

制

5'-氧化偶氮双(4-硝基-1,2,3三唑-1-)氧化呋咱 性能预估



分享到:

《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2011年第1期 页码: 15-18 栏目: 出版日期: 2011-02-28

Title: Theoretical Study and Prediction of Properties for 5,5'-Azoxy-bis(4-nitro-1,2,3-triazol-1-yl)-furoxan

作者: 来蔚鹏; 廉鹏; 常海波; 尉涛; 吕剑; 薛永强
西安近代化学研究所

Author(s): -

关键词: 量子化学; 5,5'-氧化偶氮双(4-硝基-1,2,3-三唑-1-)氧化呋咱; 密度泛函理论; 性能预估

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 设计了一种新型富氮类高能量密度化合物5,5'-氧化偶氮双(4-硝基-1,2,3-三唑-1-)氧化呋咱,采用密度泛函理论的B3LYP方法,在6-31G**基组水平上得到该化合物全优化构型;在振动分析的基础上求得体系的振动频率、IR谱;通过键级分析得到热解引发键的键离解能(BDE);预估了该化合物密度、生成焓、爆速、爆压和爆热,并预测了撞击感度。结果表明,该化合物存在11个强吸收峰,校正后热解引发键的BDE为144.77kJ/mol,热分解活化能为204.93kJ/mol,稳定性较优;密度1.975g/cm³、生成焓963.837kJ/mol、爆速9015m/s(K-J)、9337m/s(VLW),爆压38.64GPa(K-J)、50.60GPa(VLW);撞击感度H₅₀为16.89cm,稍低于RDX(24cm)和HMX(26cm)。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]徐容,周小清,曾贵玉,等. [TEX的合成研究](#)[J].火炸药学报,2006,(2):26.
- [2]蔡春,吕春绪. [五氧化二氮硝解合成1,4,5,8-四硝基-1,4,5,8-四氮杂双环\[4.4.0\]癸烷](#)[J].火炸药学报,2005,(2):50.
- [3]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.
- [4]赵凤起,胡荣祖,陈沛,等. [2,5,7,9-四硝基-2,5,7,9-四氮杂双环\[4,3,0\]壬酮-8的放热分解反应动力学](#)[J].火炸药学报,2003,(4):33.

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\(994KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

统计/STATISTICS

[摘要浏览/Viewed](#)

[全文下载/Downloads](#) 576

[评论/Comments](#) 219



- [5]王大喜,胡国胜.甲基偶氮四唑热稳定性和热分解机理的量子化学研究[J].火炸药学报,2003,(1):74.
- [6]王大喜,肖鹤鸣.烷基硝酸酯气相水解和取代基效应的量子化学研究[J].火炸药学报,2002,(1):67.
- [7]侯素青,曹端林,张文艳,等.氮杂杯 [4] 芳烃主体与RDX客体分子间相互作用的密度泛函理论[J].火炸药学报,2008,(5):19.
- [8]来蔚鹏,廉 鹏,王伯周,等.硝基芳香族化合物密度、爆速和撞击感度的量子化学及QSPR研究[J].火炸药学报,2008,(5):28.
- [9]徐杨森,卢专,王明良,等.推进剂燃烧产物热力学性质的理论计算[J].火炸药学报,2008,(6):65.
- [10]李丹,任莹辉,赵凤起,等.咪唑苦味酸盐C₃N₂H+5C₆N₃O₇H-2的合成、晶体结构和量子化学[J].火炸药学报,2009,(6):48.
-

备注/Memo: -
