

文章编号:1006-9941(2021)09-0798-05

新型熔铸炸药 3,3'-双(二硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BDNAF)的合成与性能

张家荣^{1,2},毕福强^{1,2},张俊林^{1,2},贾思媛^{1,2},王伯周^{1,2}

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065; 2. 氟氮化工资源高效开发与利用国家重点实验室, 陕西 西安 710065)

摘要: 利用 3,4-双(3'-氨基呋唑-4'-基)呋唑(BATF)和 2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)为原料,经氧化偶联、水解、溴化、还原和硝化五步反应首次合成新型含能化合物 3,3'-双(二硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BDNAF),通过红外(IR)、核磁(NMR)和元素分析(EA)对中间体和目标化合物进行结构表征。利用差示扫描量热法(DSC)研究了中间体 3,3'-双(单硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BNAAF)和目标化合物 BDNAF 的热行为;采用 Gaussian 09 程序和 Explo 5(v. 6.04)预估了 BNAAF 和 BDNAF 的物化及爆轰性能。结果表明:BNAAF 没有熔点,热分解峰温为 106.4 °C,理论密度为 1.82 g·cm⁻³,爆速为 8298 m·s⁻¹,爆压为 29.0 GPa;BDNAF 的熔点为 95.4 °C,第一分解峰温为 170.5 °C,理论密度为 1.91 g·cm⁻³,爆速为 9005 m·s⁻¹,爆压为 35.9 GPa,可作为一种新型熔铸炸药。

关键词: 熔铸炸药;二硝甲基-ONN-氧化偶氮基;BDNAF;合成;性能

中图分类号: TJ55; O62

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2021001

1 引言

高能量和高密度是发展新型的含能化合物的两个重要性能^[1-4]。在现有氮杂芳香母体结构中引入高能量基团是一种设计、合成性能突出的含能化合物的有效手段之一^[5-6]。 α -多硝甲基氧化偶氮含能基团由于其结构中含有丰富的氮原子、N=N 键和 C—N 键,作为一种结构新颖的高能量密度含能基团,得到了科学家们的广泛关注。Luk'yanov 等^[7-14]通过将 α -多硝甲基氧化偶氮含能基团和呋唑骨架进行组装合成了系列新型高能量密度呋唑含能化合物,西安近代化学研究所^[15]研究了这类化合物的物化和爆轰性能,进一步证明了 α -多硝甲基氧化偶氮基是一种提高含能化合物能量和密度的有效基团。因此,将 α -多硝甲基氧化偶氮基引入呋唑母体结构是一种提高含能化合物性能的理想策略。熔铸炸药是当前

最广泛应用的军用混合炸药,现阶段的熔铸炸药主要是采用 TNT 作为液相载体炸药,然而此类熔铸炸药的装药密度为 1.81~1.82 g·cm⁻³,爆速仅为 8480 m·s⁻¹,能量水平不能满足追求武器高威力的需求,因此,各国都在开发、研究能量更高的熔铸炸药用以代替 TNT^[16-17]。

为此,本研究利用 3,4-双(3'-氨基呋唑-4'-基)呋唑(BATF)和 2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)作为原料,首次合成了 3,3'-双(二硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BDNAF),并用红外、核磁和元素分析手段对 3,3'-双(单硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BNAAF)和目标化合物 BDNAF 进行了结构表征;通过差示扫描量热法(DSC)研究了 BDNAF 的热行为;通过理论计算研究了 3,3'-双(单硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BNAAF)和 BDNAF 的物化及爆轰性能,结果表明 BDNAF 是一种具有高能量高密度的新型熔铸炸药。

2 实验

2.1 试剂和仪器

3,4-双(3'-氨基呋唑-4'-基)(BATF)参考文献[18]

收稿日期: 2021-01-03; 修回日期: 2021-02-20

网络出版日期: 2021-07-05

基金项目: 国家自然科学基金资助(21805223)

作者简介: 张家荣(1993-),女,助理工程师,主要从事含能材料的设计、合成及性能研究。e-mail:sonia610@126.com

通信联系人: 王伯周(1967-),男,研究员,主要从事含能材料的设计、合成及性能研究。e-mail:wangbozhou600@163.com

引用本文: 张家荣,毕福强,张俊林,等. 新型熔铸炸药 3,3'-双(二硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BDNAF)的合成与性能[J]. 含能材料, 2021, 29(9):798-802. ZHANG Jia-rong, BI Fu-qiang, ZHANG Jun-lin, et al. A Novel Melt-Cast Explosive Bis(dinitromethyl-ONN-azoxyfurazanyl)trifurazan(BDNAF): Synthesis and Characterization[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2021, 29(9):798-802.

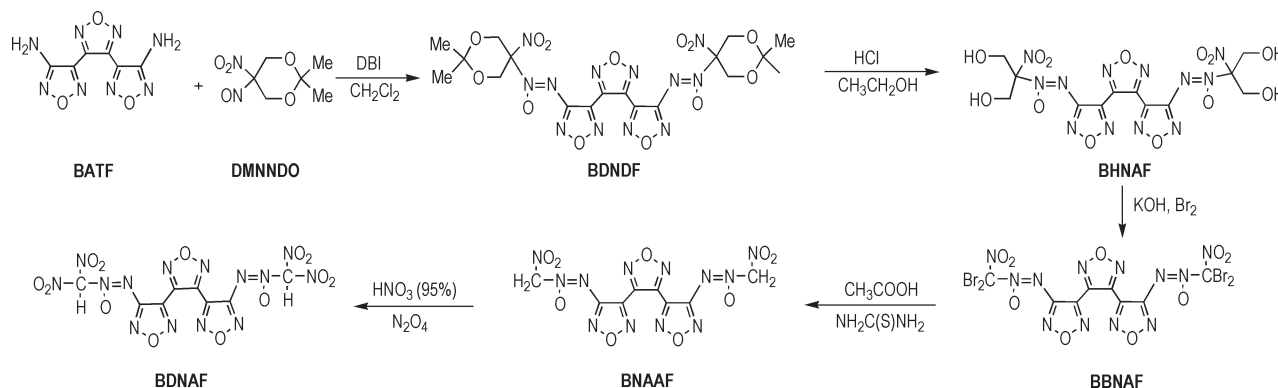
制备,2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)参考文献[19]制备;二氯甲烷、1,3-二溴-1,3,5-三嗪-2,4,6-三酮(DBI)、无水乙醇、液溴、硫酸、醋酸、四氧化二氮等试剂均为市售分析纯。

NEXUS 870型傅里叶变换红外光谱仪,美国 Nicolet公司;AV 500型(500MHz)超导核磁共振仪,瑞士 Bruker公司;Vario EL-III型自动微量有机元素分析仪,德国 Elementar公司;LC-2010A液相色谱仪,日

本岛津公司;X-6型显微熔点测定仪,北京泰克仪器有限公司;Q-2000型差示扫描热量仪,美国TA公司。

2.2 合成

利用3,4-双(3'-氨基呋唑-4'-基)呋唑(BATF)和2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)为原料,通过氧化偶联、水解、溴化、还原和硝化五步反应合成目标化合物BDNAF,合成路线如下:



Scheme 1 Synthesis of BDNAF

2.2.1 3,3'-双[α -(2,2-二甲基-5-硝基-1,3-二氧环己烷-5-基)-ONN-氧化偶氮基]三唑啉(BDNDF)的合成

20 °C条件下,在三口烧瓶中,加入2.1 g(11.1 mmol)2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)和30 mL二氯甲烷,搅拌溶解后,加入1.5 g(5.0 mmol)3,4-双(3'-氨基呋唑-4'-基)呋唑(BATF)和4.8 g(16.6 mmol)1,3-二溴-1,3,5-三嗪-2,4,6-三酮(DBI),在此温度下搅拌并利用薄层色谱(TLC)检测反应进程;原料反应完毕后,过滤反应液,将滤液浓缩,通过硅胶柱(SiO_2 , $V_{\text{PE}}:V_{\text{EtOAc}}=4:1$)分离,得2.7 g浅黄色固体BDNDF,收率为70%。熔点:118~120 °C; ^{13}C NMR(CDCl_3-d_6 , 125 MHz) δ : 22.4, 23.5($-\text{CH}_3$), 62.2, 62.3($-\text{CH}_2$), 101.1, 118.3(C), 136.1, 139.4, 141.8, 142.7, 153.1, 161.8(furazan rings); ^1H NMR(CDCl_3-d_6 , 500 MHz) δ : 1.52(s, 3H, $-\text{CH}_3$), 1.53(s, 3H, $-\text{CH}_3$), 4.78~4.87(m, 8H, $-\text{CH}_2$); IR(KBr, ν/cm^{-1}): 3000, 2951, 1576, 1506, 1383, 1202。Anal. Calcd for $\text{C}_{18}\text{H}_{20}\text{N}_{12}\text{O}_{13}$: C 35.30, H 3.29, N 27.45; found C 35.37, H 3.32, N 28.03。

2.2.2 3,3'-双[α -(1,3-二羟基-2-硝基-2-异丙基)-ONN-氧化偶氮基]三唑啉(BHNAF)的合成

将0.15 g(0.24 mmol)BDNDF溶于6.75 mL乙醇中,搅拌并滴入3 mL浓盐酸,加热至60 °C,此温度下

反应3 h。真空除去挥发性物质得油状产物,用氯仿洗涤得0.12 g BHNAF产物,收率为99%。 ^{13}C NMR(CDCl_3-d_6 , 125 MHz) δ : 60.5(CH_2), 115.1, 137.6(C), 140.9, 142.6, 143.3, 153.5, 162.4(furazan rings); ^1H NMR(CDCl_3-d_6 , 500 MHz) δ : 4.63(s, 4H, $-\text{CH}_2$), 4.64(s, 4H, $-\text{CH}_2$); IR(KBr, ν/cm^{-1}): 3384, 2956, 1698, 1575, 1515, 1344, 1235。Anal. Calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{N}_{12}\text{O}_{13}$: C 27.08, H 2.27, N 31.58; found C 27.00, H 2.31, N 32.02。

2.2.3 3,3'-双[α -(1,1-二溴硝甲基)-ONN-氧化偶氮基]三唑啉(BBNAF)的合成

将粗产品0.6 g(1.1 mmol)BHNAF溶于20 mL乙醚,低于15 °C的温度下,滴入8 mL氢氧化钾水溶液(质量分数5%),缓慢加入0.35 mL液溴,25 °C反应30 min。碳酸氢钠、水洗涤有机相,无水硫酸镁干燥,过滤,真空除去溶剂得0.4 g浅黄色产物BBNAF,收率为51%。熔点:106~108 °C; ^{13}C NMR(CDCl_3-d_6 , 125 MHz) δ : 97.362(CBr_2NO_2), 139.6, 142.1, 153.4(furazan rings); IR(KBr, ν/cm^{-1}): 1611, 1492, 1317, 1293。Anal. Calcd for $\text{C}_8\text{Br}_4\text{N}_{12}\text{O}_9$: C 13.2, N 23.10; found C 13.31, N 23.76。

2.2.4 3,3'-双[单硝甲基-ONN-氧化偶氮基]三唑啉(BNAAF)的合成

将0.10 g(0.14 mol)BBNAF溶于0.6 mL醋酸,

滴入 0.03 g (0.38 mol) 硫脲的 0.6 mL 水溶液, 20 °C 反应 30 min, 有固体析出, 用水稀释 2~3 次, 过滤, 冷水洗涤, 晾干得 0.03 g BNAAF 产物, 收率为 57%。熔点: 106.6 °C (dec.); ¹H NMR (Acetone-*d*₆, 500 MHz) δ: 9.366 (s, 2H, CH₂)。 ¹³C NMR (Acetone-*d*₆, 125 MHz) δ: 114.454 (CH), 148.410, 148.860, 150.790, 151.101 (furan rings); IR (KBr, ν/cm^{-1}): 3387, 3010, 1632, 1594, 1523, 1339。 Anal. Calcd for C₈H₄N₁₂O₉: C 23.31, H 0.98, N 40.78; found C 23.28, H 0.98, N 41.02。

2.2.5 3,3'-双[二硝甲基-ONN-氧化偶氮基]三唑啉 (BDNAF)

将 0.1 g (0.24 mmol) BNAAF, 1.5 mL 质量分数为 95% 的 HNO₃ 和 0.7 mL N₂O₄ 在密封条件下加热至 50 °C 反应 12 h。冷却, 将反应液倒入冰中, 析出白色固体, 过滤后得 0.08 g BDNAF, 收率为 72%。熔点: 95.4 °C; ¹³C NMR (CDCl₃-*d*₆, 125 MHz) δ: 97.592

(—CH(NO)₂); 140.056, 140.892, 142.902, 143.335, 153.666, 154.366 (furan rings); IR (KBr, ν/cm^{-1}): 2978, 2901, 1606, 1527, 1293。 Anal. Calcd for C₈H₂N₁₄O₁₃: C 19.13, H 0.40, N 39.05; found C 19.10, H 0.42, N 40.35。

2.3 BNAAF 和 BDNAF 的热性能

采用差示扫描热量法 (DSC) 对中间体 BNAAF 和目标化合物 BDNAF 的热行为进行研究。实验条件为: 动态氮气气氛, 温度 25~500 °C, 升温速率 10 °C·min⁻¹。如图 1 所示, BNAAF 没有融化过程在加热过程中直接分解, 起始分解温度为 72.2 °C, 分解峰温为 106.4 °C; BDNAF 的熔点为 95.4 °C, 其分解过程可以分为三个分解阶段, 第一个分解峰温为 170.0 °C, 起始分解温度为 131.0 °C, 峰形尖锐且放热量较其他两个分解阶段更大, 第二个和第三个分解峰温分别为 217.5 °C 和 306.8 °C, 放热量依次减弱。

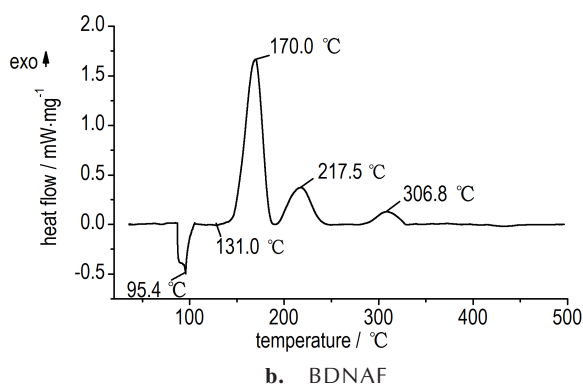
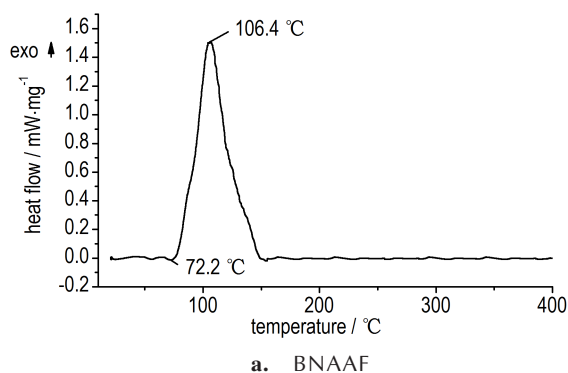


图 1 BNAAF 和 BDNAF 的 DSC 曲线

Fig.1 DSC curves of BNAAF and BDNAF

2.4 物化参数和爆轰性能

为了考察 BNAAF 和 BDNAF 的物化和爆轰性能, 本研究基于密度泛函理论 (DFT) 的 B3LYP 方法^[20], 优化了其分子构; 采用 Gaussian 09 程序^[21] 和 Explo 5 (v. 6.04) 进行性能计算, 对 BNAAF 和 BDNAF 进行性能预估, 并将其与 TNT 的性能相比较, 结果见表 1。

由表 1 可见, BDNAF 的性能优于 BNAAF, 这说明硝基数目的增多, 化合物的能量密度有着显著改善, 其中, BDNAF 的理论密度为 1.91 g·cm⁻³, 爆速为 9005 m·s⁻¹, 爆压为 35.9 GPa, 均高于 TNT 的密度 (1.65 g·cm⁻³)、爆速 (7868 m·s⁻¹) 和爆压 (27 GPa), 表明 BDNAF 是具有高能量高密度的新型熔铸炸药。

表 1 BNAAF, BDNAF 和 RDX 的物化参数及爆轰性能

Table 1 The physicochemical properties and detonation performances of BNAAF, BDNAF compared with RDX

| compounds | $T_m^{1)}/\text{°C}$ | $\rho^{2)}/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ | $\Delta_f H^{3)}/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ | $D^{4)}/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ | $p^{5)}/\text{GPa}$ |
|---------------------|----------------------|---|---|-------------------------------------|---------------------|
| BNAAF | 106.4(dec.) | 1.82 | 426.37 | 8298 | 29.0 |
| BDNAF | 95.4 | 1.91 | 303.38 | 9005 | 35.9 |
| RDX ^[22] | 210(dec.) | 1.80 | 86.3 | 8795 | 34.9 |

Note: 1) Melting temperature. 2) Calculated density. 3) Heats of formation calculated by Gaussian 09. 4) Calculated detonation velocity (EXPLO5 v 6.04). 5) Calculated detonation pressure (EXPLO5 v 6.04).

3 结论

(1) 以 3,4-双(3'-氨基呋啉-4'-基)呋啉 (BATF) 和

2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷(DMNDO)为原料,经氧化偶联、水解、溴化、还原、硝化五步反应合成了新型含能化合物 3,3'-双(二硝甲基-ONN-氧化偶氮基)三唑啉(BDNAF),采用红外、核磁和元素分析对中间体及BDNAF进行了结构表征。

(2)采用通过差示扫描量热法(DSC)研究了BDNAF的热行为,在升温速率为 $10\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,BDNAF的熔点为 $95.4\text{ }^{\circ}\text{C}$,第一分解峰温为 $170.0\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。

(3)采用 Gaussian 09 程序和 Explo 5(v. 6.04)爆轰方程,预估了BDNAF的物化和爆轰性能,其密度为 $1.91\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$,爆速为 $9005\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,爆压为 35.9 GPa ,是一种高能量高密度的新型熔铸炸药。

参考文献:

- [1] 翟连杰,樊学忠,王伯周,等. 3,4-二(3-氟偕二硝基-4-氧)呋唑啉:一种新型热稳定高能密度增塑剂[J]. 含能材料,2016,24(9):922-924.
ZHAI Lian-jie, FAN Xue-zhong, WANG Bo-zhou, et al. 3,4-Bis(3-fluorodinitromethylfuran-4-oxy) furazan: A new thermally stable plasticizer with high energy density [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(9):922-924.
- [2] 张俊林,肖川,翟连杰,等. 多硝基氮杂稠环化合物合成及性能[J]. 有机化学,2016,36(6):1197-1207.
ZHANG Jun-lin, XIAO Chuan, ZHAI Lian-jie, et al. Synthesis and properties of the fused aza-polynitrocyclic compounds[J]. *Chinese Journal of Organic Chemistry*, 2016, 36(6): 1197-1207.
- [3] XU C, BI F Q, ZHANG M, et al. Synthesis, structural characterization and properties of bis(1,5-diamino-1H-tetraazolium) 3,3'-bis(nitramino)-4,4'-azofurazan [J]. *Chinese Journal of Structure Chemistry*, 2015, 34(9): 1341-1346.
- [4] 张家荣,毕福强,王伯周,等. α -多硝甲基氧化偶氮含能化合物合成研究进展[J]. 火炸药学报,2016,39(6):12-19.
ZHANG Jia-rong, BI Fu-qiang, WANG Bo-zhou, et al. An Improved Studies on the Synthesis, Characterization and Crystal Structure of 2,2-Dimethyl-5-nitro-5-nitroso-1,3-dioxane [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2016, 39(6): 12-19.
- [5] WEI H, GAO H X, Shreeve J M. N-oxide 1,2,4,5-tetrazine-based high-performance energetic materials [J]. *Chemistry-A European Journal*, 2014, 20, 16943-16952.
- [6] Tong Y X, GAO H X, Parrishi D A, et al. 1,2,4-Triazole links and N-azo bridges yield energetic compounds[J]. *Chemistry-A European Journal*, 2015, 21: 1-8.
- [7] Luk'yanov O A, Salamonov Y B, Bass A G, et al. Aryl-NNO-azoxy- α -nitroalkanes[J]. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences, Division of chemical science*, 1992, 41(10): 1884-1894.
- [8] Luk'yanov O A, Pokhvisneva G V, Ternikova T V, et al. Aliphatic α -nitroalkyl-ONN-azoxy compounds and their derivatives[J]. *Russian Chemical Bulletin*, 2009, 58(10): 2063-2069.
- [9] Luk'yanov O A, Pokhvisneva G V, Ternikova T V, et al. 3,4-Bis(α -nitroalkyl-ONN-azoxy) furazans and some of their derivatives [J]. *Russian Chemical Bulletin*, 2012, 61(2): 360-365.
- [10] Luk'yanov O A, Pokhvisneva G V, Ternikova T V, et al. α -Nitroalkyl-ONN-azoxyfurazans and some of their derivatives [J]. *Russian Chemical Bulletin*, 2011, 60(8): 1703-171.
- [11] Luk'yanov O A, Pokhvisneva G V, Ternikova T V. Bis(nitro-and polynitromethyl-ONN-azoxy) azoxyfurazans and some of their derivatives[J]. *Russian Chemical Bulletin*, 2012, 61(9): 1783-1786.
- [12] Luk'yanov O A, Parakhin V V, Pokhvisneva G V, et al. 3-Amino-4-(α -nitroalkyl-ONN-azoxy) furazans and some of their derivatives [J]. *Russian Chemical Bulletin*, 2012, 61(2): 355-359.
- [13] Luk'yanov O A, Salamonov Y B, Bass A G, et al. N'-(α -acetoximinoalkyl) diazene-N-oxides and some of their transformations[J]. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR, Division of chemical science*, 1991, 40(1): 93-98.
- [14] 张家荣,毕福强,廉鹏,等. 新型含能化合物 3,3'-双(氟二硝甲基氧化偶氮基)氧化偶氮呋唑啉(FDNAF)合成与表征[J]. 有机化学,2017,37:2736-2744.
ZHANG Jia-rong, BI Fu-qiang, Lian Peng, et al. Synthesis and characterization of a novel energetic compound 3,3'-bis(fluoronitromethyl-ONN-azoxy) azoxyfurazan [J]. *Chinese Journal of Organic Chemistry*, 2017, 37: 2736-2744.
- [15] 毕福强,王玉,王伯周,等. 多硝甲基氧化偶氮呋唑啉含能衍生物爆轰与安全性能理论研究[J]. 含能材料,2016,24(11):1063-1069.
BI Fu-qiang, WANG Yu, WANG Bo-zhou, et al. Theoretically study on the detonation and safety properties of energetic derivatives based on polynitromethylazoxyfurazan [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(11): 1063-1069.
- [16] 曹端林,李雅津,杜耀,等. 熔铸炸药载体的研究评述[J]. 含能材料,2013,21(2):157-165.
Cao Duan-lin, Li Ya-jin, Du Yao, et al. Review on carriers for melt-cast explosives [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2013, 21(2): 157-165.
- [17] 王亲会. 一种新型熔铸炸药研究[J]. 含能材料,2004,12(1):46-47.
WANG Qin-hui. A new melt-cast explosive formulation [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2013, 21(2): 157-165.
- [18] 贾思媛,张海昊,王伯周,等. 3,3'-双(3'-氨基呋唑啉-4'-基)呋唑啉的合成与表征[J]. 含能材料,2013,21(3):289-293.
JIA Si-yuan, ZHANG Hai-hao, WANG Bo-zhou, et al. Synthesis and Characterization of 3,4-Bis-(3'-aminofurazal-4'-yl)-furazan (BATF) [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2013, 21(3): 289-293.
- [19] 张家荣,毕福强,王伯周,等. 2,2-二甲基-5-硝基-5-亚硝基-1,3-二氧环己烷合成、表征及晶体结构研究[J]. 结构化学,2017,36(3):401-408.
ZHANG Jia-rong, BI Fu-qiang, WANG Bo-zhou, et al. An improved study on the synthesis, characterization and crystal structure 2,2-dimethyl-5-nitro-5-nitroso-1,3-dioxane [J]. *Chinese Journal of Structural Chemistry*, 2017, 36(3): 401-408.
- [20] Becke A D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange[J]. *Journal of Chemistry Physics*, 1993, 98

(7): 5648–5652.

[21] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 09 [CP], Gaussian, Inc., Wallingford C T, 2009.

[22] Zhang J R, Bi F Q, Zhang J L, et al. Synthetic and thermal studies of four insensitive energetic materials based on oxidation of the melamine structure[J]. *RSC Adv*, 2021: 288.

A Novel Melt-Cast Explosive Bis(dinitromethyl-ONN-azoxyfurazanyl)trifurazan (BDNAF): Synthesis and Characterization

ZHANG Jia-rong^{1,2}, BI Fu-qiang^{1,2}, ZHANG Jun-lin^{1,2}, JIA Si-yuan^{1,2}, WANG Bo-zhou^{1,2*}

(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China; 2. State Key Laboratory of Fluorine & Nitrogen Chemical, Xi'an 710065, China)

Abstract: A novel melt-cast energetic compound bis(dinitromethyl-ONN-azoxyfurazanyl)furazan (BDNAF) was synthesized using 3,4-bis(3'-aminofurazal-4'-yl)furazan (BATF) and 2,2-dimethyl-5-nitro-5-nitroso-1,3-dioxane (DMNDO) as starting materials via oxidation coupling, hydrolysis, bromization, reduction and nitration five-step reactions. The structures of the intermediates and the target material were fully characterized by infrared spectrum (IR), nuclear magnetic resonance (NMR) and elemental analysis (EA). The thermal behaviors of intermediate compound 3, 3'-bis(nitromethyl-ONN-azoxyfurazanyl) furazan (BNAAF) and target compound BDNAF were investigated based on differential scanning calorimetry (DSC) measurement, and the physicochemical properties and detonation performances of BNAAF and BDNAF were estimated by Gaussian 09 program and Explo 5 (v. 6.04). Results show that the intermediate compound BNAAF directly decomposed at 106.4 °C without melting process, and the calculated density of BNAAF is 1.82 g·cm⁻³, the detonation velocity is 8298 m·s⁻¹, and the detonation pressure is 29.0 GPa. The melting point of the target compound BDNAF is 95.4 °C, the first decomposition point is 170.5 °C at the heating rate of 10 °C·min⁻¹, and the theoretical density of BDNAF is 1.91 g·cm⁻³, the detonation velocity is 9005 m·s⁻¹ and the detonation pressure 35.9 GPa, which revealed that BDNAF is a promising melt-cast explosive.

Key words: melt-cast explosive; dinitromethyl-ONN-azoxy; BDNAF; synthesis; characterization

CLC number: TJ55; O62

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2021001

(责编:姜梅)