

## Theoretical Computation of 5-Aminotetrazolium Nitroformate

LIU Wei<sup>1</sup>, LI Yu-chuan<sup>1</sup>, LI Xiao-tong<sup>2</sup>, YANG Yu-zhang<sup>1</sup>, LIN Qiu-han<sup>1</sup>, PANG Si-ping<sup>1</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China; 2. Patent Examination Cooperation Center of SIPO, Beijing 100190, China)

**Abstract:** The structure and properties of 5-aminotetrazolium nitroformate were studied using quantum chemistry method. The density, heat of formation, detonation velocity and pressure were calculated. The calculated density was  $1.93 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , and the detonation velocity and pressure were  $9.47 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$  and  $38.82 \text{ GPa}$ , respectively. The detonation properties were better than those of TNT, RDX, HMX.

**Key words:** physical chemistry; 5-aminotetrazole; nitroform; inoic salts; detonation properties

**CLC number:** TJ55; O64

**Document code:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2013.02.011



## 中国兵工学会火工烟火专业第十七届学术年会征文通知

为促进我国火工烟火行业的创新发展,紧跟国际火工烟火前沿技术和新兴技术发展趋势,加强科技人员间的学术交流与信息沟通,提高研究水平,经研究决定,拟定于2013年三季度召开中国兵工学会火工烟火专业第十七届学术年会。

### 一、征文内容

- (1) 国内外火工品及相关药剂、烟火剂的基础理论,关键技术;
- (2) 国内外火工品、爆破器材、烟火器材的发展趋势及动态分析;
- (3) 国内外火工品及相关药剂的新工艺、新材料、新方法;
- (4) 火工品安全性、可靠性评估新方法、新理论;
- (5) 火工品及相关药剂测试分析新技术、新方法及仪器设备;
- (6) 火工烟火技术的发展趋势及动态分析。

### 二、稿件要求

- (1) 论文内容反映的研究成果具有较高的理论水平或应用价值;
- (2) 论文未在国内外正式出版物上发表过;
- (3) 作者提交的论文必须通过所在单位的保密审查,文责自负,论文内容不得涉密;
- (4) 论文请按如下顺序排列:题目,作者名,单位名,所在地,邮编,中文摘要,中文关键词,正文,参考文献,作者简介;
- (5) 论文格式按照科技论文标准规范,要求用 Word 2003 以上版本软件排版。

### 三、征文截至时间 2013年5月30日

学术年会召开的具体时间、地点另行通知。优秀论文可推荐到《火工品》期刊。

### 四、投稿采用电子邮件方式 hgxx2005@163.com

### 五、联系方式 联系地址:西安市99号信箱兵工学会,710061

联系人:王建华

电话:029-85333477

中国兵工学会火工烟火专业委员会

2013年3月1日