7	20.7	21	20.9	20.7
1-硝基/%	7.8	8.9	8.8	8.9	8.4	8.7	9	9.2	8.7
2-硝基/%	9.2	8.7	8.7	8.4	8.9	8.8	9	9.1	8.8
3-硝基/%	9.1	8.6	8.7	7.9	8.8	8.6	9	8.9	8.7
1-甲基/%	7.1	8.1	8.3	8.1	8.3	8.5	7	5.5	7.6

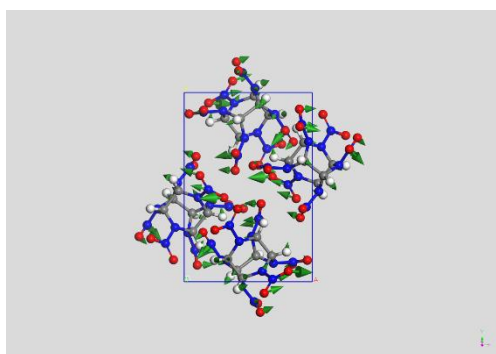
表 B3 CL-20/MTNP 振动分解结果

Table B3. CL-20/MTNP vibrational decomposition results.

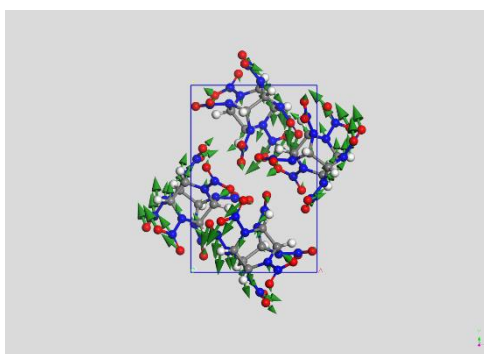
基团	振动频率/分子间振动								平均
	0.92	1.26	1.57	1.97	2.24	2.54	3.08	3.4	
笼形骨架/%	41.9	33	38.8	39.3	32.1	38	40.1	43.5	38.3
1-硝基/%	2.7	3.3	1.7	1.7	4.2	2.3	1.6	1.4	2.4
2-硝基/%	1.4	4	2.4	1.3	2.3	1.8	1.9	1.2	2
3-硝基/%	1.1	2.1	3.3	1.2	8.2	3.9	2.1	0.7	2.8
4-硝基/%	1.6	2.3	1.9	2.7	1.8	1.5	1.4	0.8	1.7
5-硝基/%	2.7	1	0.8	1.5	1.7	4.8	3	0.7	2
6-硝基/%	2.4	3.4	2	3.4	1.9	2.9	2.3	0.7	2.4
吡啶环/%	0.9	6.6	5.7	5.9	5.7	2.6	1.4	0.8	3.7
1-硝基/%	0.3	2.7	1.3	2.3	3.2	4	2.2	0.8	2.1
2-硝基/%	0.4	4.5	3.5	1.3	2.1	3.2	1.2	0.5	2.1
3-硝基/%	0.6	6.5	1.8	1.4	2.3	2.1	3	1.1	2.3
1-甲基/%	0.2	0.7	1.1	1	0.9	1.2	0.3	0.2	0.7

基团	振动频率/分子内振动								平均
	0.92	1.26	1.57	1.97	2.24	2.54	3.08	3.4	
笼形骨架/%	9.4	5.3	7.7	8	5.3	7.1	8.5	10.3	7.7
1-硝基/%	1.5	1.9	3.4	3.3	0.6	2.9	3.2	2.7	2.4
2-硝基/%	3.1	1.1	2.5	3.7	2.8	3.5	2.8	2.9	2.8
3-硝基/%	3.4	3.4	1.4	3.8	4.2	1.1	2.5	3.5	2.9
4-硝基/%	2.8	3.1	3.2	2	3.4	3.9	3.4	3.5	3.2
5-硝基/%	1.5	4.6	4.4	3.5	3.5	0	1.4	3.6	2.8
6-硝基/%	1.8	1.8	3	1.2	3.3	2.2	2.3	3.5	2.4
吡啶环/%	3.9	0.3	0.5	0.2	0.6	3.5	3.8	3.7	2.1
1-硝基/%	4.3	2.7	3.8	2.5	1.8	1	2.4	3.4	2.7
2-硝基/%	4.2	0.5	1.2	3.7	3	1.9	3.7	3.8	2.7
3-硝基/%	3.9	1.9	3.2	3.6	2.8	3.2	1.5	3.1	2.9
1-甲基/%	4.1	3.4	1.4	1.6	2.3	1.3	4.1	3.7	2.7

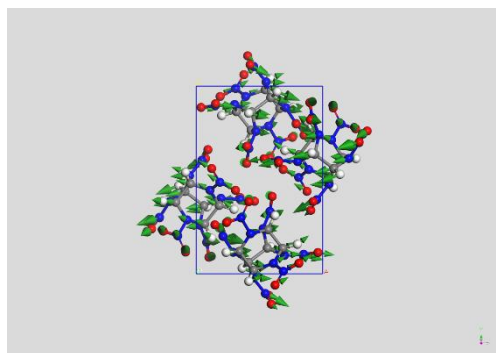
附录 C DFT 计算的振动模式



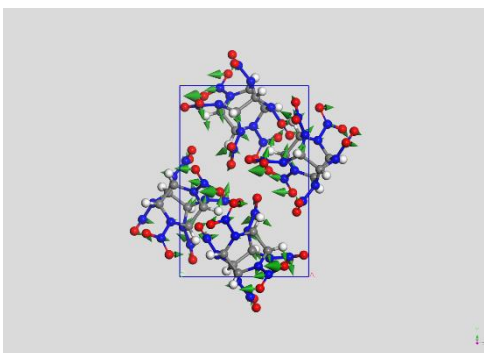
(a)



(b)



(c)



(d)

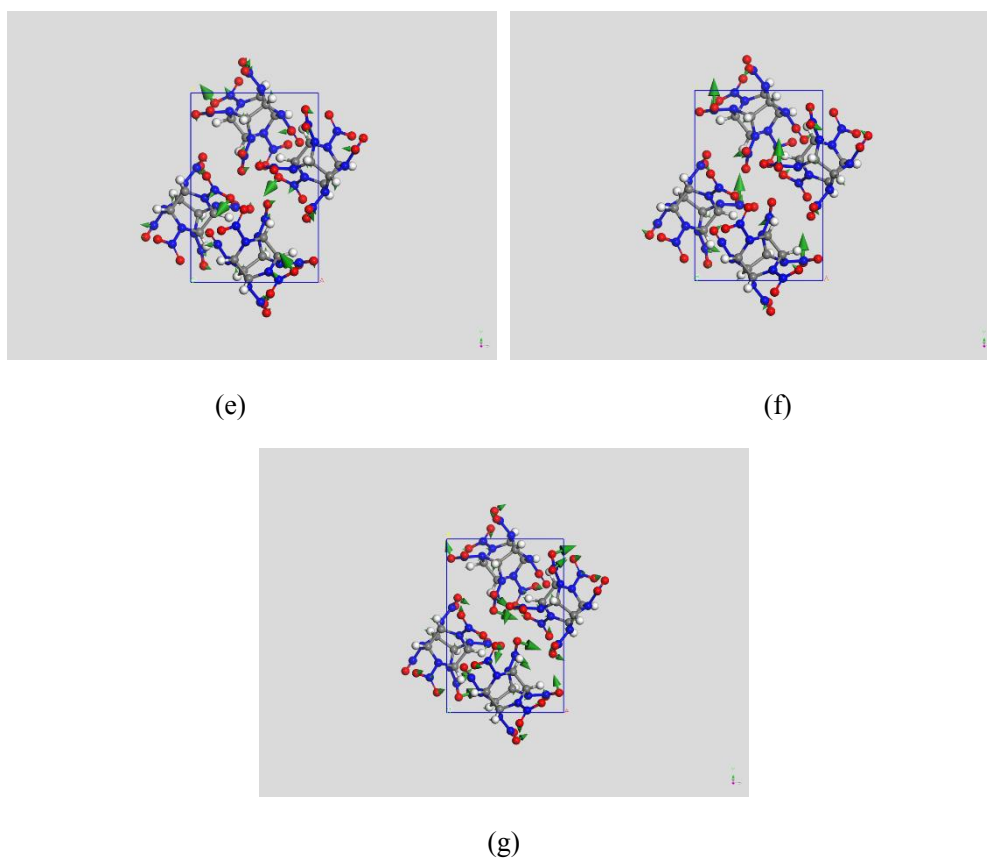
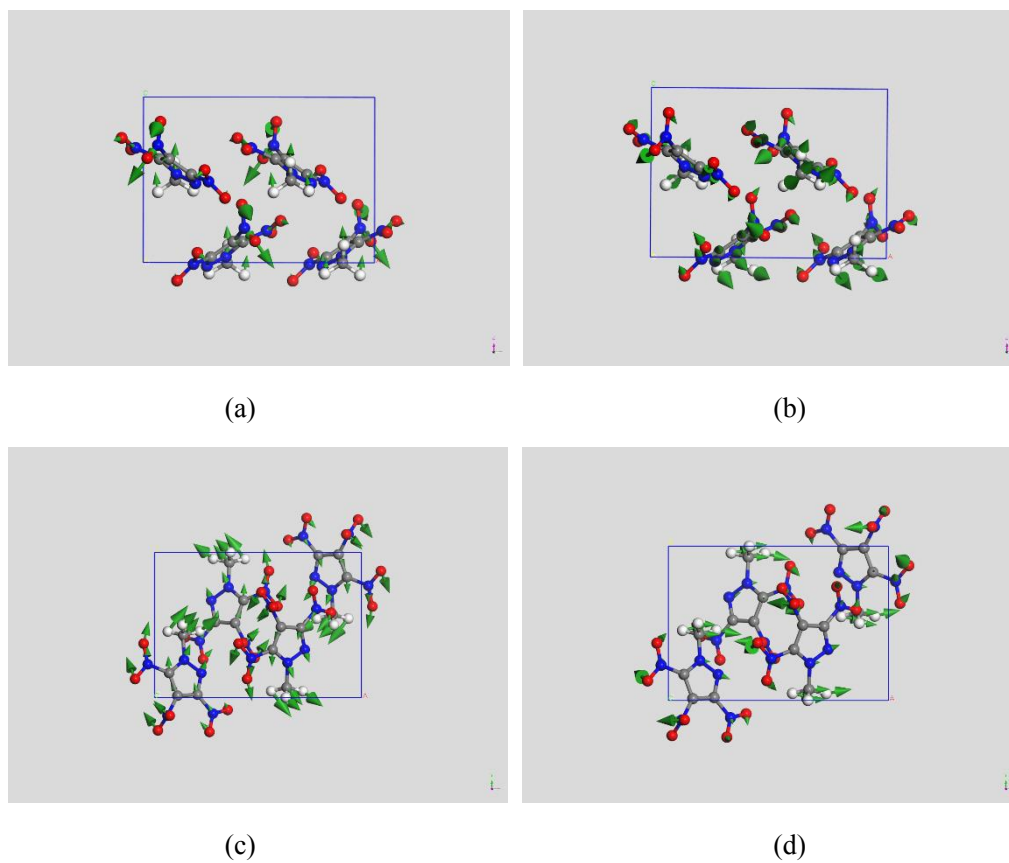


图 C1 CL-20 振动模式 (a) 0.88; (b) 1.33; (c) 1.43; (d) 2.07; (e) 2.68; (f) 2.75; (g) 3.48

Fig. C1. CL-20 vibration mode: (a) 0.88; (b) 1.33; (c) 1.43; (d) 2.07; (e) 2.68; (f) 2.75; (g) 3.48.



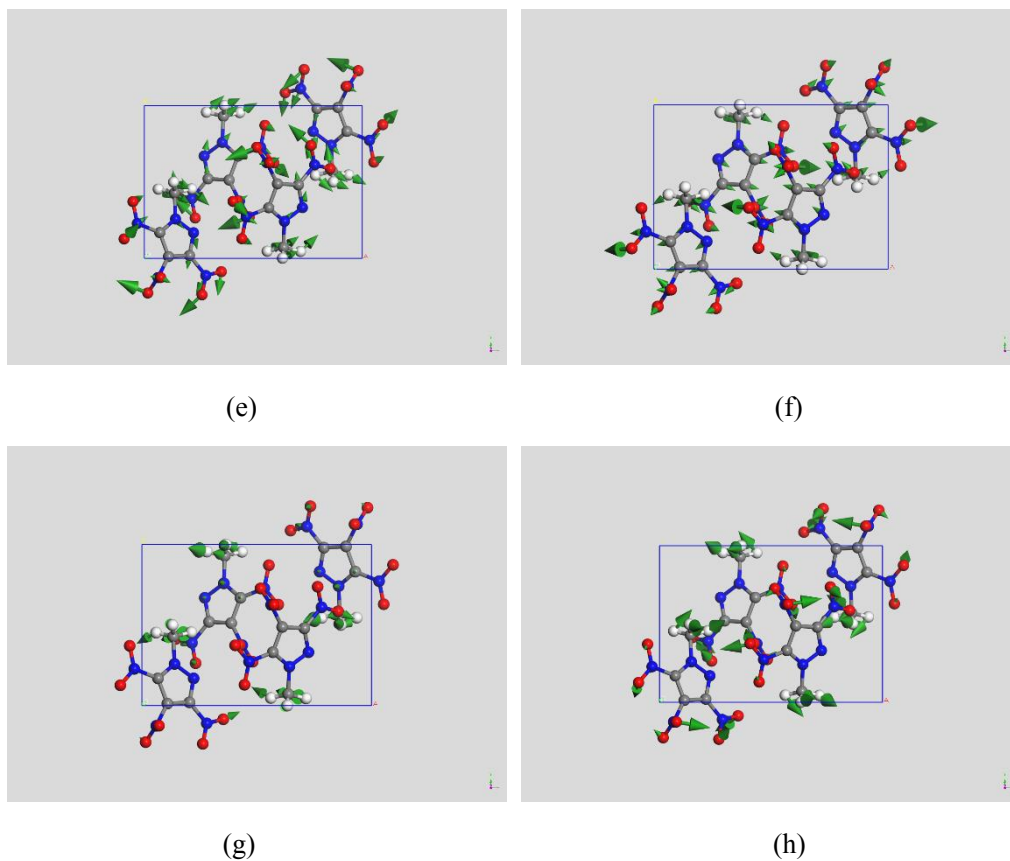
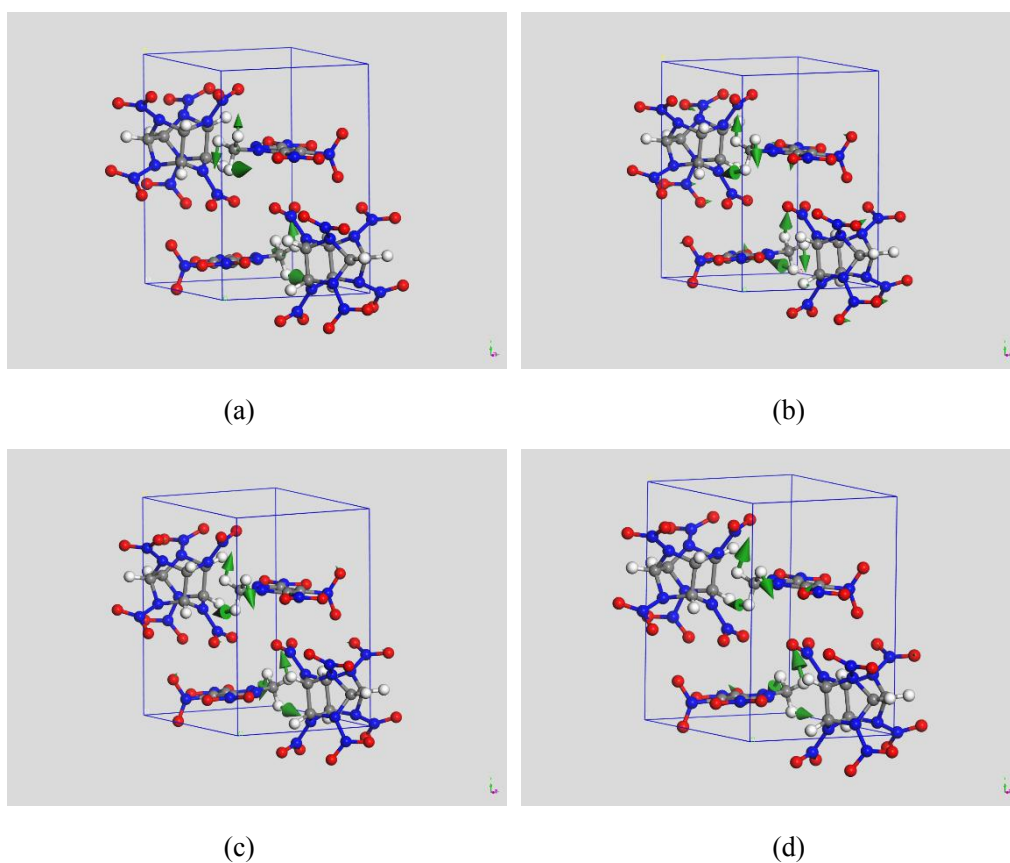


图 C2 MTNP 振动模式 (a) 0.53; (b) 0.88; (c) 0.91; (d) 1.54; (e) 1.77; (f) 2.16; (g) 2.83; (h) 3.41

Fig. C2. MTNP vibration mode: (a) 0.53; (b) 0.88; (c) 0.91; (d) 1.54; (e) 1.77; (f) 2.16; (g) 2.83; (h) 3.41.



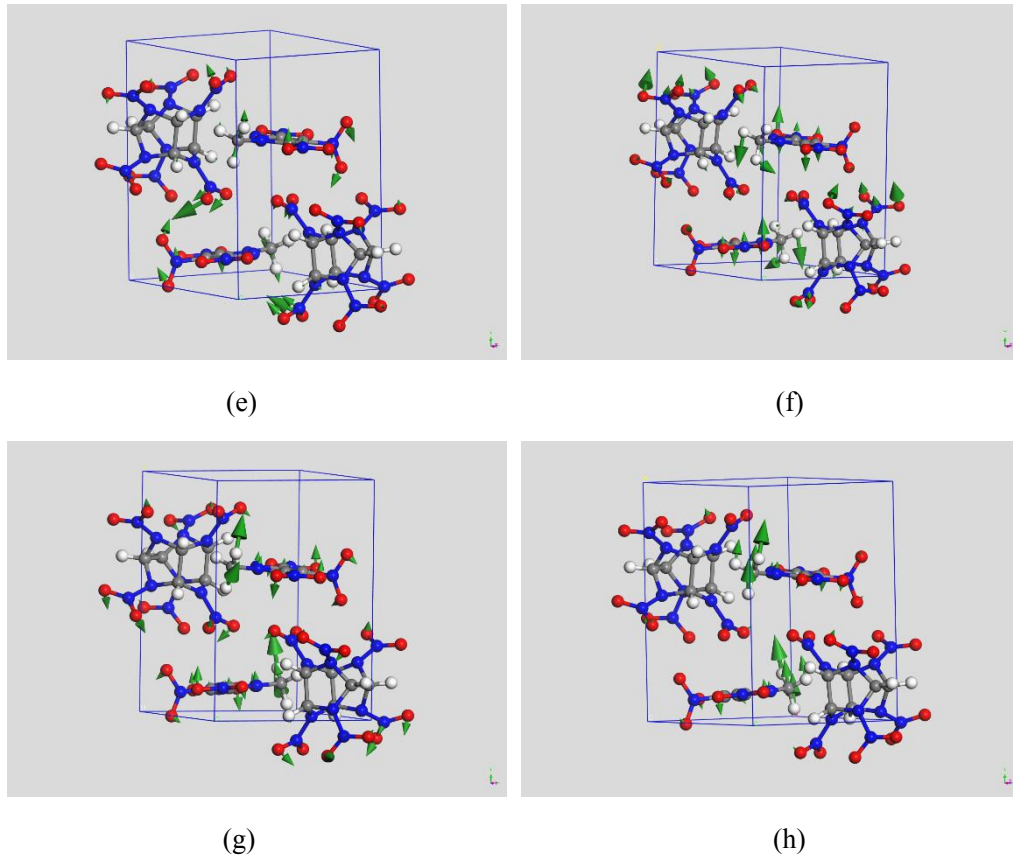


图 C-3 CL -20/MTNP 振动模式 (a) 0.92; (b) 1.26; (c) 1.57; (d) 1.97; (e) 2.24; (f) 2.54; (g) 3.08; (h) 3.40

Fig. C3. CL -20/MTNP vibration mode: (a) 0.92; (b) 1.26; (c) 1.57; (d) 1.97; (e) 2.24; (f) 2.54; (g) 3.08; (h) 3.40.