

- 2003, Gaussian[CP]. Inc.: Pittsburgh, PA.
- [10] Flippen-Anderson J L, Kony M, Dagley I J, A high-density thermally stable explosive: octahydro-2,5-bis(nitroimino)imidazo[4,5-d]imidazole[J]. *Acta Crystallographica Section C*, 1994, 50(4), 974-976.
- [11] Kissinger H E, Reaction kinetics in differential thermal analysis[J]. *Analytical chemistry*, 1957, 29(11): 1702-1706.
- [12] Ozawa T. A new method of analyzing thermogravimetric data[J]. *Bulletin of the chemical society of Japan*, 1965, 38(11): 1881-1886.
- [13] Criado J M, Perez-Maqueda L A, Sanchez-Jimenez P E. Dependence of the preexponential factor on temperature[J]. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, 2005, 82(3): 671-675.
- [14] Hammerl A, Klapotke T M, Nöth H, et al, Synthesis, structure, molecular orbital and valence bond calculations for tetrazole azide, CHN<sub>7</sub>[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2003, 28(4): 165-173.
- [15] Kamlet M J, Jacobs S J, Chemistry of detonations. I. A simple method for calculating detonation performances of C—H—N—O explosives[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1968, 48(1): 23-35.
- [16] JIN Xing-hui, HU Bing-cheng, JIA Huan-qing, et al. DFT Theoretical Study on Energetic Nitrogen-Rich Derivatives of C<sub>4</sub>N<sub>6</sub>H<sub>8</sub>-n(NO<sub>2</sub>)<sub>n</sub>[J]. *Quim Nova*, 2014, 37(1): 74-80.
- [17] Zhang Q H, Zhang J H, Parrish D A, Shreeve J M, Energetic N-trinitroethyl-substituted mono-, di-, and triaminotetrazoles[J]. *Chemistry-A European Journal*, 2013, 19(33): 11000-11006.
- [18] Talawar M B, Sivabalan R, Mukundan T, et al. Environmentally compatible next generation green energetic materials (GEMs)[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2009, 161(2): 589-607.

### 3,7-二硝亚氨基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛烷的结构和性能

金兴辉, 胡炳成, 高思静, 王长英, 刘祖亮, 吕春绪

(南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094)

**摘要:** 用 TG-DTG-DSC 方法研究富氮含能化合物 3,7-二硝亚氨基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛烷的热性能,用量子化学方法研究其电子结构及爆轰性能。结果表明,3,7-二硝亚氨基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛烷热分解是一个二阶段过程,在 320 °C 左右有一个剧烈的放热峰。其热分解活化能和指前因子分别为 225.80 kJ·mol<sup>-1</sup> 和 10<sup>17.71</sup> s<sup>-1</sup>。考虑到其热爆炸临界温度为 600.25 K,活化熵为 80.18 J·mol<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>,活化焓为 220.92 kJ·mol<sup>-1</sup>,吉布斯自由能为 173.87 kJ·mol<sup>-1</sup>。利用 K-J 公式得到其爆速为 8.70 km·s<sup>-1</sup>,爆压为 34.34 GPa,表明 3,7-二硝亚氨基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛烷可用作潜在的高能、稳定的含能材料的候选物。

**关键词:** 3,7-二硝亚氨基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛烷;热性能;电子结构;爆轰性能

**中图分类号:** TJ55; O64

**文献标识码:** A

**DOI:** 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.08.008



### 《含能材料》固体推进剂专栏征稿

高能量、低特征信号、低易损、低成本、低污染、灵活能量管理和高可靠性成为当前固体推进剂面临的紧迫课题,为促进其研究,本刊将于 2015 年开设推进剂研究专栏,以专题报道固体推进剂研究的最新研究进展。欢迎广大学者投稿,来稿时请选择对应的专栏。

《含能材料》编辑部