

## Progress in the Tautomerism and Decomposition of Amino-tetrazoles

FENG Li-na<sup>1</sup>, ZHANG Jian-guo<sup>1</sup>, ZHANG Tong-lai<sup>1</sup>, SHU Yuan-jie<sup>2</sup>, YANG Li<sup>1</sup>, ZHENG Hui-hui<sup>1</sup>  
 (1. State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;  
 2. Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

**Abstract:** The tautomerization and decomposition channels of amino-tetrazoles, mainly 5-amino-tetrazole and 1,5-diamino-tetrazole, were reviewed. The up-to-date study shows that 1-substitute-amino-tetrazoles, 2-substitute-amino-tetrazole and 1-substitute-imino-tetrazoles are the most common isomers of amino-tetrazoles. There are basically two mechanisms for the decomposition of amino-tetrazoles. In the first mechanism the two bonds of the tetrazole ring break off, resulting in RN<sub>3</sub> and NH<sub>2</sub>CN. The second decomposition channel comprises two steps. Firstly the N—N bond is cleaved, leading to RN<sub>3</sub>. Then the produced RN<sub>3</sub> loses one molecule N<sub>2</sub>. In this paper, the tautomerization mechanisms of amino-tetrazoles represented by 5-amino-tetrazole and 1,5-diamino-tetrazole were investigated by using high level quantum chemistry calculations, the results show that the active energy of the first decomposition path way is lower than that of other paths, so it is the most probable reaction path.

**Key words:** physical chemistry; high-nitrogen energetic materials; amino-tetrazole; tautomerism; decomposition mechanism

\* \* \* \* \*  
 \* 读者·作者·编者 \*  
 \* \* \* \* \*

### 中国化学会第四届全国化学推进剂学术交流会征稿通知

中国化学会第四届全国化学推进剂学术交流会拟于2009年9月在河南省洛阳市召开,此次会议由中国化学会主办,黎明化工研究院承办,中国人民解放军第二炮兵工程学院暨全国化学推进剂信息站协办。

**会议主题:** 高能钝感推进剂及其新材料的研制进展

**征文范围:** 1. 化学推进剂的发展前景与研究方向。推进剂发展前景及高能量密度材料合成制备。

2. 推进剂配方及工艺应用技术。特别是呋咱、高氮材料、ADN、HNF 等高能含硼富燃料推进剂、高能量密度物质(HEDM,如GAP、CL-20)推进剂、无毒或低毒绿色化学推进剂、凝胶推进剂推进剂、高密度碳氢燃料、吸热型碳氢燃料、氟胺类推进剂等内容。
3. 推进剂及其新材料的分析测试。
4. 推进剂安全评价和安全防护。
5. 推进剂毒理及病理研究。
6. 推进剂研发、生产、应用、销毁过程污染控制与三废处理。

**征文要求:** 1. 论文观点明确,数据真实,文字精练、流畅,图表清晰,未在国内外公开刊物和全国性学术会议上发表过。

2. 文责自负,论文应不涉密。
3. 投稿请注明作者姓名、出生年、学位、职称(务)、单位、详细通讯地址、联系电话、传真和电子信箱。
4. 文稿采用A4纸,首页内容顺序为:文题、作者姓名、作者单位、通讯地址、中文摘要(请作者按科技论文对摘要的要求进行书写,研究论文摘要应包括研究目的,方法,结果及结论等内容,字数不少于200字)、关键词、正文及参考文献。研究论文(含图表)一般不超过6000字,综述文章一般不超过8000字。
5. 参考文献不能省略,且标注规范。
6. 投稿请寄文稿一式两份并传E-mail邮件(以附件形式),另附保密单位审查意见。来稿不退还,请作者自留底稿。
7. 征文截止时间为2009年5月31日。
8. 论文请寄至河南省洛阳市西工区王城大道69号黎明化工研究院 程磊收(邮编471000),信封上注明“第四届化学推进剂会议征文”字样。

**联系人:** 程磊      **联系电话:** 0379-62301577 62302842      **传真:** 0379-62307056      **E-mail:** chenglei69@yahoo.com.cn

中国化学会第四届全国化学推进剂学术交流会筹备组

中国化学会      黎明化工研究院

2009-2-6