

文章编号: 1006-9941(2011)06-0641-05

三叠氮化铝分子结构及爆炸性能理论研究

周雪松, 罗琼, 焦清介, 蒲洋

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 采用 B3LYP/6-311G* 方法对三叠氮化铝进行结构优化; 理论计算了其密度、升华焓、生成焓, 将其作为单质炸药, 计算了其爆炸参数, 并与 TNT 作比较; 再将其加入硝酸铵与梯恩梯的混合炸药中, 按零氧平衡原则预测混合炸药各爆炸参数, 并与含有相同质量分数 Al 的混合炸药作比较。结果表明: 三叠氮化铝的爆热、爆容、爆温、爆速、爆压、作功能力分别为 $5170.20 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 $585.62 \text{ L} \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 5028.12 K 、 $9095.23 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 31.02 GPa 、 $1105.14 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 除爆容小于 TNT 及作功能力与 TNT 相当外, 其余性能都优于 TNT, 因此是一种潜在的单质炸药; 铝含量为 6% 时, 三叠氮化铝、硝酸铵和梯恩梯混合炸药以上各参数分别为 $4351.49 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 $892.22 \text{ L} \cdot \text{kg}^{-1}$ 、 3142.50 K 、 $8344.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 、 27.55 GPa 、 $1417.11 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$; 三叠氮化铝能提高硝酸铵与梯恩梯混合炸药的爆热、爆温、爆速、爆压和作功能力, 是一种潜在的高能可燃剂。

关键词: 物理化学; 三叠氮化铝; 密度泛函理论; 分子结构; 爆炸参数; 高能可燃剂

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.06.010

1 引言

叠氮化合物化学结构简单^[1], 有较高的生成热 (每个叠氮基能提供 $314 \sim 397 \text{ kJ}$ 热量)。目前有机叠氮化合物主要用作含能粘结剂和含能增塑剂, 既有利于提高推进剂的能量和燃速, 又可以降低推进剂的火焰温度和烟雾信号, 而且无污染, 因而是一类非常有前途的含能材料^[2]。此外, 叠氮化合物还具有某些特殊的性能, 比如作为起爆药 (叠氮化铅) 和研究快速反应的模型体系。研究这些叠氮化合物的结构、性能, 可以为寻找新型高密度材料 (HEDM) 奠定基础^[3]。研究表明, 第 13 族金属有机叠氮化合物不仅是重要的含能材料, 而且由它们还可制得性能优异的纳米级 GaN 和 AlN 材料, 可用作有机合成试剂^[4]。

近些年, $\text{B}(\text{N}_3)_3$ 受到人们的广泛关注^[5-7]。实验上的研究主要集中在改进其合成方法和探索其分解过程, 结果表明 $\text{B}(\text{N}_3)_3$ 不稳定易于分解; 理论上对其结构、频率等的研究也很多, 结果显示它是潜在的高能密度材料^[8]。目前, 对 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的研究还很有限。早

在 1954 年, 就合成出了 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$, 它是无色、易潮解、对振动敏感的固体^[9]。由于其高爆炸性和对振动的敏感性, 其研究和应用受到很大限制。1997 年, C. J. Linnen^[10] 等在室温下由 $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$ 和过量的 HN_3 反应, 合成出了 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 并得到了其红外光谱, 与在 MP2/6-31G(d) 水平上计算的结果吻合得很好。研究显示 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 常温下可稳定存在^[10]。2005 年, 李前树等^[11] 用密度泛函理论, 对其结构和成键特性进行了系统研究。然而, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的爆炸性能还没有相关的报道。因此, 本研究拟用 B3LYP/6-311G* 方法对三叠氮化铝的结构、密度、升华焓、生成焓进行预测; 计算其作为单质炸药的爆炸性能; 以及将其加入硝酸铵与梯恩梯的混合炸药, 预测其爆炸性能。

2 计算方法和原理

2.1 结构优化和频率计算

文献^[11] 已经在 6-311 + G* 水平上对三叠氮化铝进行了计算, 由于本文计算的三叠氮化铝分子簇用 6-311 + G* 基组计算相对耗费机时多, 且经小分子簇的计算比较知用 6-311G* 基组和 6-311 + G* 基组所得结果基本一致, 因此为了节省机时, 本文采用 B3LYP 方法和 6-311G* 基组对三叠氮化铝分子构型进行优化, 并在此基础上进行频率计算。所有计算采用 Gaussian03 程序。

收稿日期: 2010-11-02; 修回日期: 2011-01-07

作者简介: 周雪松 (1984-), 女, 硕士, 研究方向为应用量子化学。

e-mail: xuesong070317@163.com

通讯联系人: 罗琼 (1979-), 女, 副教授, 主要从事应用量子化学研究。

e-mail: kelly.luo@126.com

2.2 爆炸参数的计算原理和方法

本文采用爆热计算公式^[12]为:

$$Q_V = Q_p + \Delta nRT \quad (1)$$

式中, Q_V 为定容爆热, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$; Δn 为每千克炸药爆炸反应气体增量, $\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$; R 为摩尔气体常数, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; T 为爆炸后温度, K ; Q_p 为定压爆热, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, $Q_p = -(\sum n_i \Delta H_i - \Delta H_f)$, n_i 为每千克炸药中第 i 种产物的质量, $\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$; ΔH_i 为第 i 种产物的生成焓, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$; ΔH_f 为炸药的生成焓, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。爆容计算公式^[12]为:

$$V_0 = \frac{22.4n}{m} \quad (2)$$

式中, V_0 为爆容, $\text{L} \cdot \text{kg}^{-1}$; n 为产物中气态组分的总摩尔数, mol ; m 为炸药质量, kg 。用平均热容法计算爆温的公式^[12]为:

$$T = \frac{-\alpha_0 + \sqrt{\alpha_0^2 + 4\alpha_1 Q_V}}{2\alpha_1} \quad (3)$$

式中, T 为爆温, K ; α_0 、 α_1 为 $\bar{c}_v = \alpha_0 + \alpha_1 T + \alpha_2 T^2 + \alpha_3 T^3 + \dots$ 的系数。爆速、爆压使用由兰道-斯达组科维奇给出的状态方程式简化后得到的经验公式^[13]:

$$D = \sqrt{2(\gamma^2 - 1) Q_V} \quad (4)$$

$$\rho = \frac{1}{\gamma + 1} \rho_0 D^2 \quad (5)$$

式中, D 为爆速, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; γ 为爆轰产物的绝热指数, 大多数炸药 $\gamma = 3$; ρ_j 为爆压, kPa ; ρ_0 为炸药的初始密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。作功能力计算公式^[14]为:

$$W = 3.65 \times 10^{-4} Q_V V_0 \quad (6)$$

式中, W 为做功能力, $\text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

2.3 密度、升华焓、生成焓的计算原理和方法

爆炸参数的计算需要炸药的密度和生成焓数据。理论密度用摩尔体积法计算:

$$\rho = M/V_m \quad (7)$$

式中, ρ 为炸药密度, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$; M 为化合物摩尔质量, $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$; V_m 为化合物摩尔体积, $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

固体炸药的生成焓计算要用到升华焓。在不知道 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 晶体结构的情况下, 本文采用分子簇模型 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_n$ 来预测它的升华焓。先在 HF/STO-3G 水平计算 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_n$ ($n=1 \sim 8$) 的单分子平均能量, 画出其与 $n=1$ 时单分子平均能量的差值随 n 变化的趋势图, 由曲线开始趋于平坦处, 可初步推断模型原子簇的聚合度; 再在 B3LYP/6-311G* 水平上计算模型原子簇的单分子平均能量及标准摩尔升华焓值, 由此数

据推算 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 晶体的标准摩尔升华焓。

标准摩尔生成焓^[15]可根据盖斯定律设计循环反应过程(如图 1 所示)求出。

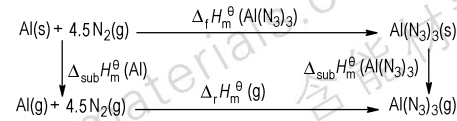


图 1 设计反应过程

Fig. 1 Designed reaction process

焓变公式:

$$\Delta_f H_m^\theta(\text{Al}(\text{N}_3)_3) = \Delta_f H_m^\theta(\text{g}) + \Delta_{\text{sub}} H_m^\theta(\text{Al}) - \Delta_{\text{sub}} H_m^\theta(\text{Al}(\text{N}_3)_3) \quad (8)$$

式中, $\Delta_f H_m^\theta(\text{Al}(\text{N}_3)_3)$ 、 $\Delta_f H_m^\theta(\text{g})$ 分别为在 B3LYP/6-311G* 水平上计算的 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的固相和气相反应焓, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\Delta_{\text{sub}} H_m^\theta(\text{Al})$ 为 Al 的标准摩尔升华焓^[16], 为 $304.71 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; $\Delta_{\text{sub}} H_m^\theta(\text{Al}(\text{N}_3)_3)$ 为 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的标准摩尔升华焓, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

3 结果与讨论

3.1 结构优化和频率计算

图 2 所示为在 B3LYP/6-311G* 和 B3LYP/6-311+G* 水平上优化出的 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的分子构型和相应的结构参数。由图 2 可知, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 分子是平面结构, 有 C_{3h} 对称性。两个不同理论水平上计算的键长很接近, 说明用 6-311G* 基组计算结果的可靠性。

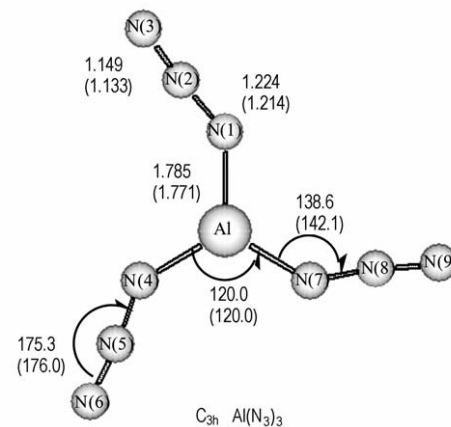


图 2 B3LYP/6-311G* 水平和 B3LYP/6-311+G* 水平上三叠氮铝的分子构型比较(键长(Å), 角度(°), 括号中的数字为在 B3LYP/6-311+G* 水平上优化的结果)

Fig. 2 Comparison of molecular structure of aluminum triazide at the B3LYP/6-311G* level and the B3LYP/6-311+G* level(bond lengths(Å), angles(°), results at the B3LYP/6-311+G* level in brackets)

3.2 密度、升华焓、生成焓

在 B3LYP/6-311G* 水平上计算的 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 分子摩尔体积为 $193.398 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$, 代入公式(7)得到 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的密度为 $1.583 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 与 TNT 的理论密度 $1.654 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ [14] 很接近。

根据在 HF/STO-3G 水平上计算的 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_n$ ($n=1 \sim 8$) 的单分子平均能量, 画出其与 $n=1$ 时单分子平均能量的差值随 n 变化的趋势曲线, 如图 3 所示。

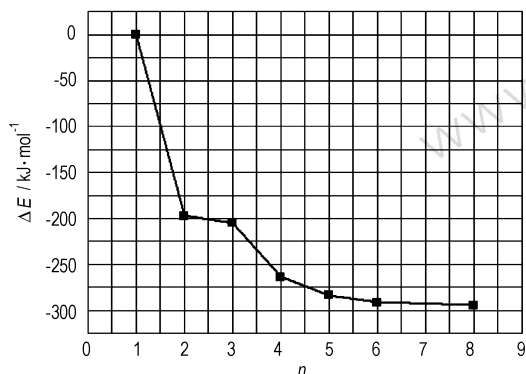


图 3 在 HF/STO-3G 水平上 $E([\text{Al}(\text{N}_3)_3]_n)/n - E(\text{Al}(\text{N}_3)_3)$ 能量差随 n 变化趋势图

Fig. 3 The value of $E([\text{Al}(\text{N}_3)_3]_n)/n - E(\text{Al}(\text{N}_3)_3)$ vs the change of n at the HF/STO-3G level

根据趋势曲线可以得到两个结论: (1) 聚合度为 2 和 3 时有一个小台阶, 从一定程度上反映出 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_2$ 存在一个特殊稳定点, 可用此聚合物作模型研究液相或溶液中三叠氮化铝的性质。(2) n 从 3 到 5 过程中, 平均能量是递减的, 递减速率快。在 $n > 5$ 时, 随聚合度的增加, 近似认为平均能量不发生改变, 可用 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_5$ 作模型研究固体三叠氮化铝的性质。本文选择 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_5$ 作模型分子簇。

在 B3LYP/6-311G* 水平上计算模型分子簇 $[\text{Al}(\text{N}_3)_3]_5$ 的单分子平均能量在 $n=1$ 和 5 时分别为 -735.2924897 和 -735.3382769 Hartree, 由此计算得到 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的升华焓为 $120.10 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。将此值代入公式(8), 得到固体三叠氮化铝的标准摩尔生成焓为 $461.13 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

3.3 作为单质炸药的爆炸参数

由爆炸反应方程式 $\text{NH}_4\text{NO}_3 + 4\text{Al} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + 2\text{H}_2 + 2\text{AlN}$ [17], 可知爆炸时 Al 和 N 可生成 AlN, 且反应放热。因此, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的爆轰产物有 Al 和 AlN, 后者放热量大, 依据最大放热原理[14], 确定爆炸反应方程式为: $\text{Al}(\text{N}_3)_3 \rightarrow \text{AlN} + \text{N}_2$ 。分别按公式(1)~(6)计

算爆炸性能特征参数, 装药密度按 $1.50 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 计算, 并与装药密度相等的 TNT[14] 作比较, 见表 1。

比较可知, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 的爆容小于 TNT; 爆热、爆温、爆速和爆压都优于 TNT, 尤其爆温性能显著好于 TNT; 作功能力比 TNT 的计算值要小 $17 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 与 TNT 的实验值比则高出 43 kJ/kg , 可认为 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 与 TNT 的作功能力相当。综上所述, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 是一种潜在的单质炸药。

表 1 $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 与 TNT 爆炸性能特征参数的比较

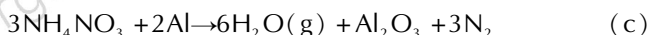
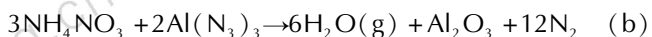
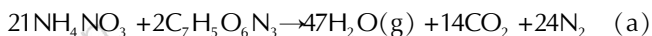
Table 1 Explosion parameters of aluminum triazide and TNT

substance	$\text{Al}(\text{N}_3)_3$	TNT	
		calculated value ¹⁾	experimental value ^[14]
detonation heat / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	5170.20	4154.37	4225.80
specific volume of explosion / $\text{L} \cdot \text{kg}^{-1}$	585.62	740.09	750.00
detonation temperature / K	5028.12	3190.42	3010.00
detonation velocity / $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	9095.23	8152.25	6500.00
detonation pressure / GPa	31.02	26.04	17.29
working capacity / $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	1105.14	1122.12	1062.00

Note: 1) The calculated value obtained from formula (1)-(6).

3.4 作为高能可燃剂加入硝酸铵 (AN) 与梯恩梯 (TNT) 混合炸药的爆炸参数

将 AN + TNT + $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 混合炸药记为炸药 A; 将 AN + TNT + Al 混合炸药记为炸药 B。按照零氧平衡原则设计出炸药 A 反应方程式为 (a) 和 (b) 的组合, 炸药 B 为 (a) 和 (c) 的组合。



经计算, Al 元素含量最多可达 9.9%, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 含量最多可达 56.0%。需要指出的是, Al 元素含量相同时炸药 A 的 TNT 和 AN 含量比炸药 B 要小的多。设计两种混合炸药 Al 元素含量为从 0% ~ 9%, 每增加 1% 计算一组数据。分别按公式(1)~(6)计算各爆炸性能特征参数, 发现不同铝含量下, 炸药 A、B 各爆炸参数的变化趋势不变, 在此仅给出 Al 含量为 6% 的结果, 并与 Al 含量为 0 的混合炸药作比较, 见表 2。

结果表明: $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 和 Al 都提高了混合炸药的爆热、爆温、作功能力, $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 使爆温提高得更多; $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 和 Al 都降低了爆容; $\text{Al}(\text{N}_3)_3$ 能提高爆速和爆压, 而 Al 与之相反。

表 2 AN + TNT、炸药 A 和炸药 B 的爆炸性能特征参数比较

Table 2 Parameters of TNT/AN, composite explosive A and B

composite explosive	AN + TNT (Al = 0)	AN + TNT + Al(N ₃) ₃ (Al = 6%)	AN + TNT + Al (Al = 6%)
detonation heat/kj · kg ⁻¹	4351.49	5051.28	5210.10
specific volume of explosion/L · kg ⁻¹	892.22	801.25	825.00
detonation temperature/K	3142.50	3700.83	3490.47
detonation velocity/m · s ⁻¹	8344.09	8990.02	7321.27
detonation pressure/GPa	27.55	31.98	21.21
working capacity/kj · kg ⁻¹	1417.11	1477.28	1568.89

4 结 论

在 B3LYP/6-311G* 水平上计算得到的 Al(N₃)₃ 分子是平面结构, 有 C_{3h} 对称性, 与前人得到的结果一致。

计算得到 Al(N₃)₃ 的理论密度为 1.583 g · cm⁻³, 与 TNT 的理论密度 1.654 g · cm⁻³ 很接近。

用分子簇模型模拟 Al(N₃)₃ 固体, 选择聚合度为 5 的分子簇可作为模型分子簇。计算得到 Al(N₃)₃ 的升华焓为 120.10 kJ · mol⁻¹, 进而计算其标准摩尔生成焓为 461.13 kJ · mol⁻¹。Al(N₃)₃ 有高的正生成焓, 在高能量密度材料领域有很好的应用前景。

三叠氮化铝作为单质炸药, 按爆炸反应方程式 Al(N₃)₃ → AlN + 4N₂ 计算了其爆热、爆容、爆温、爆速、爆压和作功能力。与 TNT 比较发现: Al(N₃)₃ 的爆容小于 TNT; 爆热、爆温、爆速和爆压都优于 TNT, 尤其爆温性能显著好于 TNT; 作功能力相当。因此, Al(N₃)₃ 是一种潜在的单质炸药。

分别将 Al(N₃)₃ 和 Al 作为可燃剂加入硝酸铵 (AN) 与梯恩梯 (TNT) 混合炸药, 发现两者均能提高混合炸药的爆热、爆温和作功能力。Al(N₃)₃ 使爆温提高的更多; Al(N₃)₃ 和 Al 都降低了爆容; Al(N₃)₃ 能提高爆速和爆压, 而 Al 与之相反。Al(N₃)₃ 是一种具有一定应用前景的高能可燃剂。

参考文献:

[1] 肖鹤鸣, 李永富. 金属叠氮化物的能带和电子结构-感度和导电性[J]. 中国科学 B 辑, 1995, 25(1): 23-28.
XIAO He-ming, LI Yong-fu. Energetic band and structure of metal azides-sensitivity and electrical conductivity[J]. *Science in China (Series B)*, 1995, 25(1): 23-28.

[2] 吕月仙, 李永祥. 叠氮化反应及其在炸药合成中的应用[J]. 华北工学院学报, 1998, 19(1): 40-44.
LV Yue-xian, LI Yong-xiang. Azidoreaction and its application in explosives synthesis[J]. *Journal of North China Institute of Technology*, 1998, 19(1): 40-44.

[3] 刘晓芳, 徐文国, 卢士香. 叠氮化合物 C₆H_{6-n}(N₃)_n (n=1~6) 的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009, 30(7): 1406-1409.
LIU Xiao-fang, XU Wen-guo, LU Shi-xiang. DFT study of diazoimido compounds C₆H_{6-n}(N₃)_n (n=1~6)[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2009, 30(7): 1406-1409.

[4] 夏其英, 肖鹤鸣, 居学海, 等. 第ⅢA族金属叠氮多聚体结构和性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2005, 26(5): 922-926.
XIA Qi-ying, XIAO He-ming, JU Xue-hai, et al. Theoretical Study on the Structures and Properties of Group III A Metallic Azide Clusters[J]. *Chemical Journal of Chinese Universities*, 2005, 26(5): 922-926.

[5] LIU Feng-yi, ZNEG Xiao-qing, ZHANG Jian-ping, et al. A simple method to generate B(N₃)₃[J]. *Chemical Physics Letters*, 2006, 419: 213-216.

[6] Ismail A Al-Jihad, LIU Bing, Christopher J Linnen, et al. Generation of NNBN via Photolysis of B(N₃)₃ in Low-Temperature Argon Matrices; IR Spectra and ab Initio Calculations[J]. *J Phys Chem A*, 1998, 102(31): 6220-6226.

[7] Mulinax R L, Okin G S, Coombe R D. Gas phase synthesis, structure, and dissociation of boron triazide[J]. *J Phys Chem*, 1995, 99(17): 6294-6300.

[8] LIU Feng-yi, MENG Ling-peng, SUN Zheng, et al. Insights into the Mechanism of BN Generation via Boron Triazide Precursor: Theoretical Study[J]. *J Phys Chem A*, 2006, 110(36): 10591-10600.

[9] Jens Müller. Azides of the heavier Group 13 elements[J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2002, 235: 105-119.

[10] Linnen C J, Macks D E, Coombe R D. Synthesis of Al(N₃)₃ and the deposition of AlN thin films[J]. *J Phys Chem B*, 1997, 101(9): 1602-1608.

[11] LI Qian-shu, DUAN Hong-xia. Density functional theoretical study of a series of binary azides M(N₃)_n (n=3,4)[J]. *J Phys Chem*, 2005, 109(40): 9089-9094.

[12] 陆明. 炸药的分子与配方设计[M]. 北京: 兵器工业出版社, 2004: 26-54.
LU Ming. Design of molecule and formula of explosive[M]. Beijing: Ordnance Industry Press, 2004: 26-54.

[13] 张国伟, 韩勇, 苟瑞君. 爆炸作用原理[M]. 北京: 国防工业出版社, 2006: 141-157.
ZHANG Guo-wei, HAN Yong, GOU Rui-jun. Explosion principle[M]. Beijing: National Defense Industry, 2006: 141-157.

[14] 惠君明, 陈天云. 炸药爆炸理论[M]. 南京: 江苏科技出版社, 1995: 20-280.
HUI Jun-ming, CHEN Tian-yun. Explosive Theory[M]. Nanjing: Jiangsu Science and Technology Press, 1995: 20-280.

[15] 黄整, 陈波, 刘福生. TATB 生成焓的量子力学计算[J]. 原子与分子物理学报, 2004, 21(3): 499-504.
HUANG Zheng, CHEN Bo, LIU Fu-sheng. Quantum-mechanical calculation of enthalpy of formation of TATB[J]. *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2004, 21(3): 499-504.

[16] 胡英. 物理化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1999: 38-39.
HU Ying. Physical Chemistry[M]. Beijing: Higher Education Press, 1999: 38-39.

[17] 孙业斌, 惠君明, 曹欣茂. 军用混合炸药[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1995: 432-433.
SUN Ye-bin, HUI Jun-ming, CAO Xin-mao. Military Explosive Mixture[M]. Beijing: Ordnance Industry Press. 1995: 432-433.

Theoretical Study on Structure and Explosion Performance for Aluminum Triazide

ZHOU Xue-song, LUO Qiong, JIAO Qing-jie, PU Yang

(Beijing Institute of Technology, Beijing 10081, China)

Abstract: The geometrical structure of aluminum triazide was optimized at the B3LYP/6-311G* level of theory. Its density, heat of sublimation and heat of formation of aluminum triazide were estimated theoretically, and explosion parameters was calculated and compared with TNT. According to the principle of zero oxygen balance, when it added into the composite explosive of AN and TNT, those parameters were predicted and compared with those of composite explosive containing the same quality of Al. The detonation heat, specific volume of explosion, detonation temperature, detonation velocity, detonation pressure and working capacity of aluminum triazide is $5170.20 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, $585.62 \text{ L} \cdot \text{kg}^{-1}$, 5028.12 K , $9095.23 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 31.02 GPa , $1105.14 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ respectively, indicating that its properties are better than those of TNT except detonation velocity and working capacity. Therefore it is a potential explosive compound. When the quality percentage of Al is 6%, the above parameters of the composite explosive of AN, TNT and aluminum triazide were $4351.49 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, $892.22 \text{ L} \cdot \text{kg}^{-1}$, 3142.50 K , $8344.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 27.55 GPa , $1417.11 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ respectively. Aluminum triazide is a potential high-energy ignition agent, since it can improve the detonation heat, detonation temperature, detonation velocity, detonation pressure and working capacity of the composite explosive.

Key words: physical chemistry; aluminum triazide; density functional theory (DFT); molecule structure; explosive parameters; high-energy ignition agent

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2011.06.010