



| 兵工学报 >> 兵工学报中文刊 >> 1, 1' DM 5,5' AT 和 2, 2' DM 5, 5' AT 热分解机理的量子化学研究 作者: 胡国胜, 王大喜 评论

2005年第4期 总第26期(卷) 文章来源: 中北大学 高分子研究所, 山西 太原 030051 | North University of China, Taiyuan, Shanxi 030051, China

1, 1' DM 5,5' AT 和 2, 2' DM 5, 5' AT 热分解机理的量子化学研究

2005-9-12 15:59:12 中国兵工学会

摘要: 采用量子化学从头算方法全优化计算了1, 1' 二甲基 5, 5' 偶氮四唑 (1, 1' DM 5, 5' AT) 和 2, 2' 二甲基 5, 5' 偶氮四唑 (2, 2' DM 5, 5' AT) 热分解反应位能曲线, 探讨了它们的热分解机理。研究发现热分解按开环和脱氮两步完成, 推测的机理可由取代四唑的热分解实验和理论研究所支持。计算得到 1, 1' DM 5, 5' AT 两步反应的活化能分别为 243.5、64.01 kJ/mol; 2, 2' DM 5, 5' AT 两步反应的活化能分别为 152.3、44.67 kJ/mol。二者的热分解活化能都表明开环反应是速度控制步骤。前者的两步反应的活化能均大于后者的活化能。从动力学性质显示前者比后者有更好的稳定性。

关键词: 物理化学; 量子化学; 二甲基偶氮四唑; 热稳定性; 热分解机理; 位能曲线

中图分类号: O641.12+1

参考文献:

- [1] Hu Rongzu. Thermal behaviour of 1,1' dimethyl 5,5'-azotetrazole and 2,2' dimethyl 5,5' azotetrazole [C]. Shanxi Chemical Society, 1985:1-4.
- [2] Baenzinger N C, Shlutz R J. The crystal structure of dichlorobis(1 methyltetrazol)zinc(II) [J]. Inorg Chem, 1971,10:661-665.
- [3] Ansell G B. Crystal structure of 5 bromotetrazol [J]. J Chem Soc, Perkin II, 1973,15:2036-2041.
- [4] Wong M W, Leung Toung R, Wentrup C. Tautomeric Equilibrium and hydrogen shifts of tetrazole in the gas phase and in solution [J]. J Chem Soc, 1993,115:2465-2470.
- [5] Chen Zhaoxu, Xiao Heming, Song Wenyu. Theoretical investigation of nitro derivatives of tetrazole with density functional theory(DFT) [J]. J Mol Struct (Thechem), 1999,460:167-171.
- [6] Chen Zhaoxu, Fan Jianfen, Xiao Heming. Theoretical study on tetrazole and its derivatives (5) Ab initio study on nitro derivatives of tetrazoles [J]. Chinese J Struct Chem, 1999,18(1):61-66.
- [7] Chen Zhaoxu, Xiao Heming, Gao Baohua. Theoretical study on tetrazole and its derivatives (3) MP2 and thermodynamic calculations of amino derivatives of tetrazoles [J]. Chinese J Chem, 1999,17(2):114-120.
- [8] 熊斌, 洪三国. 甲酰亚胺叠氮反应的从头计算研究 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2001, 25 (1) :72-74.
- [9] 陈兆旭, 肖鹤鸣. 四唑及其衍生物的理论研究 (8) 硝基四唑衍生物的从头算研究 [J]. 化学学报, 1998, 56:1198-1206.
- [10] 肖鹤鸣, 陈兆旭, 贡雪东. 四唑及其衍生物的理论研究 (I) 氯代四唑的从头算研究 [J]. 科学通报, 1997, 42 (23) :2487-2492.
- [11] 陈兆旭, 肖鹤鸣. 密度泛函理论和从头算方法对四唑负离子的比较研究 [J]. 高等化学学报, 1999, 20 (5) :782-787.
- [12] 汪敬, 顾健德, 田安民. 5 硝基 1 氢 四唑衍生物热分解机理德从头分子动力学模拟及密度泛函理论研究 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2002, 39(2): 315-320.
- [13] Yoshiaki A, Yoshio O, Masamitsu T. A study on thermal decomposition of tetrazoles by MO calculation [C]. Proc Int Pyrotech Semin, 1996,22nd:13-18.
- [14] 肖鹤鸣, 陈兆旭. 四唑化学的现代理论 [M]. 北京: 科学出版社, 2000: 193-212.
- [15] Gao A, Oyumi Y, Brill T B. Thermal decomposition of energetic materials 49. thermolysis routes of mono diaminotetrazoles [J]. Combustion and Flame, 1991,83:345-351.
- [16] Shurukhin Yu V, Kluyev N A, Grandberg N N, et al. Thermal reaction of 1 aryl 5 methyl tetrazoles [J]. Khimiya Geterotsiklicheskikh Soedinenii, 1984,10:1422-1427.
- [17] Lesnikovich A I, Levchik S V, Balbanovich A I, et al. The thermal decomposition of tetrazoles [J]. Thermochemica Acta, 1992, 200: 427-441

Quantum Chemistry Studies of Thermal Decomposition Mechanism on 1,1' DM 5,5' AT and 2,2' DM 5,5' AT

HU Guo sheng, WANG Da xi

North University of China, Taiyuan, Shanxi 030051, China

Key Words: physicochemistry; quantum chemistry; dimethyl azotetrazole; thermal stability; thermal

- [上篇文章](#): 末制导炮弹膛内滞留受热模型及其数值仿真
- [下篇文章](#): 1, 1' DM 5, 5' AT和2, 2' DM 5, 5' AT结构及其热稳定性的量子化学研究

□- 本周热门文章

1.1, 1' DM 5, 5' AT和2, ...[]

□- 相关文章 [无](#)

[关于我们](#) | [联系我们](#) | [网站声明](#) | [经营业务](#) | [相关链接](#) | [使用帮助](#)



中国兵工学会 版权所有 2003-2004

Copyright All Reserved by China Ordnance Society. 2003-2004