

研究论文

H⁺、NH₄⁺对HMX的N—NO₂键解离能的影响

王罗新; 刘勇; 虞新林; 李松年; 王晓工

清华大学化学工程系, 高分子研究所, 北京 100084

摘要:

采用密度泛函理论的B3P86/6-31G**方法, 优化了 β -HMX及其与H⁺、NH₄⁺分别形成的复合物的稳定结构, 计算了 β -HMX以及复合物中最弱的N—NO₂键解离能. 结果发现, HMX与H⁺、NH₄⁺形成复合物后, 使HMX的构型产生较大变化; 与H⁺结合后, HMX的一个N—NO₂键显著伸长, 键级变小; 但与NH₄⁺形成复合物后, HMX中键级最小的N—NO₂键长变化不大. 键解离能计算表明, 同 β -HMX相比, 与H⁺形成的两种复合物中N—NO₂键解离能分别降低了近20和82 kJ·mol⁻¹, 而HMX与NH₄⁺形成的复合物中N—NO₂键解离能仅降低了约8 kJ·mol⁻¹, 表明H⁺对 β -HMX的N—NO₂键的初始热裂解反应有促进作用, 而NH₄⁺影响不明显.

关键词: HMX 键解离能 热解反应 密度泛函理论

收稿日期 2007-05-11 修回日期 2007-05-29 网络版发布日期 2007-07-13

通讯作者: 虞新林 Email: tuoxl@mail.tsinghua.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 姜富灵, 翟高红, 丁黎, 岳可芬, 刘妮, 史启祯, 文振翼.NO₂、OH、OH⁻对HMX初始热解的影响[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0

扩展功能

本文信息

PDF(628KB)

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

▶ HMX

▶ 键解离能

▶ 热解反应

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 王罗新

▶ 刘勇

▶ 虞新林

▶ 李松年

▶ 王晓工