

3-氨基-4-酰胺肟基咪唑的晶体结构

王 军, 董海山, 黄奕刚, 李金山

(中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900)

摘要: 从水和乙醇的混合溶剂中培养出了 3-氨基-4-酰胺肟基咪唑(AAOF)的单晶,用四圆单晶 X-射线衍射仪、IR 和元素分析对其结构进行了表征。结果表明, AAOF 晶体属单斜晶系,空间群 $P21/C$ 。晶体学参数为: $M_r = 143.12$, $a = 0.7651(3) \text{ nm}$, $b = 1.1702(3) \text{ nm}$, $c = 1.9216(10) \text{ nm}$, $\beta = 96.47(4)^\circ$, $V = 1.7095(12) \text{ nm}^3$, $Z = 4$, $D_c = 1.668 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $F(000) = 888$ 。AAOF 分子平面性好,晶体中存在分子内和分子间氢键。

关键词: 物理化学; 含能化合物; 3-氨基-4-酰胺肟基咪唑(AAOF); 晶体结构

中图分类号: TJ55

文献标识码: A

(上接 440 页)

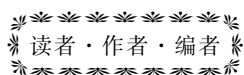
Synthesis Improvement of 5-Amino-3-nitro-1,2,4-triazole (ANTA)

WANG Xi-jie, JIA Si-yuan, WANG Bo-zhou, LIAN Peng, ZHOU Cheng

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: 5-Amino 3-nitro-1,2,4-triazole (ANTA) as well as its intermediate was synthesized from 3,5-diamino-1,2,4-triazole after diazotization, neutralization and reduction. Its structure was characterized by IR, MS, ^1H NMR and elemental analysis. In addition, the effects of reaction temperature on yield and purity were investigated. The synthetic procedures of ANTA were optimized with the overall yield to be 64%, and purity to be 98%.

Key words: organic chemistry; synthesis; purity; triazole



2006 年火炸药新技术研讨会召开

由西安近代化学研究所火炸药燃烧国防重点实验室、中国兵工学会火炸药专业委员会、总装部火炸药技术专业组联合主办的 2006 年火炸药新技术研讨会于 2006 年 10 月 26 日至 28 日在深圳召开。本次会议共收录了 158 篇论文,来自全国从事含能材料研究、生产和使用及其相关领域的大学、研究所、工厂和公司的科技人员 100 余人参加了会议交流,主题覆盖了含能材料的各个领域。其中, HEDM、IHE、含能粘结剂、高氮化合物、高品质 RDX、温压炸药以及新材料新技术等的研究和应用引起了参会者的广泛关注。

从会议论文集和交流报告来看, CL-20、DNTF、FOX-7、ADN 等在推进剂中的应用研究已成为当今的研究热点之一, DNTF、FOX-7 在炸药中的应用研究也已有有益的探索; PBAMO、BAMO-AMMO、BAMO-THF、GAP 等含能粘结剂的合成及应用在火炸药中具有乐观的前景; 高品质 RDX 的制备和降感取得显著效果; 纳米含能复合材料、毁伤增强型材料及破片、含能离子液体等新材料的探索研究悄然进行并取得一定进展; PBAMO 的一步合成、微反应器中芳烃硝化反应、分子烙印技术处理火炸药废水、原位聚合包覆 HMX、甲苯氟两相硝化一步合成 TNT、TNT 选择性氧化等新方法、新技术, 以及一些分析检测新技术如光谱法测定燃烧火焰温度等正在拓展含能材料研究新领域并推动学科发展。此外, 炸药安全和爆轰性能研究的独特方法, 也为含能材料的表征和评估注入了新的活力。

(中国工程物理研究院化工材料研究所 黄亨建供稿)