

环杂硝胺结构和性能的DFT比较研究

肖继军,张骥,杨栋,肖鹤鸣

南京理工大学化工学院,南京(210094)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用密度泛函理论(DFT) B3LYP方法,在6-31G^{**}基组水平下,全优化计算了环二甲撑二硝胺(DAX)、环三甲撑三硝胺(RDX)、环四甲撑四硝胺(HMX)和环五甲撑五硝胺(CRX)共4种环杂硝胺同系物的分子几何构型、电子结构、IR谱和热力学性质,揭示了它们结构和性质的异同。基于Kamlet公式计算了这4种化合物的爆速和爆压,求得与已有实验相符的递变规律。

关键词 [硝胺](#) [密度泛函理论](#) [分子结构](#) [热力学性质](#) [红外分光光度法](#) [热力学性质](#)

分类号 [TQ56](#)

DFT Comparative Studies on the Structures and Properties of Heterocyclic Nitramines

Xiao Jijun,Zhang Ji,Yang Dong,Xiao Heming

Institute of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology,Nanjing(210094)

Abstract

Key words [NITRAMINE](#) [DFT](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [THERMODYNAMIC PROPERTIES](#) [IR](#) [THERMODYNAMIC PROPERTIES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中包含“硝胺”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
 - [肖继军](#)
 - [张骥](#)
 - [杨栋](#)
 - [肖鹤鸣](#)