

含能材料2,6-二胺-3,5-二硝基吡嗪-1-氧化物的B3LYP研究

何文娣,周歌,胡海荣,田双河,田安民,文忠,赵鹏骥,徐起磊

四川大学化学学院;中国工程物理研究院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在B3LYP/6-31G^{***}水平下,研究了LLM-105的稳定几何构型,并进行了集居数分析,自然键轨道(NBO)分析,成键轨道分析,以及振动光谱分析。根据计算可知,LLM-105分子中所有原子均处于同一平面,分子是由一个除了H以外所有原子均参与的大的 π 共轭体系构成;分子内存在着较强的氢键,使分子的稳定性增强;以C-NO₂的C-N键键强度最小,可能是分解引发键,在爆炸时最先断裂。

关键词 [含能材料](#) [爆炸](#) [量子化学](#) [硝基化合物](#) [氧化物](#) [二胺](#) [吡嗪P](#)

分类号 [TQ56](#) [0641](#)

Study on an energetic material 2,6-diamino-3,5- dinitropyrazine-1- oxide by B3LYP

He Wendi,Zhou Ge,Hu Hairong,Tian Shuanghe,Tian Anmin,Wen Zhong,Zhao Pengji,Xu Qilei

Abstract The molecular geometry of 2,6-diamino-3,5-dinitropyrazine-1-oxide (LLM-105) was optimized at B3LYP/6-31G^{***} level. The population, vibrational frequency, bonding behavior and natural bond orbital analyses were performed. According to the results, all atoms of LLM-105 are coplanar and the molecule is constituted by a π conjugative system except H; intensive intramolecular hydrogen bonds are involved in LLM-105, which increase the stability of the whole molecule; the C-N bond in C-NO₂ with the smallest bond intensity was considered as the induced bond of thermal decomposition in LLM-105.

Key words [ENERGETIC MATERIAL](#) [EXPLOSION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [NITRO COMPOUNDS](#) [OXIDE](#) [DIAMINE](#) [PYRAZINE P](#)

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“含能材料”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [何文娣](#)
- [周歌](#)
- [胡海荣](#)
- [田双河](#)
- [田安民](#)
- [文忠](#)
- [赵鹏骥](#)
- [徐起磊](#)