

## 均三嗪含氮取代基衍生物的结构和性质

梁晓琴; 蒲雪梅; 田安民

四川师范大学化学学院, 成都 610066; 四川大学化学学院, 成都 610064

### 摘要:

在B3LYP/aug-cc-pvDZ理论水平上研究了一CN、一NO<sub>2</sub>、一NH<sub>2</sub>、一N<sub>3</sub>、一N<sub>2</sub>H、一NHNH<sub>2</sub>、一N<sub>4</sub>H和一N<sub>4</sub>H<sub>3</sub>等含氮取代基取代均三嗪环上的氢原子生成的衍生物, 预测了它们的分子构型、分解能及含能性质. 对衍生物分解能的研究结果表明, 一CN和一NH<sub>2</sub>取代的衍生物的分解能比未取代时更高, 而其余基团的取代使分解能降低; 取代基化合物的生成热越大, 取代均三嗪中的氢原子后生成衍生物的生成热也越大. 一CN、一N<sub>3</sub>和一N<sub>4</sub>H取代的均三嗪衍生物的单位原子生成热为71.9、78.7和82.6 kJ, 比文献报道的三叠氨基-均三嗪的(70.2 kJ)更高. 一N<sub>4</sub>H、一N<sub>3</sub>、一N<sub>4</sub>H<sub>3</sub>、一N<sub>2</sub>H和一CN取代的均三嗪衍生物, 生成热为863.1-1735.2 kJ·mol<sup>-1</sup>, 但一N<sub>4</sub>H和一N<sub>4</sub>H<sub>3</sub>取代的衍生物分解能较小, 稳定性较差.

关键词: 高能量密度物质 均三嗪 含氮取代基 分解能 生成热

收稿日期 2007-09-20 修回日期 2007-12-29 网络版发布日期 2008-03-05

通讯作者: 梁晓琴 Email: lxqygr@163.com

### 本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(262KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 高能量密度物质

▶ 均三嗪

▶ 含氮取代基

▶ 分解能

▶ 生成热

本文作者相关文章

▶ 梁晓琴

▶ 蒲雪梅

▶ 田安民