

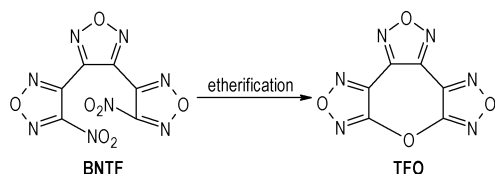
文章编号: 1006-9941(2012)02-0258-02

三唑并氧杂环庚三烯(TFO)合成研究

王锡杰, 王伯周, 贾思媛, 周彦水, 毕福强, 宁艳利

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

三唑并氧杂环庚三烯(TFO)因其具有熔点低、能量高、塑性强的优点, 目前已成为含能材料研究领域的热点之一^[1-5]。本文自行设计了三唑并氧杂环庚三烯(TFO)分子结构和合成方法, 以3,4-双(3'-硝基三唑-4'-基)三唑(BNTF)为原料, 在无水乙腈中进行分子内硝基醚化反应, 首次合成了三唑并氧杂环庚三烯(TFO) (Scheme 1), 收率为55.2%, 纯度99.3% (HPLC), 并采用FT-IR、¹³CNMR、MS以及元素分析进行了结构表征。TFO熔点为76.5~77.0℃, 理论密度1.935 g·cm⁻³, 计算爆速8646 m·s⁻¹, 撞击感度24% (10 kg落锤, 25 cm), 摩擦感度4% (90°摆角), H₅₀为72.4 cm。TFO综合性能优异, 有望用于熔铸炸药中的液相载体组份, 也可作为固体推进剂中的含能增塑剂与氧化剂。



Scheme 1 The designed synthetic routes of TFO

(1) 合成方法

室温条件下, 向50 mL的反应瓶中加入25 mL无水乙腈后, 再分别加入10.0 g (33.7 mmol) 3,4-双(3'-硝基三唑-4'-基)三唑(BNTF)和4.8 g (45.1 mmol) 无水碳酸钠, 反应约5 min后, 升温至回流反应6 h, 冷却, 倒入80 mL水中, 用60 mL二氯甲烷萃取三次, 分离收集有机相, 无水硫酸镁干燥6 h, 过滤、蒸干得白色固体4.2 g, 收率55.2%, 纯度99.3% (HPLC), m. p.: 76.5~77.0℃。IR (KBr, cm⁻¹), ν : 1569,

收稿日期: 2011-08-25; 修回日期: 2011-12-22

基金项目: 国防科研基础计划项目 (No. B0920110005)

作者简介: 王锡杰(1975-), 女, 工程师, 从事新型含能材料合成研究。

通讯联系人: 王伯周(1967-), 男, 研究员, 从事新型含能材料合成研究。e-mail: wbz600@163.com

1481, 1003, 985 (三唑环); 1165, 1087 (醚键); ¹³CNMR (DMSO-d₆, 500 HMz), δ : 160.79, 144.01, 137.28; MS (EI) m/z (%), 220 (M⁺, 45), 190 (23), 30 (100); Elemental anal (%), calcd for C₆N₆O₄: C 32.73, N 38.18; found C 32.55, N 37.99。

(2) TFO物化与爆轰性能

表1 TFO的物化与爆轰性能

Table 1 Properties of TFO

properties	results	test condition
appearance	white solid	eyeballing
theoretical density/g·cm ⁻³	1.935	VLW
melting point /°C	76.5~77.0	melting point apparatus
dissolubility	soluble in acetic acid and acetone	
detonation velocity/m·s ⁻¹	8646 ($\rho=1.935$ g·cm ⁻³)	VLW
detonation velocity/m·s ⁻¹	7756 ($\rho=1.760$ g·cm ⁻³)	GJB 702.1-1997
explosion heat /J·g ⁻¹	6162	VLW
detonation pressure/GPa	38	VLW
impact sensitivity/%	24	10 kg, 25 cm
friction sensitivity/%	4	3.92 MPa, 90 deg
H ₅₀	72.4 cm	5 kg

从表1可以看出, TFO理论密度1.935 g·cm⁻³、理论爆速8646 m·s⁻¹、感度较低, 特别是熔点较低(76.5~77.0℃), 可作为熔铸炸药的液相载体, 结果表明TFO综合性能优异。

参考文献:

- [1] Sheremetev A B, Mantseva E V. HYDROXYFUZZANS: Outlook to using [C] // Proc 32th International ICT-Conference. 2001: 103-1.
- [2] 王锡杰, 廉鹏, 葛忠学, 等. 3,3'-二硝基双三唑醚(FOF-1)合成、晶体结构及理论研究[J]. 化学学报, 2010, 68(6): 557-563. WANG Xi-jie, LIAN Peng, GE Zhong-xue, et al. Synthesis, crystal structure and theoretical research of 3,3'-dinitrodifurazanyl ether (FOF-1). *Acta Chimica Sinica*, 2010, 68(6): 557-563.
- [3] Sheremetev A B, Aleksandrova N S. An efficient synthesis of hydroxyfurazans[J]. *Mendeleev Communication*, 1998: 238.

- [4] Sheremetev A B, Aleksandrova N S. Synthesis of difurazanyl ethers from 4,4'-dinitroazoxyfuran[J]. *Heteroatom chemistry*, 2000: 48-56.
- [5] 范艳洁, 王伯周, 来蔚鹏, 等. 3,3'-二氰基三唑基醚(FOF-2)的合成、表征及量子化学研究[J]. *有机化学*, 2009, 29(4): 614-620.
- FAN Yan-jie, WANG Bo-zhou, LAI Wei-peng. Synthesis, characterization and quantum chemistry study on 3,3'-dicyanodi-

furazanyl ether(FOF-2)[J]. *Chinese Journal of Organic Chemistry*, 2009, 29(4): 614-620.

关键词: 有机化学; 三唑并氧杂环庚三烯; 合成; 性能
中图分类号: TJ55; O62 文献标识码: A
DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.02.025



《含能材料》创刊 20 周年纪念活动——logo 征集

2013 年,《含能材料》迎来创刊 20 周年。过去的 20 年,是我国含能材料科学技术事业大发展的 20 年,也是《含能材料》稳步发展、茁壮成长的 20 年。作为以董海山院士为代表的我国火炸药科技事业的开拓者们创建的专业学术期刊,《含能材料》见证了我国火炸药、推进剂等领域 20 年来的光辉发展历程。20 年来,《含能材料》凝练出“传承火药文明,创新能源材料”的办刊理念。重温过去,展望未来,《含能材料》编辑部特向全国的读者征集《含能材料》logo 标志,以纪念《含能材料》创刊 20 周年。

征集活动于 2012 年 4 月 15 日开始,于 2012 年 5 月 31 日北京时间 18 时整截止。

所有关心、支持《含能材料》的个人和机构,均可按照规则参加征集活动。凡应征作品的创作者,只需正确填写并签署《《含能材料》标志设计征集活动报名表》(简称“《报名表》”)和《《含能材料》标志设计征集活动应征作品创作者承诺书》(简称“《承诺书》”),并按规定的时间和方式送达应征作品,即可成为标志设计征集活动的应征者。任何参与本征集活动组织和评选工作的个人和机构,均不具有应征资格。

《《含能材料》标志设计稿》应包含标志设计和设计说明,并应符合以下要求:

- (1) 在标志设计中,应于适当位置尽可能体现以下元素中的一种或几种:

- a.  (整体或局部)
- b. Chinese Journal of Energetic Materials(大写或小写)
- c. energetic materials(大写或小写)
- d. new materials

- (2) 标志的绘制形象要符合“好看、好懂、好记、好用”的原则。
- (3) 应征作品应为应征者本人的原创作品,此前未以任何形式发表过,也未以任何方式为公众所知。
- (4) 标志的设计风格 and 类型不限,但应符合中国法律和中国社会公序良俗的要求。

应征作品交付:四川省绵阳市 919 信箱 310 分箱《含能材料》编辑部,621900 或 e-mail: HNCL03@caep.ac.cn
对于当选及优秀设计作品,编辑部将给予奖励。

标志征集细则请参看本刊网站 www.energetic-materials.org.cn

《含能材料》编辑部