

3-硝基-4-叠氮基氧化呋咱的性能预估



分

导航/NAVIGATE

[本期目录/Table of Contents](#)

[下一篇/Next Article](#)

[上一篇/Previous Article](#)

工具/TOOLS

[引用本文的文章/References](#)

[下载 PDF/Download PDF\(550KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

统计/STATISTICS

[摘要浏览/Viewed](#)

[全文下载/Downloads](#) 299

[评论/Comments](#) 91



《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2012年第5期 页码: 9-12 栏目: 出版日期: 2012-10-30

Title: Characteristics Prediction of 3-Nitro-4-azidofuroxan

作者: [毕福强](#); [樊学忠](#); [李吉祯](#); [王伯周](#); [许诚](#); [刘愆](#); [李陶琦](#)
西安近代化学研究所

Author(s): -

关键词: [量子化学](#); [含能材料](#); [3-硝基-4-叠氮基氧化呋咱](#); [密度泛函理论](#); [性能预估](#); [NAFO](#)

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 采用密度泛函理论的B3LYP方法, 在6-31G(d)基组水平上得到了3-硝基-4-叠氮基呋咱(NAFO)的全优化构型, 并在相同基组水平上求得体系的振动频率, 用B3LYP/6-311+G(2d,p)方法求得NAFO的核磁数据。预估了该化合物的前线轨道能级差、密度、生成焓、爆速、爆压和撞击感度。结果表明, 该化合物的分子轨道能级差为422.45[KG⁻⁹]kJ/mol, 理论密度为1.86g/cm³, 固相生成焓为572.66kJ/mol, 爆速为9398 m/s, 爆压为40.71 GPa, 撞击感度 H_{50} 为2.8cm, 爆轰性能优于RDX和HMX, 但其感度较高。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]马海霞,宋纪蓉,胡荣祖,等. HMX, CL-20和DNTF自由基的光照检测[J].火炸药学报,2007,(2):33.
- [2]卢芳云,林玉亮,王晓燕,等. 含能材料的高应变率响应实验[J].火炸药学报,2006,(1):1.
- [3]黄辉,泽山,黄亨建,等. 新型含能材料的研究进展[J].火炸药学报,2005,(4):9.
- [4]刘子如,张腊莹. 含能材料燃烧过程中热分解化学的研究进展[J].火炸药学报,2005,(4):72.
- [5]孙小巧,范晓薇,居学海,等. 丁三醇三硝酸酯与高分子黏合剂的相互作用[J].火炸药学报,2007,(3):1.
- [6]解国玲,任芊,董守龙,等. 近红外光谱技术在含能材料成分分析中的建模研究[J].火炸药学报,2003,(4):78.
- [7]张小兵,袁亚雄,谢玉树,等. 离子体点火密闭爆发器实验研究[J].火炸药学报,2003,(2):24.