

文章编号: 1006-9941(2017)05-0391-05

N-1,4,6-三硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺的合成与性能

张君君, 申程, 王鹏程, 陆明

(南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094)

摘要: 以六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺为原料,通过三个阶段硝化反应合成了一种新型多环氮杂环含能化合物: N-1,4,6-三硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺(TNINA),总收率55%。采用红外光谱(IR)、核磁共振(NMR)、质谱(MS)对目标产物以及中间体进行了表征,同时研究了时间、温度、乙酸酐与硝酸体积比等因素对第三阶段硝化反应的影响。利用热重分析(TG)和差示扫描量热仪(DSC)研究了TNINA的热性能,DSC结果显示其热分解温度为214.4℃,且放热过程瞬间完成。用Monte-Carlo方法估算TNINA的理论密度为 $1.91\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,真密度仪测得其密度为 $1.89\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。用Kamlet-Jacobs方程估算出其爆热为 $5513.26\text{ kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$,爆速为 $8.836\text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$,爆压为 35.80 GPa ,撞击感度 H_{50} 的计算值为 41 cm ,测试值为 53 cm 。理论计算结果与实验数据说明TNINA与RDX相比拥有更优异的爆轰性能与更低的感度。

关键词: N-1,4,6-三硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺(TNINA); 爆轰性能; 硝化反应

中图分类号: TJ55; O62

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2017.05.007

1 引言

多环氮杂环硝胺是一种典型的高能量密度化合物,与传统高能量密度化合物相比,其能量主要来源于环结构中高能N—N键、C—N键和更大的环张力。因其能量高、密度高、安全性能优良的特点,引起国内外广泛关注^[1-5]。多硝基的引入不仅增加了含能材料的能量和密度,还改善了其氧平衡^[6]。N-1,3,4,6-四硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺是一类新型的高能量密度化合物,近年来有不少其相关报道,赵国政^[7]理论计算了N-1,3,4,6-四硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺的综合性能,其密度为 $1.95\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,爆速为 $9.71\text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$,爆压为 43.84 GPa ,综合性能优于RDX和HMX^[8]。美国Dagley等^[9]以甲酰胺和乙二醛为起始原料,经缩合环化、两步硝化反应制得N-4,6-二硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺(DNINA)。该方法以纯硝酸为硝化剂,在氮气氛围下反应,反应条件较为严格,且未对DNINA进行热性能分析和爆轰性能与感度预测。

收稿日期: 2016-08-31; 修回日期: 2016-12-06

基金项目: 国家自然科学基金资助(51374131)

作者简介: 张君君(1987-),男,在读硕士,主要从事含能材料合成的研究。e-mail: 273321665@qq.com

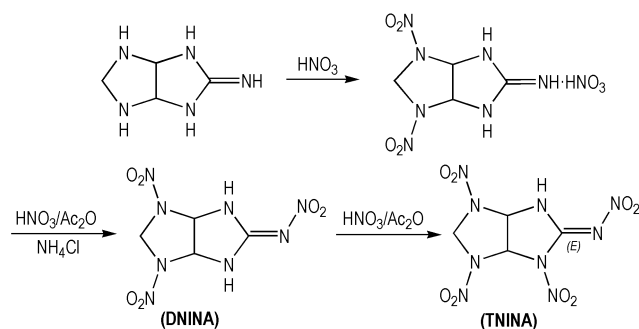
通信联系人: 陆明(1963-),男,教授,主要从事含能材料的设计与合成研究。e-mail: luming302@126.com

本研究参考文献[9]在较为温和的条件下合成了DNINA,并进一步硝化合成了TNINA,采用红外光谱(IR)、核磁共振(NMR)以及质谱(MS)对TNINA及其中间体的结构进行了表征。同时采用差示扫描量热法(DSC)和热重分析(TG)考察了TNINA的热性能。采用密度泛函理论,计算了TNINA和DNINA的密度和生成热,并在此基础上,用Kamlet-Jacobs方程计算了其爆轰性能。

2 实验部分

2.1 合成路线

以六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺为原料,依次经过发烟硝酸、发烟硝酸/乙酸酐/氯化铵和发烟硝酸/乙酸酐三个硝化体系合成了N-1,4,6-三硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚硝胺,其合成路线见Scheme 1。



Scheme 1 Synthetic route of N-(1,4,6-trinitrohexahydroimidazo[4,5-d]imidazol-2(1H)-ylidene) nitramide

2.2 试剂与仪器

试剂: 乙二醛 40%、甲酰胺、盐酸 35~37%、盐酸胍、甲醛溶液 37~40%、氢氧化锂、发烟硝酸 95%、氯化铵、乙酸酐、四氢呋喃和甲醇等试剂均来自成都市科龙化工试剂厂, 分析纯。六氢咪唑-[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺按文献[9]自制。

仪器: Avance III 500MH 核磁共振仪, 德国 Bruker 公司; Ultra AM TSQ quantum 型高分辨质谱仪, 美国 Finnigan 公司; Nicolet IS-10 型傅里叶变换红外光谱仪, 德国赛默飞世尔公司; SGWX-4 熔点仪; Pyris 1 热分析仪, 美国 PerkinElmer 公司。

2.3 实验过程

2.3.1 N-4,6-二硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺硝酸盐

-10 °C 以下, 将 4.33 g (17.0 mmol) 六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺分批加入 35 mL 发烟硝酸中, 加料时间为 15 min。0 °C 下反应 1 h 后将反应液倒入 200 mL 冰水中, 过滤, 冷水洗涤, 得 4.29 g 白色固体, 收率为 90% (dec. 182.3~182.4 °C); $^1\text{H NMR}$ (DMSO- d_6 , 500 MHz) δ : 5.61 (d, 1H, CH), 5.77 (d, 1H, CH), 6.40 (s, 2H, CH₂), 8.36 (s, 2H, NHHNO₃), 10.12 (s, 2H, NH); $^{13}\text{C NMR}$ (125 MHz) δ : 65.13, 75.11, 159.62; IR (KBr, ν/cm^{-1}) 3582, 3180, 1710, 1510, 1300, 1105, 756; MS (ESI), m/z : 218 [M+1]⁺; Anal. Calcd. for C₄H₈N₈O₇: C 17.15, H 2.88, N 40; Found C 17.11, H 2.87, N 40.12。

2.3.2 N-4,6-二硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺 (DNINA)

-10 °C 以下, 将 3 mL 发烟硝酸滴加入 10 mL 乙酸酐中, 保持体系温度不超过 -5 °C, 几分钟后依次缓慢加入 1.38 g (26.0 mmol) 氯化铵和 3.2 g (11.4 mmol) N-4,6-二硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺硝酸盐, 缓慢升温至 38 °C。约 30 min 后, 系统溢出大量气体, 生成白色沉淀, 加入 20 g 冰水, 过滤, 冷水洗涤, 干燥, 在四氢呋喃中重结晶得 2.54 g 白色固体, 收率为 85% (dec. 207 °C); $^1\text{H NMR}$ (DMSO- d_6 , 500 MHz) δ : 5.55 (d, 1H, CH), 5.90 (d, 1H, CH), 6.45 (s, 2H, CH₂), 9.97 (s, 2H, NH); $^{13}\text{C NMR}$ (125 MHz) δ : 64.86, 74.36, 161.96; IR (KBr, ν/cm^{-1}) 3404, 3289, 3006, 1614, 1550, 1534, 1478, 1278, 750; MS (ESI), m/z : 261 [M-1]⁻; Anal. Calcd. for C₄H₆N₈O₆: C 18.33, H 2.31, N 42.75; Found C 18.38, H 2.31, N 42.62。

2.3.3 N-1,4,6-三硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺 (TNINA)

室温下, 将 0.60 g (2.3 mmol) N-4,6-二硝基六氢咪唑[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺加入 15 mL 乙酸酐中, 升温至 100 °C, 保持 2 h 后降温至 0 °C, 缓慢滴加 5 mL 发烟硝酸, 升温至 50 °C 反应 4 h, 将反应液倒入 200 mL 冰水中, 有白色固体析出。过滤, 冷水洗涤得 0.51 g 白色固体, 收率为 72% (dec. 214.4 °C); $^1\text{H NMR}$ (DMSO- d_6 , 500 MHz) δ : 5.44 (d, 1H, CH), 6.40 (m, 2H, CH₂), 7.07 (d, 1H, CH), 10.85 (s, 1H, NH); $^{13}\text{C NMR}$ (125 MHz) δ : 64.79, 72.10, 74.57, 156.54; IR (KBr, ν/cm^{-1}) 3324, 3012, 1670, 1582, 1510, 1433, 1252, 748; Anal. Calcd. for C₄H₅N₉O₈: C 15.64, H 1.64, N 41.04; Found C 15.60, H 1.64, N 41.14。

3 结果与讨论

3.1 TNINA 的热分解性能

采用 TG 和 DSC 研究了 TNINA 的热分解过程 (样品 0.3 mg, 升温速度 10 °C · min⁻¹, 温度范围 50.0~400.0 °C, N₂ 流速为 30 mL · min⁻¹), 结果如图 1 所示, 由图 1 中 TG 曲线可知, TNINA 的分解分为两个阶段, 第一阶段为 209.7~225.6 °C, 失重 51.3%; 第二阶段为 225.6~400.0 °C, 失重 28.2%。相应的, 由 DSC 曲线可以看到, TNINA 的起始分解温度为 209.1 °C, 分解峰温为 214.4 °C, 且只有一个很窄的放热尖峰, 说明 TNINA 的放热过程瞬间完成。

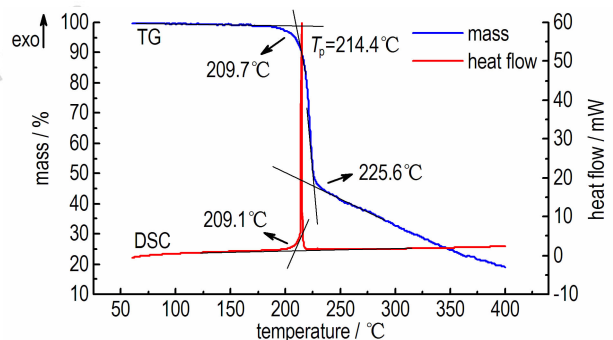


图 1 TNINA 的 TG 和 DSC 曲线

Fig. 1 TG and DSC curves of TNINA

3.2 TNINA 和 DNINA 的性能预估

3.2.1 密度与生成热

采用 Gaussian03 程序包^[11]对 TNINA 和 DNINA 的生成热进行研究, 采用密度泛函理论 (DFT)^[12]的 B3LYP 理论, 6-31++G (d, p) 基组, 对 TNINA 和

DNINA的结构进行优化,结果如图2所示。

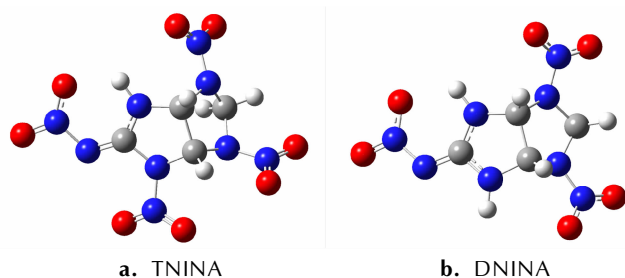


图2 TNINA和DNINA的结构优化图

Fig.2 The optimized structure of TNINA and DNINA

对于生成热的计算,采用设计等键反应法^[13]计算。等键方程设计如下:



计算出TNINA生成热为 $637.59 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, DNINA生成热为 $326.15 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

由于Kamlet-Jacobs方程受密度影响较大,因此本研究在使用Monte-Carlo统计方法^[10]计算密度的同时,参考Politzer的晶体密度校正公式^[14]提高计算精度,计算出TNINA、DNINA晶体理论密度分别为 $1.91, 1.83 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。使用3H-2000TD型全自动真密度仪,高纯氦气作为测试气体,测得TNINA、DNINA密度分别为 $1.89, 1.82 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,与理论计算值吻合较好。

3.2.2 爆轰性能

用Kamlet-Jacobs公式^[12]预测爆速(D)和爆压(p)

$$D = 1.01(N\bar{M}^{1/2}Q^{1/2})^{1/2}(1+1.3\rho) \quad (2)$$

$$p = 1.558\rho^2 N\bar{M}^{1/2}Q^{1/2} \quad (3)$$

式中, D 为爆速, $\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$; p 为爆压, GPa ; N 为每克化合物生成气体的摩尔数, $\text{mol} \cdot \text{g}^{-1}$; \bar{M} 为气体产物的平均摩尔质量, $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$; Q 为爆热, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$; ρ 为装药密度, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 计算得到TNINA的爆热为 $5513.26 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 爆速为 $8.836 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, 爆压为 35.8 GPa 。TNINA的爆热为 $5856.51 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 爆速为 $8.603 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, 爆压为 33.20 GPa 。

采用Miroslav等^[15]在2009年报道的一种使用表面静电势来描述分子对外界的敏感程度的方法,根据此方法计算出TNINA、DNINA的爆炸特性落高分别为 41 cm 和 55 cm ,其计算公式如式(4):

$$H_{50} = \alpha[V_{\text{eff}} - V(0.002)]^{1/3} + \beta\nu\sigma_{\text{tot}}^2 + \gamma \quad (4)$$

式中, V_{eff} 为分子的摩尔体积,可直接由摩尔质量与分子的晶体密度的比值获得^[15-16]; $V(0.002)$ 为密度在

0.002 bohr^3 空间下,计算出的分子的体积; $\nu\sigma_{\text{tot}}^2$ 静电势总偏差;系数 m, n 和 q 均为文献值^[15-16]。

依据GJB772A-1997《炸药测试方法》中撞击感度测试方法602.2,采用WL-1型撞击感度测试仪测定TNINA和DNINA的特性落高 H_{50} 分别为 53 cm 和 76 cm ,其测试药量为 30 mg ,落锤重为 5 kg 。

3.2.3 综合性能分析

将TNINA和DNINA的性能与RDX的性能进行比较,结果如表1。

表1 TNINA、DNINA与RDX的性能对比

Table 1 Comparison of the properties of TNINA, DNINA and RDX

compound	ρ (crystal) / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	Q / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	D / $\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$	p / GPa	H_{50} / cm
TNINA	1.91 (1.89)	5513.26	8.836	35.80	41 (53)
DNINA	1.83 (1.82)	5856.51	8.603	33.20	55 (76)
RDX ^[8]	1.816	-	8.661	32.71	38

Note: The data in the brackets are experimental values. Calculated valued of RDX from ref. 8

由表1可知,TNINA的密度、爆速、爆压和感度相对于RDX均有所提高,而DNINA在爆速与RDX相当的同时,密度、爆压和感度均优于RDX。由此说明,TNINA和DNINA是一种爆轰性能良好的不敏感炸药。

3.3 硝化反应影响因素

3.3.1 反应时间对TNINA收率的影响

在反应中,乙酸酐不仅是溶解DNINA的溶剂,也起酰化试剂的作用(质谱检测出乙酰化中间体),图3为反应时间对反应收率的影响曲线,在酰化过程中(酰化反应温度 $100 \text{ }^\circ\text{C}$,硝化反应温度 $50 \text{ }^\circ\text{C}$,硝化反应时间 3 h),酰化反应时间的增加有利于DNINA的溶解以及形成酰化中间体,反应 2 h 后收率基本不变,此时反应收率主要由第二步硝化反应收率决定。在硝化过程中(酰化反应温度 $100 \text{ }^\circ\text{C}$,酰化反应时间 2 h ,

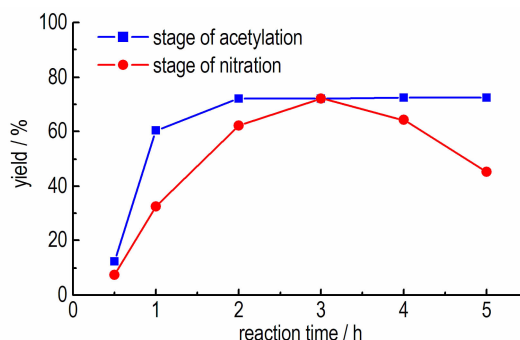


图3 反应时间对TNINA收率的影响

Fig.3 Influence of reaction time on the yield of TNINA

硝化反应温度 50 ℃), 硝化最佳时间为 3 h, 由于氮杂环硝化反应为可逆反应, 随着反应时间的增加, 副产物增多, 收率降低。

3.3.2 反应温度对 TNINA 收率的影响

如图 4 所示, 在酰化过程中(酰化反应时间 2 h, 硝化反应时间 3 h, 硝化反应温度 50 ℃), 酰化反应温度过低, 酰化活性太低, 且 DNINA 的溶解量较少, 不利于反应的进行。提高温度使酰化活性增加、DNINA 的溶解量增加, 但随着反应温度升高, 反应副产物增多, 因此最佳酰化温度为 100 ℃。在硝化过程中(酰化反应时间 2 h, 酰化温度 100 ℃, 硝化时间 3 h), 反应温度过低, 硝化剂的活性太低, 不利于硝化。此时提高温度会增强硝化体系的硝化强度, 但硝化反应温度过高时, 五元氮杂环张力较大, 易破裂, 副产物增多, 收率下降, 因此最佳硝化反应温度为 50 ℃。

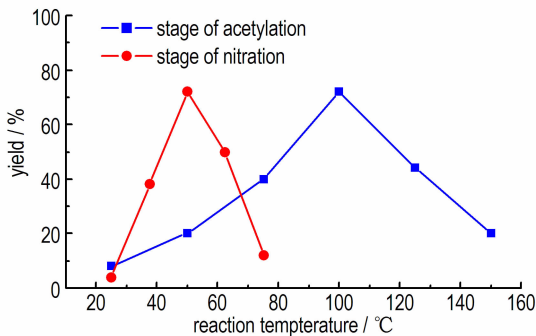


图 4 反应温度对 TNINA 收率的影响

Fig. 4 Influence of reaction temperature on the yield of TNINA

3.3.3 醋酸酐与硝酸体积比对 TNINA 收率的影响

15 mL 醋酸酐在 100 ℃下恰好溶解反应物, 故固定乙酸酐的用量, 控制酰化温度 100 ℃、酰化时间 2 h、硝化温度 50 ℃、硝化时间 3 h, 改变硝酸的用量考察醋酸酐与硝酸体积比对硝化反应的影响, 结果见表 2。如表 2 可知, 当醋酐与硝酸体积比 $V(\text{Ac}_2\text{O}) : V(\text{HNO}_3) = 3 : 1$ 时, 硝化收率较高, 为 72.0%。硝酸量较少时, 硝化能力不足; 硝酸量较多时, 副产物较多。

表 2 醋酸酐与硝酸体积比对 TNINA 收率的影响

Table 2 Influence of volume ratio of acetic anhydride to nitric acid on the yield of TNINA

$V(\text{Ac}_2\text{O}) : V(\text{HNO}_3)$	yield / %
5 : 1	12.2
4 : 1	48.4
3 : 1	72.0
2 : 1	58.4
1 : 1	23.2

4 结 论

(1) 以六氢咪唑-[4,5-d]咪唑-2(1H)-亚胺为原料, 经过三个阶段硝化反应合成了 TNINA, 总收率 55%, TNINA 分解温度为 214.4 ℃。用红外光谱、核磁共振、质谱对其以及中间产物进行了表征。

(2) TNINA 的热分解过程在 400 ℃内完成, 214.4 ℃附近存在一个尖锐的放热峰, 证明其放热过程瞬间完成。

(3) 在 B3LYP/6-31++G(d,p) 基组水平下优化 TNINA、DNINA 的结构, 用 Monte-Carlo 方法预估该 TNINA、DNINA 的理论密度分别为 1.91, 1.83 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 真密度仪测得其密度分别为 1.89, 1.82 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$; 用 Kamlet-Jacobs 公式计算 TNINA、DNINA 的爆热分别为 5513.26, 5856.51 $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 爆速分别为 8.836, 8.603 $\text{km} \cdot \text{s}^{-1}$, 爆压分别为 35.8, 33.2 GPa; H_{50} 计算值分别为 41, 55 cm, H_{50} 实测值分别为 53, 76 cm。TNINA 与 DNINA 的综合爆轰性能与感度均优于 RDX, 有望代替 RDX 用于装填各种军用弹药、雷管和导爆索等。

参考文献:

- [1] 陆明. 杂多环硝胺炸药的骨架结构与稳定性[J]. 含能材料, 2016, 24(8): 724-727.
LU Ming. Framework Structure and Stabilization for Aza-polycyclic Nitroamine Explosives[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(8): 724-727.
- [2] Yu Q, Wang Z X, Wu B, Yang H W, et al. A study of N-trinitroethyl-substituted aminofurazans: high detonation performance energetic compounds with good oxygen balance[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2015, 3(15): 8156-8164.
- [3] Liu H, Du H C, Wang G X, et al. Molecular design of new nitramine explosives[J]. *Journal of Molecular Modeling*, 2011, 17(3): 2569-2574.
- [4] Tan B S, Long X P, Li J S, et al. The cage strain energies of high-energy compounds[J]. *Computational & Theoretical Chemistry*, 2012, 993(8): 66-72.
- [5] Yin P, He C L, Shreeve J M. Fully C/N-polynitro-functionalized 2,2'-biimidazole derivatives as nitrogen- and oxygen-rich energetic salts[J]. *Chemistry-a European Journal*, 2016, 22(6): 2108-2113.
- [6] Thotempudi V, Shreeve J M. Synthesis of Trinitromethyl-and Dinitromethyl-Substituted Azoles Using Nitrate Salts in Sulfuric Acid[J]. *Synthesis*, 2012, 43(31): 1253-1257.
- [7] Zhao G Z, Lu M. Comparative theoretical studies of high energetic cyclic nitramines[J]. *J Phys Org Chem*, 2014, 27 10-17.
- [8] 黄辉, 王泽山, 黄亨建, 等. 新型含能材料的研究进展[J]. 炸药学报, 2005, 28(4): 9-13.
HUANG Hui, WANG Ze-shan, HUANG Heng-jian, et al. Researches and progresses of novel energetic materials[J]. *Chinese*

- Journal of Explosive & Propellants*, 2005, 28(4): 9-13.
- [9] Ian J, Dagley, Judith L, et al. Synthesis of cyclic nitramines from products of the cyclocondensation reaction of guanidine with 2, 3, 5, 6-tetrahydropiperazine-1, 4-dicarbaldehyde [J]. *Austrian Journal of Chemistry*, 1994, 47(11): 2033-2045.
- [10] Kamlet M J, Jacobs S T. Chemistry of detonation. I. A simple method for calculating detonation properties of C, H, N, O explosives [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1968, 48(1): 23-25.
- [11] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 03, Revision E.02. Gaussian Inc [C] // Wallingford CT, 2003.
- [12] Lee Chengteh, Yang Wei-tao, Parr Robert G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density [J]. *Physical Review B Condensed Matter*, 1988, 37(2): 785-789.
- [13] Zhang J Y, Du H C, Wang F, et al. DFT studies on a high energy density cage compound 4-trinitroethyl-2,6,8, 10,12-pentanitrohezaazaisowurtzitane [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2011, 115(24): 6617-6621.
- [14] Politzer P, Martinez J, Murray J S, et al. An electrostatic interaction correction for improved crystal density prediction [J]. *Molecular Physics*, 2009, 107(19): 2095-2101.
- [15] Miroslav Pospíšil, Pavel Vávra, Concha M C, et al. A possible crystal volume factor in the impact sensitivities of some energetic compounds [J]. *Journal of Molecular Modeling*, 2010, 16(5): 895-901.
- [16] Shen C, Wang P C, Lu M. Molecular design and property prediction for a series of novel dicyclic cyclotrimethylene trinitramines (RDX) derivatized as high energy density materials [J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2015, 119(29): 8250-8255.

Synthesis and Property Prediction of *N*-(1,4,6-trinitrohexahydroimidazo[4,5-d]imidazole-2(1H)-ylidene)nitramide

ZHANG Jun-jun, SHEN Cheng, WANG Peng-cheng, LU Ming

(School of Chemical Engineering, Nanjing University Nanjing University of Science & Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: *N*-(1,4,6-trinitrohexahydroimidazo[4,5-d]imidazol-2(1H)-ylidene)nitramide (TNINA), a energetic nitrogenous polyheterocyclic compound, was synthesized with a total yield of 47% by three stages of nitration reaction using hexahydroimidazo[4,5-d]imidazol-2(1H)-imine as raw material. The factors affecting the third nitration reactions such as reaction time, reaction temperature and volume ratio of acetic anhydride to nitric acid were investigated as well. The title compound and its intermediates were characterized by IR, NMR and MS. Its thermal stability was analyzed by DSC and TG and the temperature of decomposition was 214.4 °C, and exothermic process was finished instantly. The theoretical density of TNINA after optimizing predicted by Monte-Carlo method is 1.91 g · cm⁻³, and experimental value is 1.89 g · cm⁻³. The heat of detonation, detonation velocity and detonation pressure predicted by Kamlet-Jacobs formula are 5513.26 kJ · kg⁻¹, 8.836 km · s⁻¹, 35.80 GPa, and the theoretical and experimental impact sensitivity (H_{50}) is 41 cm and 53 cm. All the results show that TNINA have better detonation performance and more insensitive than RDX.

Key words: *N*-(1,4,6-trinitrohexahydroimidazo[4,5-d]imidazol-2(1H)-ylidene)nitramide (TNINA); detonation performance; nitration reaction

CLC number: TJ55; O62

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2017.05.007