

文章编号:1006-9941(2008)06-0766-01

一种表征芳香族炸药撞击感度的简单方法

杜军良^{1,2}, 舒远杰^{2,1}, 周 阳², 殷 明², 龙新平³, 朱祖良³

(1. 西南科技大学材料科学与工程学院, 四川 绵阳 621010;

2. 中国工程物理研究院化工材料研究所, 四川 绵阳 621900; 3. 中国工程物理研究院, 四川 绵阳 621900)

运用 Gaussian98 程序,在密度泛函理论(DFT) B3LYP/6-311+(d,p)水平下,对十一种芳香族含能材料(见表1)进行了几何全优化。在此基础上,首次运用核独立化学位移(NICS)的概念,采用标准的

GIAO程序在 B3LYP/6-311+G(d,p)水平计算了这十一种化合物中心的 NICS 值,记作 NICS(0),结果表明撞击感度 H_{50} 的对数和 NICS(0)与零点校正能 E 的乘积 $NICS(0) \times E$ 的对数有很好的线性关系。

表1 十一种芳香化合物的撞击感度 H_{50} , 零点校正值 E 、NICS(0)

Table 1 Impact sensitivities (H_{50}), corrected zero point vibrational energy E , NICS(0) of nitroaromatic compounds

| title compound | NICS(0) | E /Hartree | $NICS(0) \times E$ | H_{50} /cm | $\ln[NICS(0) \times E]$ | $\ln(H_{50})$ |
|--------------------------------------|---------|--------------|--------------------|-------------------|-------------------------|---------------|
| 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene | -5.93 | -1011.96 | 6000.92 | 490 ¹⁾ | 8.70 | 6.19 |
| 1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzene | -6.98 | -956.62 | 6677.21 | 320 ¹⁾ | 8.81 | 5.77 |
| 2,4-dinitroresorcinol | -8.78 | -791.82 | 6950.99 | 296 ²⁾ | 8.85 | 5.69 |
| 1-amino-2,4,6-trinitrobenzene | -8.75 | -901.25 | 7885.94 | 177 ¹⁾ | 8.97 | 5.18 |
| 2,4,6-trinitro-3-aminophenol | -8.87 | -976.50 | 8663.90 | 138 ²⁾ | 9.07 | 4.93 |
| 1,3,5-trinitrobenzene | -11.17 | -845.88 | 9448.48 | 100 ¹⁾ | 9.15 | 4.61 |
| picric acid | -10.82 | -921.12 | 9964.77 | 87 ¹⁾ | 9.21 | 4.47 |
| 2,4,6-trinitroresorcinol | -10.24 | -996.36 | 10206.71 | 43 ²⁾ | 9.23 | 3.76 |
| 1,3,4,5-tetranitroaniline | -11.01 | -1105.77 | 12174.53 | 41 ¹⁾ | 9.41 | 3.71 |
| 1,2,3,5-tetranitrobenzene | -13.07 | -1050.40 | 13728.73 | 27 ¹⁾ | 9.53 | 3.30 |
| 2,3,4,6-tetranitrotoluene | -13.05 | -1089.66 | 14218.76 | 19 ²⁾ | 9.56 | 2.94 |

Note: 1) Rice B M et al. *Journal of Molecular Structure(Theochem)*, 2002, 583: 69-72.

2) XIAO He-ming. *The Molecular Orbital Theory of Nitro Compounds*. Beijing: National Defense Industry Press, 1993.

芳香族化合物存在离域 π 电子,在垂直于环分子平面的外磁场 H^0 的作用下,离域 π 电子会产生环电流,NICS 值的本质是环电流的反映,通常是在环中心或在环上 0.1 nm 处计算 NICS 值。

它在一定程度上反映芳香族化合物的稳定性,而零点校正能是物质稳定性的另一种描述符。将它们组合,就是为了表征芳香族化合物的稳定性,进而与感度关联。

图1为表1中 $\ln(NICS(0) \times E)$ 与 $\ln(H_{50})$ 的关系图。从图1中可以看出 NICS(0) 与 E 乘积的对数和 H_{50} 的对数之间有很好的线性关系,线性相关度为 0.986。它们的关系如式(1):

$$\ln H_{50} = 38.01 - 3.66 \ln [(NICS(0) \times E)] \quad (1)$$

由此可见,芳香性指标 NICS(0) 与零点校正能 E 组

合与撞击感度之间有很好的线性统计关系,是表征芳香族炸药感度的一个简单描述符。

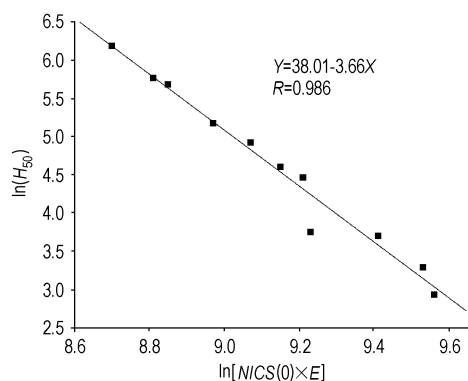


图1 十一种芳香化合物的 NICS(0) 与 E 乘积的对数和 H_{50} 的对数变化图

Fig. 1 Curve of $\ln(H_{50})$ vs $\ln[NICS(0) \times E]$ of nitroaromatic compounds

收稿日期:2008-06-19;修回日期:2008-07-24

基金项目:国家自然科学基金-中物院 NSAF 联合基金重点项目资助课题(No. 10576030)和中俄国际合作基金资助课题(No. 10610194)

作者简介:杜军良(1979-),男,在读硕士研究生。

联系人:舒远杰,研究员,从事含能材料制备与性能的实验和理论研究。

关键词:密度泛函理论;炸药;撞击感度

中图分类号:TJ55;O64