

Predicting on the Detonation Performances of Poly-furazans with Oxy Bridges

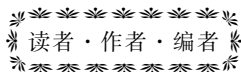
GE Zhong-xue¹, LAI Wei-peng¹, LIAN Peng¹, WANG Bo-zhou¹, XUE Yong-qiang²

(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China;

2. Department of Applied Chemistry of Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Poly-furazans on a chain ($C_{2n}N_{2n+2}O_{2n+3}$) ($n = 2 - 7$) and on a circle ($C_{2n}N_{2n}O_{2n}$) ($n = 2 - 4, 6$) were optimized at B3LYP/6-31G theory level. The steady geometric configurations were obtained. The densities were calculated theoretically by Monte-Carlo method, and the enthalpies of formation were obtained by designing reactions having equal bonds and equal electronic pairs. The detonation velocities, detonation pressures and detonation heats were predicted by the formula of Kamlet. The relationships between detonation performance and n of two systems were studied, respectively. The results show that: (1) Detonation velocities, detonation pressures and detonation heats of two systems decrease with increasing of n ; (2) The stabilities of poly furazans with oxy bridges on a circle are better than that on a chain when n is equal. Therefore, 4, 4'-dinitrobifurazan ether ($n = 2$, chain) and 1,4-dioxino[2,3;5,6]oxadiazole ($n = 2$, circle) are the target compounds for synthesis due to their good detonation performances.

Key words: quantum chemistry; poly-furazans on a chain; poly-furazans on a circle; detonation property; B3LYP/6-31G method



会议信息(二)

中国化学会第 26 届学术年会

会议主题:化学与和谐社会

会议内容:1. 绿色化学; 2. 环境化学; 3. 化学生物学; 4. 纳米化学; 5. 应用化学; 6. 有机化学; 7. 功能高分子科学前沿; 8. 无机与配位化学; 9. 分析化学; 10. 新能源与能源化学; 11. 不对称催化; 12. 光化学; 13. 胶体与界面化学; 14. 理论化学方法和应用; 15. 化学信息学与化学计量学; 16. 有机固体材料; 17. 超分子组装与软物质材料; 18. 现代核化学与放射化学; 19. 晶体工程; 20. 化学教育; 21. "化学与社会"论坛; 22. 附设"新技术、新产品与新仪器成果展"。

承办单位:南开大学 时间:7月13日-16日 地点:天津市

联系人:唐惠(北京市中关村北一街2号中国化学会,100080)

电话:010-62625584 传真:010-62568157 电子信箱:ccs_office@iccas.ac.cn

第 14 届全国化学热力学和热分析学术会议

会议主题:会议将集中展现我国近两年在化学热力学和热分析领域的主要研究成果

会议内容:1. 溶液化学; 2. 化学、化工热力学与热力学教育; 3. POPs 热化学及其应用; 4. 热分析及其应用; 5. 材料热力学; 6. 生物热力学; 7. 表面和胶体热力学; 8. 相平衡和分离技术; 9. 统计热力学和计算机模拟; 10. 仪器和方法; 11. 其他。

承办单位:中国科学院大连化学物理研究所 时间:5月21日-25日 地点:辽宁省大连市

联系人:孙立贤(大连市中山路457号中科院大连化学物理研究所,116023)

电话:0411-84379213 传真:0411-84379215 电子信箱:ctta14@dicp.ac.cn

第十届全国量子化学会议

会议主题:量子化学、理论动力学和统计力学的新方法和应用

会议内容:1. 近年来理论化学基础理论和计算方法的新进展; 2. 理论与计算化学在化学、材料和生命科学中的应用。

承办单位:南京大学化学化工学院 时间:5月30日-6月2日 地点:江苏省南京市

联系人:黎书华(南京大学化学化工学院,210093)

电话:025-83686465 传真:025-83686553 电子信箱:shuhua@nju.edu.cn