

## 新型高氮含能叠氮化物的分子设计与理论研究

满田田, 牛晓庆, 张建国, 王 颖, 张同来, 周遵宁

(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:** 根据  $\text{CH}_4$ 、 $\text{BH}_3$ 、 $\text{NH}_3$  以及  $\text{C}_2\text{H}_4$  的结构特点, 设计了 7 种新型叠氮类高氮含能化合物  $\text{C}(\text{N}_3)_4$ 、 $\text{B}(\text{N}_3)_3$  和  $\text{N}(\text{N}_3)_3$ ;  $\text{CC}(\text{N}_3)_4$ 、 $\text{BN}(\text{N}_3)_4$ 、 $\text{NN}(\text{N}_3)_4$  和  $\text{CC}(\text{N}_3)_6$ , 在 B3PW91/6-311 + G(d) 水平下对上述化合物进行了构型优化、振动频率以及键级分析, 计算结果表明, 所有化合物均无虚频, 为势能面上的稳定结构, 理论计算的红外结果与现有的实验结果十分相符。键级结果表明中心原子形成的键相对较弱, 为爆炸时可能的首发键。计算得到了目标化合物的生成热、密度、爆速和爆压。计算得到几乎所有分子的爆速和爆压都超过了 HMX, 在含能材料领域具有潜在的应用前景。

**关键词:** 物理化学; 叠氮化合物; 高氮化合物; 生成热; 爆速; 爆压

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2012.05.003



## 第四届固体推进剂安全技术研讨会征文通知(第一轮)

第四届固体推进剂安全技术研讨会拟定于 2013 年 7 月下旬在安徽黄山召开, 此次会议由航天工业固体推进剂安全技术研究中心、华中危险化学品安全检测检验中心主办, 航天科技集团公司四院四十二所承办。

会议主题: 固体推进剂安全技术研究进展与发展方向

### 一、征文范围

- |                         |                      |
|-------------------------|----------------------|
| (1) 固体推进剂安全技术研究进展       | (5) 固体推进剂安全性评估、评价方法  |
| (2) 固体推进剂配方与新型含能材料安全性   | (6) 火箭发动机、导弹武器安全评估技术 |
| (3) 固体推进剂安全性试验方法与测试技术   | (7) 火药、炸药及火工品安全技术    |
| (4) 固体推进剂安全性数值模拟及仿真分析技术 | (8) 危险化学品安全技术        |

### 二、征文要求

(1) 观点明确、数据可靠、图表清晰、文字简洁流畅(格式见附件); (2) 文责自负, 论文不应涉及他人知识产权, 须通过单位保密审查; (3) 投稿请注明作者姓名、单位、详细通讯地址、联系电话、传真、电子邮箱等; (4) 投稿请寄打印稿和电子文档各一份, 并附单位保密审查证明; (5) 录用稿件将统一编入《第四届固体推进剂安全技术研讨会论文集》, 创新性和高质量的论文将向《固体火箭技术》、《含能材料》等专业核心期刊推荐; (6) 本论文集已加入中国知网、万方数据资源系统数字化期刊群并全文入网, 如作者不同意论文编入数据库或入网, 请在投稿时声明。

三、征文截稿时间 2013 年 3 月 31 日

### 四、联系方式

联系人: 蒲远远 0710-3219099(O) 13669001170  
 赵孝彬 0710-3219202(O) 0710-3219111(F) 13085288582 zxb73525@sina.com  
 李 军 0710-3219010(O) 13487151431 aqjsyth@163.com  
 通信地址: 湖北省襄樊市 156 信箱, 441003

航天工业固体推进剂安全技术研究中心  
 华中危险化学品安全检测检验中心  
 2012 年 7 月 1 日