

[1]林秋汉,李玉川,祁才,等.6,6'-二氨基氧化偶氮-1,2,4,5-四嗪-1,1',5,5'-四氧化物(DAATO5)的密度泛函理论[J].火炸药学报,2010,(3):21-24.

LIN Qiu-han,LI Yu-chuan,QI Cai,et al.Density Functional Theory of 6,6'-Diamino-oxidation of Azo-1,2,4,5-tetrazine-1,1',5,5'-4-oxide Compound LIN Qiu-han, LI Yu-chuan,QI Cai, LIU Wei, SUN Cheng-hui, PANG Si-ping[J].,2010,(3):21-24.

点击复制

6,6'-二氨基氧化偶氮-1,2,4,5-四嗪-1,1',5,5'-四氧化物(DAATO5)的密度泛函理论



导航/NAVIGATE

[本期目录/Table of Contents](#)

[下一篇/Next Article](#)

[上一篇/Previous Article](#)

工具/TOOLS

[引用本文的文章/References](#)

[下载 PDF/Download PDF\(1218KB\)](#)

[立即打印本文/Print Now](#)

[导出](#)

统计/STATISTICS

[摘要浏览/Viewed](#)

[全文下载/Downloads](#) 564

[评论/Comments](#) 263



《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2010年第3期 页码: 21-24 栏目: 出版日期: 2010-06-30

Title: Density Functional Theory of 6,6'-Diamino-oxidation of Azo-1,2,4,5-tetrazine-1,1',5,5'-4-oxide Compound

LIN Qiu-han, LI Yu-chuan, QI Cai, LIU Wei, SUN Cheng-hui, PANG Si-ping

作者: 林秋汉; 李玉川; 祁才; 刘威; 孙成辉; 庞思平
北京理工大学材料学院

Author(s): LIN Qiu-han; LI Yu-chuan; QI Cai; LIU Wei; SUN Cheng-hui; PANG Si-ping

关键词: 物理化学; 6,6'-二氨基氧化偶氮-1,2,4,5-四嗪-1,1',5,5'-四氧化物; 量化计算; 生成热; 爆轰性能; 密度泛函理论

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要:

运用密度泛函理论,在DFT-B3LYP/6-31G*水平下,对6,6'-二氨基氧化偶氮-1,2,4,5-四嗪-1,1',5,5'-四氧化物(DAATO5)进行理论计算,求得DAATO5优化后的几何构型和IR光谱,并通过设计合理的等键反应,求得DAATO5的理论生成热为713kJ/mol。按照Kamlet-Jacobs方程计算了DAATO5的爆轰性能。结果表明,DAATO5符合HEDM能量要求,密度为1.904g/cm³,爆速为9.33km/s,爆压为40.0GPa。N氧化反应能够有效改善DAAT的氧平衡,并能提高密度、爆速、爆压等各项性能。

Abstract: -

参考文献/References:

-

相似文献/References:

[1]罗运军,葛震.含能黏合剂合成研究新进展[J].火炸药学报,2011,(2):1.

备注/Memo: -
