

Journal of Hazardous Materials, 2010, 177: 703–710.

[24] Kamlet M J, Adolph H G. The relationship of impact sensitivity with structure of organic high explosives[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 1979(4): 30–34.

[25] ZHANG Chao-yang. Review of the establishment of nitro group charge method and its applications[J]. *Journal of Hazardous Ma-*

terials, 2009, 161: 21–29.

[26] ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, HUANG Yi-gang, et al. Investigation of correlation between impact sensitivities and nitro group charges in nitro compounds[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2005, 109: 8978–8982.

对称的吡嗪并环脲硝基衍生物结构和性能的量子化学研究

马丛明¹, 刘祖亮¹, 姚其正^{1,2}

(1. 南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094; 2. 中国药科大学药学院, 江苏 南京 210009)

摘要: 运用密度泛函理论 DFT-B3LYP/6-31G** 方法得到了对称的吡嗪并环脲硝基衍生物的分子几何构型和电子结构。用量子化学方法计算了理论密度和生成热, 用 Kamlet-Jacobs 方程计算了爆速和爆压, 对这些硝基衍生物的结构-性能关系进行了研究。结果表明, 分子中硝基的数量、位置、环境和分子结构的对称性是影响对称吡嗪并环脲硝基衍生物热稳定性和爆轰性能的一些主要因素。1,3,5,7-四硝基-5,7-二氢二咪唑 [4,5-*b*:4',5'-*e*] 吡嗪-2,6(1*H*,3*H*)-二酮的理论密度为 $2.03 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 生成热为 $265.63 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, 爆速为 $9.08 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$, 爆压为 39.22 GPa。1,3,5,7-四硝基-2,6-二氧杂-1,2,3,5,6,7-六氢二咪唑 [4,5-*b*:4',5'-*e*] 吡嗪-4-氧化物的结构是不稳定的。这些计算结果为新型高能量密度材料的设计和合成提供了基础研究数据。

关键词: 量子化学; 爆轰性能; 环脲硝胺; 吡嗪环

中图分类号: TJ55; O64

文献标识码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2014.06.013



向作者致谢

近年,《含能材料》得到了广大作者的大力支持,为表达我们深深的谢意,特向 2013~2014 两年来发表两篇以上论文的作者(第一作者)赠送 2014 年全年《含能材料》。本刊期望在新的一年里能继续得到广大作者更多的关心! 欢迎赐稿!

霸书红	毕福强	陈百利	陈春燕	陈玲	陈言坤	代晓淦	丁可伟	杜仕国	郭亮
侯可辉	胡松启	黄新萍	霍欢	纪晓唐	景梅	李春迎	李辉	李磊	李亚南
李勇	林聪妹	刘冬梅	刘进剑	刘所恩	马丛明	齐晓飞	齐秀芳	唐明峰	涂小珍
王伯周	王猛	王民昌	韦兴文	温茂萍	吴松	武双章	席鹏	肖啸	尹建平
张福场	张光全	张伟斌	周诚	周小清					

《含能材料》编辑部

二〇一四年十二月