

## 多硝基 [60] 富勒烯衍生物C-N键离解能的理论计算

《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2007年第6期 页码: 9-12 栏目: 出版日期: 2007-12-30

Title: -

作者: 谭碧生; 彭汝芳; 李鸿波; 金波; 楚士晋  
西南科技大学材料学院

Author(s): -

关键词: 物理化学; 多硝基 [60] 富勒烯; 键离解能; 平均键离解能; 硝基平均结合能

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: -

摘要: 用PBE密度泛函方法计算了14种多硝基 [60] 富勒烯的最弱 C-N键离解能、C-N键平均键离解能以及硝基的平均结合能。计算结果表明, 最弱C-N键的离解能为137.14~158.51kJ/mol, C-N键的平均键离解能为168.56~177.78kJ/mol, 硝基平均结合能为-40.47~-50.92kJ/mol。硝基数从2个增加到8个, 键离解能的改变不大, 但1,2连接模式优于1,4连接模式, 多硝基 [60] 富勒烯的C-N键离解能受其对称性的影响较小。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]何卫东,董朝阳.高分子钝感发射药的低温感机理[J].火炸药学报,2007,(1):9.
- [2]张昊,彭松,庞爱民,等.NEPE推进剂老化过程中结构与力学性能的关系[J].火炸药学报,2007,(1):13.
- [3]路向辉,曹继平,史爱娟,等.表面处理芳纶纤维在丁羟橡胶中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):21.
- [4]李春迎,王宏,孙美,等.遥感FTIR光谱技术在固体推进剂羽焰测试中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):28.
- [5]杜美娜,罗运军.RDX表面能及其分量的测定[J].火炸药学报,2007,(1):36.
- [6]王国栋,刘玉存.神经网络在炸药晶体密度预测中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):57.
- [7]周诚,黄新萍,周彦水,等.FOX-7的晶体结构和热分解特性[J].火炸药学报,2007,(1):60.
- [8]张秋越,孟子晖,肖小兵,等.用分子烙印聚合物吸附溶液中的TNT[J].火炸药学报,2007,(1):64.
- [9]崔建兰,张漪,曹端林.三羟甲基丙烷三硝酸酯的热分解性能[J].火炸药学报,2007,(1):71.
- [10]李进华,孙兆懿.四氧化二氮胶体饱和蒸气压的测试及分析[J].火炸药学报,2007,(1):74.

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\(159KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

统计/STATISTICS

[摘要浏览/Viewed](#)

[全文下载/Downloads](#) 768

[评论/Comments](#) 572

