

研究论文

炸药敏化剂的分子结构、电子结构和生成热的理论研究

曾秀琳; 陈网桦; 刘家骢

南京理工大学化工学院, 南京 210094

摘要:

在HF/6-31G*和B3LYP/6-31G*基组水平上, 对硝酸乙酯(EN)、硝酸正丙酯(NPN)、硝酸异丙酯(IPN)、硝酸异辛酯(EHN)和四甘醇二硝酸酯(TEGDN)五种炸药敏化剂进行理论计算, 研究了标题物的分子结构、电子结构和能量等方面的性质. 基于Mulliken布居和键长分析, 五种硝酸酯分子的热分解始于O2—N3键的断裂, 且由Mulliken电荷分布推知分子热解产生NO₂气体. 在分析前线轨道能(EHOMO, ELUMO)和能量差(ΔE)的基础上对五种硝酸酯的相对热稳定性大小进行了评估. 由等键反应获得的EN、IPN、NPN、EHN和TEGDN的标准生成热分别是-155.972、-190.896、-175.279、-272.376和-790.733 kJ·mol⁻¹.

关键词: 炸药敏化剂 Mulliken布居 前线轨道能 生成热 等键反应

收稿日期 2006-06-21 修回日期 2006-09-14 网络版发布日期 2007-01-30

通讯作者: 曾秀琳 Email: zengxiulin1992@163.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(141KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 炸药敏化剂

▶ Mulliken布居

▶ 前线轨道能

▶ 生成热

▶ 等键反应

本文作者相关文章

▶ 曾秀琳

▶ 陈网桦

▶ 刘家骢