

芳香族硝基炸药感度和安定性的量子化学研究I.苯胺类硝基衍生物

肖鹤鸣,王遵尧,姚剑敏

华东工学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 运用HMO和CNDO/2方法,研究了二十多种苯胺类硝基衍生物的安定性.随着分子中C-NO<sub>2</sub>键级的增大,其撞击感度减小、热安定性增强.以孤立双键为参考基准的离域能判据,

不能反映分子中基团位置对称定性的影响;它的运用只能局限在基团相互位置影响不大的共轭体系中,

作为本系列化合物安定性的影响;它的运用只能局限在基团相互位置影响不大的共轭体系中.

作为本系列化合物安定性的判据,C-NO<sub>2</sub>键级较通常的离域能更为适用和直观;C-NO<sub>2</sub>

键级判据也符合炸药起爆和热分解机理,且与Delpuech的判据相一致.

关键词 [硝基化合物](#) [苯胺 P](#) [热稳定性](#) [量子化学](#) [微分重叠全忽略近似](#) [炸药](#) [撞击](#) [休克尔分子轨道](#)

分类号 [TQ56](#) [0641](#)

## Quantum chemical study on sensitivity and stability of aromatic nitro explosives i. nitro derivatives of aminobenzenes

XIAO HEMING,WANG ZUNYAO,YAO JIANMIN

### Abstract

**Key words** [NITRO COMPOUNDS](#) [BENZAMINE P](#) [THERMAL STABILITY](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [EXPLOSIVES](#) [IMPACT](#) [HUCKEL MOLECULAR ORBITAL](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

### 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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

### 相关信息

▶ [本刊中包含“硝基化合物”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [肖鹤鸣](#)
- [王遵尧](#)
- [姚剑敏](#)