

太赫兹光谱学研究 CL-20/MTNP 共晶振动特性*

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)

(2024年7月9日收到; 2024年8月26日收到修改稿)

共晶是一种分子层次调控材料物化性质的高效方法, 然而目前共晶复杂体系结构与宏观性质间关系一直难以得到深入理解。本文依据太赫兹光谱可激发晶体弱作用的优势, 以 CL-20/MTNP 共晶为对象开展了太赫兹振动光谱研究。首先, 测量 CL-20、MTNP 和共晶 CL-20/MTNP 的太赫兹吸收光谱。其次, 分析了基于密度泛函理论的振动计算方法, 获得了 3 种物质太赫兹频段振动特性, 对吸收光谱进行振动匹配。最后, 采用振动分解方法将晶体分子的整体振动分解为分子间和分子内振动。在此基础上, 分析了共晶前后振动变化规律。结果表明: 共晶后新形成的弱相互作用由 CL-20 分子主导, 同时 MTNP 分子主要通过 3 个硝基与 CL-20 分子交互作用。本文的研究结论为共晶热性质提供了微观解析。

关键词: 太赫兹光谱, 密度泛函理论, 振动分解, CL-20 共晶

PACS: 32.30.Bv, 33.20.Vq, 65.40.-b

DOI: [10.7498/aps.73.20240944](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240944)

CSTR: [32037.14.aps.73.20240944](https://cstr.cnswust.edu.cn/32037.14.aps.73.20240944)

1 引言

共晶是指两种及以上分子通过弱相互作用在固态下形成的稳定、有序晶格结构^[1]。宏观上通过控制共晶的原始组分、共晶物质的量比等, 可以有效调节其物理化学特性, 如溶解度、热稳定性、光学性质等。因此, 共晶技术近年来得到相关领域的广泛关注。

不同分子组合及排列方式都可以形成不同的晶格结构, 因此, 共晶结构与性质之间关系的理解依然是个难点问题^[2]。热分析、红外和拉曼光谱技术依然是目前主要的共晶研究手段。热分析技术可宏观测定共晶的熔点、热力学等性质^[3], 难以深入理解微观机理。红外和拉曼光谱分别测量分子的

偶极矩振动和拉曼活性, 通过相比于原始组分吸收谱带的位移识别共晶的形成^[4]。然而, 传统红外和拉曼光谱激发的主要是分子内强相互作用, 远高于共晶结合力, 在共晶性质分析中存在一定限制。

近年来, 太赫兹光谱技术已发展为一种晶体性质分析的重要工具^[5,6]。太赫兹光谱对应的是晶体分子振动能级, 因此, 在共晶分析中具有独特优势。同时, 与红外光谱不同, 太赫兹频段不存在特定官能团的特征跃迁, 光谱的解析需要借助第一性原理方法^[7,8]。郑转平等^[9]测量了姜黄素与邻苯二酚共晶的太赫兹光谱, 结合密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算了对应的振动模式, 通过振动模式观察认为共晶太赫兹吸收源于分子间氢键的主导作用。Davis 等^[10]研究了依那普利与马来酸共晶的太赫兹振动模式, 分析了不同模式中的

* 国家自然科学基金(批准号: 22305198) 和西南科技大学博士基金(批准号: 21ZX7143) 资助的课题。

同等贡献作者。

† 通信作者。E-mail: liuqc@swust.edu.cn

旋转和扭转振动类型. Wang 等^[1]开展了硝苯地平与异烟酰胺共晶的研究, 通过振动观察分析, 共晶中的氢键作用一般分布在 1.5 THz 之内, 甲基的旋转分布在 1.5—4.0 THz 宽范围. 上述研究表明太赫兹光谱结合第一性原理计算能为共晶性质的深入分析提供有效手段. 然而, 目前的分析大多集中于对振动模式的直观观察, 主要揭示了氢键和基团的振动特征. 然而, 在共晶体系中, 由于每个原子都受到复杂的相互作用, 直观的振动分析存在一定的局限性, 难以对共晶性质进一步理解.

六硝基六氮杂异纤锌烷(hexanitrohexaaxaisowurtzitane, CL-20)是目前威力最大的单体炸药, 但较差的安全性限制了其广泛应用. CL-20/MTNP(1-甲基-3, 4, 5-三硝基-1 H-吡唑, MTNP)是近年合成的代表, 在保留高能量的同时改善了热稳定性^[12,13]. 本文测量了 CL-20, MTNP 及 CL-20/MTNP 共晶的太赫兹光谱, 开展了 DFT 理论计算, 获得了与实验吸收对应的振动模式, 基于振动分解方法, 分析了共晶前后分子振动变化规律.

2 实验与方法

2.1 样品制备与光谱测量

CL-20, MTNP 和 CL-20/MTNP 固体粉末由中国工程物理研究院化工材料研究所制备, 形貌为颗粒, 共晶体合成方法如文献^[12]描述. 用于太赫兹光谱测量的样品预处理流程如下: 分别称量 40 mg 样品与 500 mg 聚四氟乙烯(PTFE), 采用自动混合仪(Shakir, Pike Technologies)将样品与 PTFE 混合均匀; 随后, 将混合粉末放入自动压片机(Altac 15, Specac Ltd)压制, 制成直径 13 mm、厚度约为 1.5 mm 的圆片.

太赫兹光谱测量采用 Menlo Systems 的 TERA K15 光谱仪, 采用飞秒光纤激光器(ELMO, Menlo System)作为太赫兹激发源, 飞秒激光中心波长为 1550 nm、重复频率为 100 MHz、脉冲宽度 92 fs. 太赫兹光谱测量条件为室温(21 °C)、相对湿度≤3% RH、时域测量长度为 100 ps. 在上述条件下, 太赫兹光谱有效频率范围为 0.3—4 THz, 频域分辨率为 6.7 GHz.

太赫兹吸收系数 $\alpha(\omega)$ 计算公式如下:

$$T(\omega) = \frac{E_{\text{sam}}(\omega)}{E_{\text{ref}}(\omega)} = \rho(\omega) \exp[-\varphi(\omega)], \quad (1)$$

$$n(\omega) = \frac{\phi(\omega)}{\omega d} + 1, \quad (2)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2}{d} \ln \left\{ \frac{4n(\omega)}{\rho(\omega)[n(\omega) + 1]^2} \right\}, \quad (3)$$

其中, 下标 sam 和 ref 分别表示样品和干燥空气的信号, ω 表示角频率, $T(\omega)$ 表示传输函数, $\rho(\omega)$ 表示幅值比, $\varphi(\omega)$ 表示相位差, d 表示样品厚度, $n(\omega)$ 表示折射率.

2.2 理论计算

基于 DFT 基本原理, 采用 Material Studio 软件 CASTEP 程序^[14]计算晶体太赫兹振动特性. 太赫兹光谱起源于分子间弱相互作用, 计算模型与方法需要充分考虑分子内弱作用. 本文采用周期性晶胞结构^[12,13]作为结构优化和能量计算的物理模型, 以充分考虑原子在凝聚相中的相互作用^[15]. 同时, 结构优化和能量计算引入色散校正以弥补传统泛函无法计算长程力的不足.

另外, 精确的复现晶体结构也是准确计算的基础^[7]. 目前, 太赫兹频段振动计算广泛采用 PBE 泛函结合 Grimme 色散校正的计算方法, 本文采用 PBEsol (Perdew-Burke-Ernzerhof revised for solids) 泛函与 TS (Tkatchenko-Scheffle) 色散校正方法. 相比之下, PBEsol 修正了 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 结构优化过程易低估晶格参数的不足^[16], TS 方法考虑了局部环境的变化, 改善了 Grimme 高估极化率的缺陷^[17].

结构优化寻找稳态的过程通常会改变原始晶格参数, 这对太赫兹频段振动计算结果具有较大影响. 本文中实验光谱与计算采用的晶胞结构参数均是在室温下获得, 为了保证实验测量与理论计算的一致性, 通过修改 TS 色散校正中的缩放尺度项 s_R ^[18], 以调整优化后体积的晶格参数, TS 色散校正原理如下:

$$E_{\text{vdw}} = -\frac{1}{2} \sum_{AB} f_{\text{damp}}(R_{AB}, R_A^0, R_B^0) \frac{C_{6AB}}{R_{AB}^{-6}}, \quad (4)$$

$$f_{\text{damp}}(R_{AB}, R_{AB}^0) = \frac{1}{1 + \exp \left[-d \left(\frac{R_{AB}}{s_R R_{AB}^0} - 1 \right) \right]}, \quad (5)$$

其中, R_{AB} 为原子 A 和 B 之间的距离, R_A^0 和 R_B^0 是范德瓦耳斯半径, C_{6AB} 为色散系数, R_{AB}^{-6} 为核间分离, f_{damp} 为阻尼函数, d 为阻尼函数的梯度.

由与原始晶格参数反复对比测试, CL-20, MTNP、CL-20/MTNP 的 s_R 分别为 1.000, 1.155, 1.055.

2.3 振动分解

本文采用振动分解方法, 将 DFT 计算得到了分子振动分解为分子间和分子内振动^[19,20]. 其基本原理如下: 每个分子质心的运动归属为分子间振动, 每个原子相对于分子质心的运动归属为分子内振动. 通过上述方法可以将每种振动模式, 定量分解为分子间振动 Δ_{CM} 和分子内振动 Δ_{RM} :

$$\Delta_{CM} = \frac{1}{M} \left| \sum m_i \delta_i \right|, \quad (6)$$

$$\Delta_{RM} = \frac{1}{N} |\delta_i - \Delta_{CM}|, \quad (7)$$

其中, M 是分子的质量, N 是原子的个数, δ_i 为每种振动模式中原子的位移矢量.

3 实验测量和 DFT 计算

CL-20、MTNP 与共晶 CL-20/MTNP 太赫兹光谱如图 1 所示, 共晶的太赫兹光谱与原始组分 CL-20 和 MTNP 在吸收趋势、强度均不相同, 这是由于太赫兹频段振动跃迁对应于晶体内所有原子的组合振动能级, 分子结构与排布方式的变化均会导致完全不同的太赫兹光谱, 结果与其他研究类似^[9-11].

表 1 列出了结构优化后主要晶体结构参数的对比, 通过修正缩放尺度项 s_R , 可以与原始晶胞参数保持较好一致性. 在结构优化基础上, 基于 Hessian 矩阵和 Born 有效电荷计算得到振动频率和强度. 受温度效应、被测物振动能级弛豫时间、仪器分辨率等因素影响, 室温下材料的太赫兹吸收

表 1 结构优化后晶格参数对比

Table 1. Comparison of lattice parameters after structural optimization.

Lattice parameters	CL-20/%	MTNP/%	CL-20/MTNP/%
Angle $\alpha/(^\circ)$	0.00	0.00	0.00
Angle $\beta/(^\circ)$	0.71	0.00	0.06
Angle $\gamma/(^\circ)$	0.00	0.00	0.00
Length $a/\text{\AA}$	-0.03	-0.37	-0.39
Length $b/\text{\AA}$	-0.36	-0.40	0.49
Length $c/\text{\AA}$	-0.02	0.12	0.05
Volume $V/\text{\AA}^3$	-0.81	-0.65	0.12

存在展宽现象. DFT 计算无法考虑显式的温度效应, 以狄拉克 δ 函数给出计算结果, 如表 2 所示. 根据频率位置和相对强度, 将计算结果与实验测量的吸收光谱进行匹配. 大部分实验吸收峰与理论计算结果可一一对应, 部分实验吸收特性可能是由多种振动跃迁复合作用结果, 如: MTNP 测量的 0.96 THz, 归属于 0.88 和 0.91 THz 两处振动模式; CL-20/MTNP 在 3.0—4.0 THz 的宽带吸收归属为 3.08 和 3.40 振动模式.

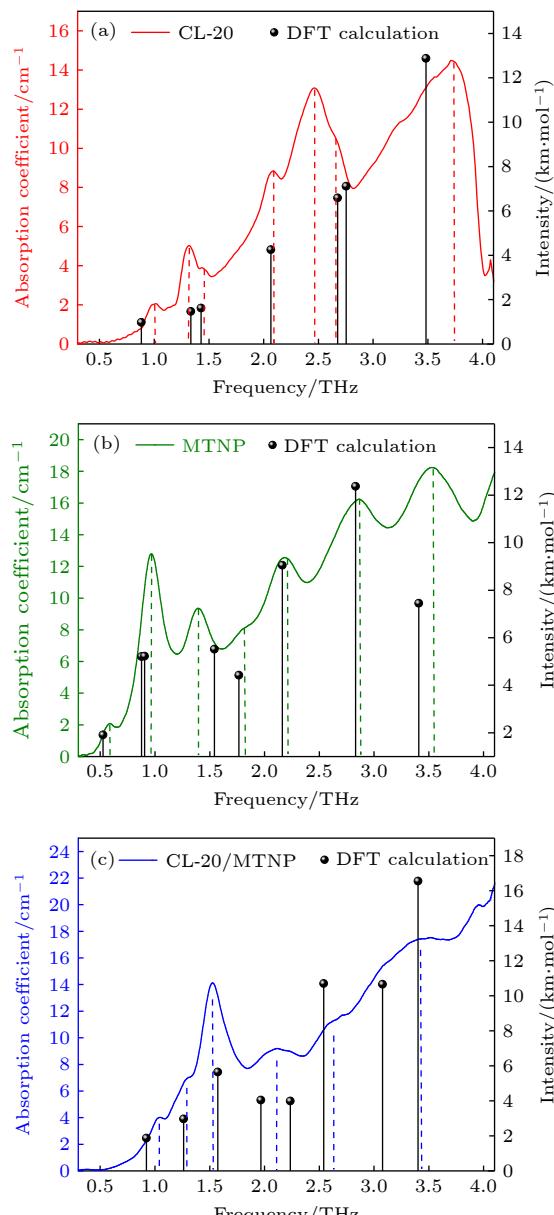


图 1 三种物质的太赫兹吸收光谱和 DFT 计算结果(虚线表示主要的吸收峰位置) (a) CL-20; (b) MTNP; (c) CL-20/MTNP

Fig. 1. THz spectra and DFT calculations of the three materials (The dashed lines represent the main absorption positions): (a) CL-20; (b) MTNP; (c) CL-20/MTNP.

表 2 三种物质太赫兹吸收中心位置与 DFT 计算结果

Table 2. Experiment absorption center and DFT calculations of the three materials.

CL-20			MTNP			CL-20/MTNP		
Exp.	Cal.	Δf	Exp.	Cal.	Δf	Exp.	Cal.	Δf
0.99	0.88(0.98)	0.11	0.59	0.53(1.91)	0.06	1.04	0.92(1.87)	0.12
1.31	1.33(1.47)	0.02		0.88(5.21)		1.28	1.26(2.97)	0.02
1.43	1.43(1.62)	0		0.91(5.22)		1.53	1.57(5.65)	0.04
2.08	2.07(4.25)	0.01	1.40	1.54(5.52)	0.14		1.97(4.04)	
2.50	2.68(6.59)	0.18	1.81	1.77(4.42)	0.04	2.11	2.24(3.99)	0.01
2.70	2.75(7.11)	0.05	2.18	2.16(9.05)	0.02	2.62	2.54(10.70)	0.08
3.75	3.48(12.88)	0.27	2.86	2.83(12.37)	0.03		3.08(10.66)	
			3.53	3.41(7.45)	0.12	3.34	3.40(16.55)	0.10

注: Exp. , Experiment/THz; Cal., Calculation/THz ($\text{km} \cdot \text{mol}^{-1}$); Δf , deviation between experiment and calculation.

4 讨论部分

CASTEP 程序提供了每种振动的视觉观察, 部分振动模式如图 2 所示. 其中, 绿色箭头描述了每个原子的位移矢量, 这对应于当前模式中每个原子的电子势能面的形状和深度. 然而, 这种直观观察可认识的信息较少, 特别是 CL-20 这种笼形立体结构体系. 详细振动模式请见补充材料 (online).

按照 2.3 节所述方法对振动模式中每个原子位移矢量进行了分解, 如图 3 所示. 可以看出, 晶体的太赫兹振动具有分子间与分子内耦合特性. 对于 CL-20(图 3(a)), 分子间振动占据主导, 平均占比为 66.3%. MTNP(图 3(b)) 晶体内非共价作用较弱, 分子间振动占比仅为 45.5%. CL-20/MTNP 共晶(图 3(c)) 中分子间振动占据主导模式, 平均占比为 62.6%, 位于两原始组分之间.

共晶中 CL-20 与 MTNP 物质的量比为 1:1, 分子量之比约为 2:1. 而共晶中 CL-20 与 MTNP 分子在总振动中分别占比 75.9% 与 24.1%(图 3(c)),

比例约为 3.2:1, 分子间振动分别为 51.7% 与 10.9% (图 3(c)), 比例为 4.73:1. 共晶中 CL-20 分子振动占比远高于分子量之比, 这说明共晶中的低频振动由 CL-20 分子主导. 进一步, 将共晶振动分别以 CL-20 与 MTNP 组分进行归一化计算, 共晶中 CL-20 分子间和分子内振动比分别为 68.1% 与 31.9%, MTNP 分子间和分子内振动占比分别为 45.3% 和 54.7%, 均与各自晶体中的比例接近接近, 这说明共晶后两种分子的整体分子间和分子内振动占比未发生显著变化.

进一步, 分析了每种分子主要基团的振动变化, 如图 4 所示. 对于 CL-20 分子, 笼形骨架占据整体振动的 48.8%, 分子间振动占比 42.0%, 6 个硝基基团整体振动为 51.2%, 分子间振动占比 24.2%. 对于 MTNP, 吡唑环占据了整体振动的 64.5%, 其中分子间振动为 43.9%, 3 个硝基的振动贡献为 27.4%, 而分子间振动仅为 1.1%. 共晶中, CL-20 笼型骨架分子间振动占比为 50.5%, 6 个硝基分子间振动为 17.6%; MTNP 分子 3 个硝基的分子间振

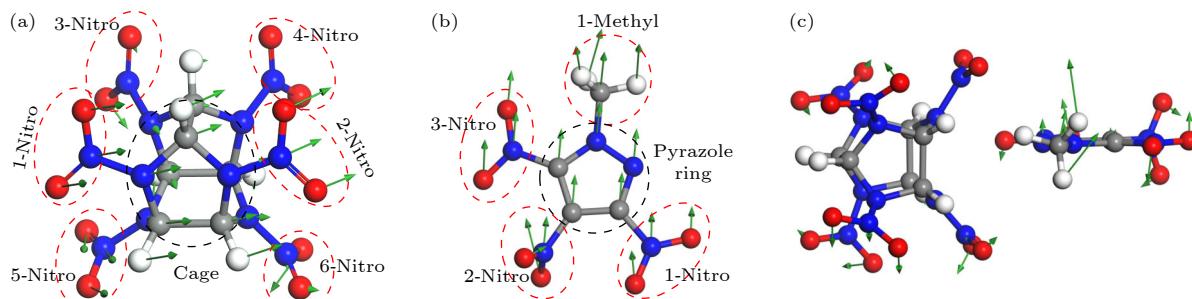


图 2 三种物质的振动模式图 (a) CL-20 在 1.33 THz; (b) MTNP 在 0.88 THz; (c) CL-20/MTNP 在 3.08 THz. 为了清晰, 仅展示晶胞中的一个分子, 其中灰、白、红、蓝色分别表示碳、氢、氧、氮原子

Fig. 2. Vibration mode of the three materials: (a) CL-20 at 1.33 THz; (b) MTNP at 0.88 THz; (c) CL-20/MTNP at 3.08 THz. For clarity, only one molecule within the unit cell is shown. Gray, white, red, and blue colors represent carbon, hydrogen, oxygen, and nitrogen atoms, respectively.

动为 27.1%, 吡唑环分子间振动为 15.4%。可以看出, 共晶后两种分子内主要基团的振动发生了变化。

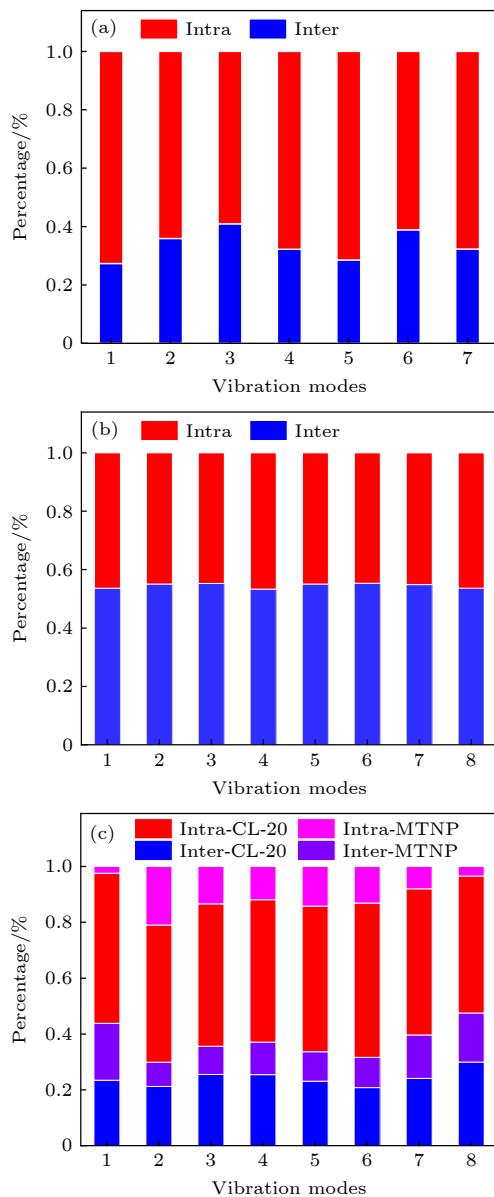


图 3 三种分子振动模式分解结果 (a) CL-20 分子; (b) MTNP 分子; (c) CL-20/MTNP 共晶分子

Fig. 3. Decomposition results of three molecular vibration modes: (a) CL-20; (b) MTNP; (c) CL-20/MTNP cocrystal.

综上分析, 本文得到以下规律: 1) 共晶 CL-20/MTNP 太赫兹振动分子间振动占比相比于 MTNP 有了显著提高, 这说明共晶分子间作用力得到了增强; 2) 相比 MTNP 分子, 共晶中 CL-20 分子提供了更强的分子间振动贡献(远超于物质的量比), 这说明 CL-20 分子对共晶稳定性贡献更高; 3) 相比于原分子, 共晶后 MTNP 三个硝基分子间振动贡献得到了提升, 这说明共晶后 MTNP 中

3 个硝基与 CL-20 分子产生了较强的瞬态偶极矩作用。CL-20/MTNP 共晶熔点为 215 °C, 相比于 MTNP (92 °C) 有了较大提升, 上述分析可为热稳定性提供一个微观解释: 新形成的分子间作用力(静电力、色散力)由 CL-20 分子主导, 并且 MTNP 通过上述作用力增强了与 CL-20 分子交互, 有利于热刺激下共晶内热传递, 进而提升热稳定性。

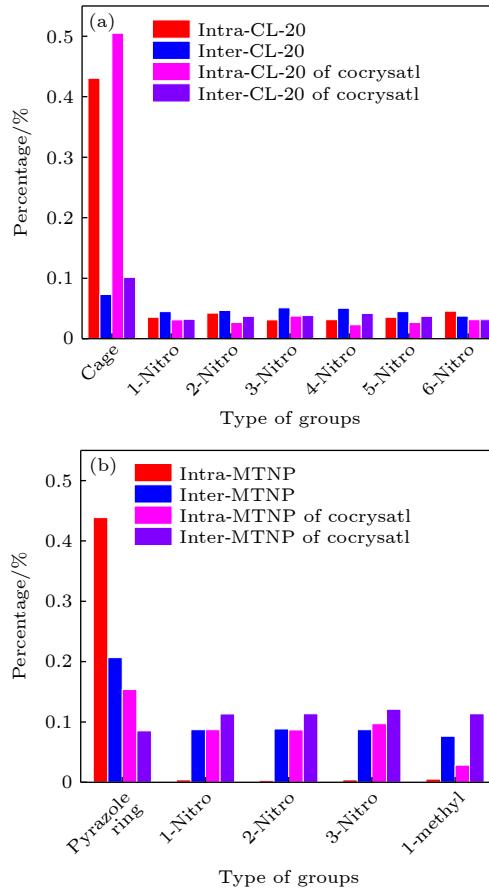


图 4 共晶前后分子内基团的振动变化 (a) CL-20 分子; (b) MTNP 分子

Fig. 4. Vibrational variations of functional groups after cocrystallization: (a) CL-20; (b) MTNP.

5 结 论

本文以 CL-20/MTNP 共晶为对象, 开展了太赫兹光谱与低频振动特性的研究。首先, 测量了 CL-20, MTNP 和 CL-20/MTNP 共晶常温下的太赫兹光谱, 3 种物质在 0.2—4 THz 范围分别存在 7, 7, 6 处明显吸收峰, 这些吸收峰位置和强度均不相同, 证实太赫兹光谱技术在共晶鉴别的独特优势。基于密度泛函理论, 计算得到了 3 种物质的太赫兹振动特性, 通过比对, 对实验吸收进行了振动

匹配。采用振动分解方法, 将上述分子整体振动分解为分子间和分子内振动, 并分析了共晶与原组分的振动变化规律。结果表明: CL-20 分子在共晶中的低频振动占据主导地位, 对共晶稳定性贡献更高。同时, MTNP 通过 3 个硝基与 CL-20 增强了分子间交互, 这促进 MTNP 与 CL-20 分子间的热传递, 进而增强共晶的热稳定性。本文研究结果可为 CL-20/MTNP 共晶热稳定认知提供微观解析, 同时可为其他共晶稳定性分析提供参考。

参考文献

- [1] Sun L J, Zhu W G, Zhang X T, Li L Q, Dong H L, Hu W P 2021 *J. Am. Chem. Soc.* **143** 19243
- [2] Charpentier M D, Devogelaer J J, Tijink A, Meekes H, Timmernmans P, Vlieg E, de Gelder R, Johnston K, Ter Horst J H 2022 *Cryst. Growth Des.* **22** 5511
- [3] Li X Y, Jin B, Luo L Q, Chu S J, Peng R F 2020 *Thermochim. Acta* **690** 178665
- [4] Garbacz P, Wesolowski M 2020 *Spectrochim. Acta Part A* **234** 118242
- [5] Zhang Y W, Ren G H, Su X Q, Meng T H, Zhao G Z 2022 *Chin. Phys. B* **31** 103302
- [6] Wang C, Wang B, Wei G S, Chen J N, Wang L 2022 *Chin. Phys. B* **31** 104201
- [7] Ruggiero M T 2020 *J. Infrared Millim. Te.* **41** 491
- [8] Luczynska K, Druzicki K, Runka T, Palka N, Wasicki J 2019 *J. Infrared Millim. Te.* **43** 845
- [9] Zheng Z P, Liu Y H, Zhao S Y, Jiang J W, Lu L 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 173201 (in Chinese) [郑转平, 刘榆杭, 赵帅宇, 蒋杰伟, 卢乐 2023 物理学报 **72** 173201]
- [10] Davis M P, Mohara M, Shimura K, Korter T M 2020 *J. Phys. Chem. A* **124** 9793
- [11] Wang P F, Zhao J T, Zhang Y M, Zhu Z J, Liu L Y, Zhao H W, Yang X C, Yang X N, Sun X H, He M X 2022 *Int. J. Pharm.* **620** 121759
- [12] Xiao Y Y, Huang H, Zhao X Y, Zou P A J, Wei L Y, Liu Y, Jin B, Peng R F, Huang S L 2023 *Cryst. Growth Des.* **23** 6393
- [13] Ma Q, Jiang T, Chi Y, Chen Y, Wang J, Huang J L, Nie F D 2017 *New J. Chem.* **41** 4165
- [14] Clark S J, Segallii M, Pickardii C J, Hasnipii P J, Probertiv M 2005 *Z. Kristallogr. Cryst. Mater.* **220** 567
- [15] Banks P, Burgess L, Ruggiero M 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 20038
- [16] Perdew J P, Ruzsinszky A, Csonka G I, Vydrov O A, Scuseria G E, Constantin L A, Zhou X L, Burke K 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 136406
- [17] Tkatchenko A, Scheffler M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 073005
- [18] King M D, Buchanan W D, Korter T M 2011 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 4250
- [19] Jepsen P U, Clark S J 2007 *Chem. Phys. Lett.* **442** 275
- [20] Liu Q C, Deng H, Li H Z, Wang M C, Zahng Q, Kang Y, Shang L P 2022 *Spectrochim. Acta A* **283** 121722

Research on vibrational features of CL-20/MTNP cocrystal by terahertz spectroscopy*

Liu Quan-Cheng¹⁾#† Yang Fu¹⁾# Zhang Qi²⁾

Duan Yong-Wei¹⁾ Deng Hu³⁾ Shang Li-Ping¹⁾

1) (*School of Information Engineering, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621000, China*)

2) (*Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621050, China*)

3) (*Tianfu Institute of Research and Innovation, Southwest University of Science and Technology, Chengdu 610299, China*)

(Received 9 July 2024; revised manuscript received 26 August 2024)

Abstract

Cocrystals represent an effective method to manipulate the physicochemical properties of materials at a molecular level. However, understanding the relationship between their complex crystal structures and macroscopic properties is a challenge. In this paper, by using terahertz (THz) spectroscopy to characterize non-covalent interactions within crystals, the THz vibrational spectra of the CL-20/MTNP cocrystal are studied. Firstly, the THz spectra of CL-20, MTNP, and the CL-20/MTNP cocrystal are measured at room temperature. Both absorption positions and intensities of the cocrystals differ from those of their original components, confirming the unique advantage of terahertz spectroscopy in cocrystal identification. Secondly, the THz vibrational features of the three materials are calculated based on density functional theory (DFT). Then, the experimental absorptions are matched with the calculated vibrations. Furthermore, a vibrational decomposition method is employed to decompose the molecular vibrations into intermolecular and intramolecular vibrations. The vibrational variations of the cocrystal compared with its original components are analyzed. The results reveal that in the cocrystal, the intermolecular vibrational modes of both CL-20 and MTNP molecules have changed compared with their raw materials. This indicates that the non-covalent interactions in the cocrystal have changed the original intermolecular interactions of these molecules. Consequently, this enhancement promotes the heat transfer between MTNP and CL-20 molecules, thereby improving the thermal stability of the cocrystal. These findings in this study demonstrate that the THz vibrational spectroscopy technology helps establish a relationship between the molecular structure of cocrystal and its macroscopic properties. This research contributes to deepening our understanding of cocrystal systems and opens up a new way for designing and optimizing materials.

Keywords: terahertz spectroscopy, density functional theory, vibrational decomposition, CL-20 cocrystal

PACS: 32.30.Bv, 33.20.Vq, 65.40.-b

DOI: [10.7498/aps.73.20240944](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240944)

CSTR: [32037.14.aps.73.20240944](https://cstr.aps.org/cstr/32037.14.aps.73.20240944)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 22305198) and the Doctoral Foundation of Southwest University of Science and Technology, China (Grant No. 21ZX7143).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: liuqc@swust.edu.cn



太赫兹光谱学研究CL-20/MTNP共晶振动特性

刘泉澄 杨富 张祺 段勇威 邓琥 尚丽平

Research on vibrational features of CL-20/MTNP cocrystal by terahertz spectroscopy

Liu Quan-Cheng Yang Fu Zhang Qi Duan Yong-Wei Deng Hu Shang Li-Ping

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 73, 193201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240944

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240944>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

太赫兹光谱在转基因菜籽油鉴别中的应用: 基于改进蜉蝣算法的支持向量机模型

Application of terahertz spectroscopy in identification of transgenic rapeseed oils: A support vector machine model based on modified mayfly optimization algorithm

物理学报. 2024, 73(5): 058701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231569>

准二维范德瓦耳斯本征铁磁半导体CrGeTe₃的THz光谱

Quasi-two-dimensional van der Waals ferromagnetic semiconductor CrGeTe₃ studied by THz spectroscopy

物理学报. 2022, 71(23): 237303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221586>

α -乳糖水溶液太赫兹吸收光谱实验研究及模拟分析

Experimental study and simulation analysis of terahertz absorption spectra of α-lactose aqueous solution

物理学报. 2021, 70(24): 243202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211716>

特丁基对苯二酚的光谱及密度泛函研究

Spectral analysis and density functional theory study of tert-butylhydroquinone

物理学报. 2021, 70(5): 053102 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201555>

胆红素分子激发态性质的密度泛函理论研究

Density functional theory studies on the excited-state properties of Bilirubin molecule

物理学报. 2020, 69(16): 163101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200518>

经式8-羟基喹啉铝的光谱与激发性质密度泛函

Density functional theory calculation of spectrum and excitation properties of mer-Alq₃

物理学报. 2020, 69(2): 023101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191453>