

硝基甲烷与氨基及羟基化合物间的相互作用



分

《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2012年第4期 页码: 1-4 栏目: 出版日期: 2012-08-30

Title: Interaction between Nitromethane and Amino, Hydroxyl Compounds

作者: 林小雄; 王明良; 赵凤起; 刘宇洪; 田德余; 贵大勇; 刘剑洪
深圳大学化学与化工学院

Author(s): -

关键词: 量子化学; 相互作用能; 硝基甲烷; 密度泛函理论; 热重分析

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 利用密度泛函理论方法,在B3LYP/6-311++G**水平下研究了硝基甲烷与乙二胺、乙二醇、1,1-二氨基丙烷和1,1,3-丙三醇的相互作用。通过基组重叠误差和零点能校正,得到它们的相互作用能。结果表明,硝基甲烷与1,1,3-丙三醇的相互作用能为-19.90kJ/mol;含有多羟基的化合物可增加硝基化合物的热稳定性。通过热重分析方法检测添加1,1,3-丙三醇前后硝基甲烷的完全失重温度,发现添加微量1,1,3-丙三醇可明显提高硝基甲烷的完全失重温度和热稳定性。计算结果与实验数据吻合。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]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.
- [2]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.
- [3]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.
- [4]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.
- [5]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.
- [6]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.
- [7]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.
- [8]王国青,吴玉凯,侯庆伟,等.硫酸自由基与TNT反应的密度泛函理论[J].火炸药学报,2010,(2):10.
- [9]杜军良,舒远杰,周阳,等.用分子拓扑参数预估多硝基芳香族化合物的撞击感度[J].火炸药学报,2010,(6):5.
- [10]白林,胡银,胡荣祖,等.用密度泛函理论研究LAX-112与氟化氢分子间的相互作用[J].火炸药学报,2010,(6):19.

备注/Memo: -

更新日期/Last Update:

| | |
|---|-----|
| 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(1183KB) | |
| 立即打印本文/Print Now | |
| 导出 | |
| 统计/STATISTICS | |
| 摘要浏览/Viewed | |
| 全文下载/Downloads | 465 |
| 评论/Comments | 68 |

