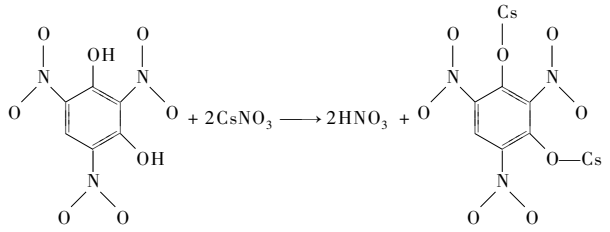
文章编号:1006-9941(2006)01-0080-01

$[Cs_2(TNR)\cdot 2(H_2O)]_n$ 的合成、晶体结构和热行为

郑　红, 张同来, 杨　利, 张建国, 乔小晶
(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

2,4,6-三硝基间苯二酚(斯蒂芬酸(TNR))及其盐类,如斯蒂芬酸钾,是常见的含能材料,为了寻找新的环保型含能材料,按 Scheme 1 将 TNR 分散于蒸馏水中,在 60 ℃边搅拌边滴加 $CsNO_3$ 溶液。加完后在快速搅拌条件下,迅速冷却至室温,出料、抽干后在烘箱中烘干。产品为黄色粉末,产率为 81%。



Scheme 1

在水溶液中用自然挥发法20天后得到单晶。结构分析表明: 该晶体属单斜晶系, $P2_1/c$ 空间群,分子式为 $Cs_2C_6H_5N_3O_{10}$。在一个晶胞中铯原子、TNR 负离子和配位水的比例为 2 : 1 : 2,两个中心原子间无金属键,通过氧桥连接,两个铯原子的配位数分别为 10、13,分别与不同的酚羟基、硝基及配位水上的氧原子配位。IR(KBr, cm^{-1}): $\nu_{N=O}$: 1523, 1321; ν_{OH}: 3442; ν_{C-H}: 2936, 2859; $\nu_{C=C(苯环)}$: 1604, 1461, $\delta_{=C-H}$: 875。元素分析(%) $Cs_2C_6H_5N_3O_{10}$ (M. W. 544.95); 计算值(实测值): C 13.22(13.28), H 0.92(0.95), N 7.71(7.67)。

DSC 分析表明, 在 60.7 ~ 90.3 ℃有一小的吸热脱水峰, 270 ~ 299 ℃有一大的放热分解峰。相应的 TG-DTG 曲线表明, 65 ℃开始分解, 在 283 ℃时有一显著的失重过程, 紧随之后是一缓慢的失重过程, 两个过程的总失重量为 41.2%。升温到 550 ℃, 分解完毕。

关键词: 有机化学; 三硝基间苯二酚铯; 合成; 晶体结构; 热分析

中图分类号: TJ55; O62

收稿日期: 2005-10-12; **修回日期**: 2005-12-19

基金项目: 中国自然科学基金资助(20471008)

作者简介: 郑红(1981 -), 女, 在读硕士, 从事物理化学方面的研究。e-mail: zhenghongsmail@163.com 或 zhenghongbit@bit.edu.cn

读者 · 作者 · 编者

关于 2006 年《钝感炸药研究论文专辑》的征稿启事

高能钝(低)感炸药一直以来是含能材料领域研究重点之一,为促进高能钝(低)感炸药在火炸药、推进剂等领域的应用研究,本刊将于 2006 年 10 月(第 5 期)组织出版《钝感炸药研究论文专辑》。专辑内容涉及高能钝(低)感炸药的合成、配方、性能测试与表征、工艺与相关技术研究及其应用和发展方向。

欢迎科研工作者来稿,来稿请注明"钝感炸药研究论文专辑"。

www.energetic-materials.org.cn 含能材料