

• 研究论文 •

3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮与 NH₃ 及 H₂O 分子间相互作用的理论研究

方国勇^{a,b} 徐丽娜^{a,b} 肖鹤鸣^{*,a} 居学海^a

(^a南京理工大学化学系 南京 210094)

(^b温州大学化学与材料科学学院 温州 325027)

摘要 在 DFT-B3LYP/6-311++G**水平上, 求得 3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮(NTO)/NH₃ 和 NTO/H₂O 两种超分子体系势能面上 5 种全优化构型. 经基组叠加误差(BSSE)和零点能(ZPE)校正, 求得 NTO 与 NH₃ 和 H₂O 的分子间最大相互作用能依次为 -37.58 和 -30.14 kJ/mol, 表明 NTO 与 NH₃ 的分子间相互作用强于与 H₂O 的作用. 超分子体系中电子均由 NH₃ 或 H₂O 向 NTO 转移, 相互作用能主要由强氢键所贡献, 由自然键轨道分析揭示了相互作用的本质. 对优化构型进行振动分析, 并基于统计热力学求得 200.0~800.0 K 温度范围从单体形成超分子的热力学性质变化. 发现由 NTO 和 NH₃ 形成超分子 II 和 III 在常温下可自发进行; 而 NTO 和 H₂O 只在低温下才能自发形成 IV, V 和 VI 超分子.

关键词 3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮(NTO); NH₃; H₂O; 分子间相互作用; 密度泛函理论; 自然键轨道分析; 热力学性质

Theoretical Study on Intermolecular Interactions of 3-Nitro-1,2,4-triazol-5-one with NH₃ and H₂O

FANG, Guo-Yong^{a,b} XU, Li-Na^{a,b} XIAO, He-Ming^{*,a} JU, Xue-Hai^a

(^aDepartment of Chemistry, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

(^bSchool of Chemistry and Materials Science, Wenzhou University, Wenzhou 325027)

Abstract Five fully optimized geometries of 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one (NTO)/NH₃ and NTO/H₂O supermolecules have been obtained with density functional theory method at the B3LYP/6-311++G** level. The intermolecular interaction energy was calculated with basis set superposition error correction and zero point energy correction. The greatest corrected intermolecular interaction energies of the NTO/NH₃ and NTO/H₂O supermolecules are -37.58 and -30.14 kJ/mol respectively, indicating that the intensity of interaction between NTO and NH₃ is stronger than between NTO and H₂O. Electrons in supermolecular systems transfer from NH₃ or H₂O to NTO. The strong hydrogen bonds contribute to the interaction energies dominantly. Natural bond orbital (NBO) analysis was performed to reveal the origin of the interaction. Based on the vibrational analysis, the changes of thermodynamic properties from the monomer to supermolecules with the temperature ranging from 200.0 to 800.0 K have been obtained using the statistical thermodynamic method. It was found that structures II and III can be produced spontaneously from NTO and NH₃ at room temperature, while structures IV, V and VI can only be produced spontaneously from NTO and H₂O at lower temperature.

Keywords 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one; ammonia; water; intermolecular interaction; density functional theory; natural bond orbital analysis; thermodynamic property

* E-mail: xiao@mail.njust.edu.cn

Received August 13, 2004; revised October 25, 2004; accepted February 23, 2005.

国家自然科学基金(No. 20173028)资助项目.

3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮(NTO)是著名的高能钝感炸药,其高酸性和吸湿性限制了它的直接应用.实际使用的一般是NTO盐或NTO基混合体系.对NTO盐的合成、性能和应用研究成为含能材料领域的热门课题^[1-13].因水和氨水均为制备NTO盐的常用溶剂,且NH₃和H₂O分子又是等电子体系,故本文研究(NTO/NH₃)和(NTO/H₂O)超分子体系的结构和性能,比较分子间相互作用的强弱,揭示相互作用的本质,具有理论和实用两方面的意义.通过不同温度下热力学性质的研究,还发现常温下NTO和NH₃可自发形成超分子,而NTO和H₂O只在低温下才能自发形成超分子.此外,本文将高能体系分子间相互作用的系统理论研究^[14-23]扩展到唑类化合物,提供了一些有趣的新结果.

1 计算方法

用Chem3D软件组建NTO单体、(NTO/NH₃)和(NTO/H₂O)两种超分子体系的初始几何构型.用密度泛函理论(DFT)^[24]在B3LYP/6-311++G**水平下以Berny^[25]方法进行几何全优化.对各优化构型进行振动分析,均无虚频,表明它们对应各自势能面上的极小点.进行自然键轨道分析,探索分子间相互作用的本质.用统计热力学方法求得单体和超分子的标准热力学性质.全部计算采用Gaussian 98程序^[26]在Pentium IV微机上完成,收敛精度取程序内定值.

2 结果与讨论

2.1 几何构型

NTO单体、2种NTO/NH₃和3种NTO/H₂O超分子的优化结构如图1所示,相应的几何参数列于表1.NTO单体属C_s点群,超分子II和III属C_s点群,超分子IV、V和VI属C₁点群.

与NTO单体相比,II和III中的质子供体N—H的键长有较大变化.II的N(4)—H(11)增加4.1 pm,III的N(1)—H(10)增加3.1 pm,其余键长变化均在0~0.6 pm之间.IV和V结构相似且键长变化均主要发生在形成两个氢键的六元环上,IV和V的O(12)—H(13)增加1.0 pm,C(5)—O(9)和N—H增加1.2 pm,而N(1)—C(5)和N(4)—C(5)分别减小0.7~1.0 pm,其余键长变化在0~0.4 pm之间.总之,分子间氢键使形成氢键的N—H和O—H键变长.与单体相比,5种超分子的键角变化均在3.0°之内.二面角几乎无变化,故表中未予列出,说明分子间相互作用对单体键角扭曲和单键内旋转影响很小.

由图1可见,超分子II和III中均存在一个强氢键N···H—N,超分子IV、V和VI中均存在一个强氢键O···H—N和中强氢键O···H—O,其中VI的O···H—O氢键较弱.根据氢键长短,并考虑方向性以及形成的六元环或七元环的张力及其对NTO共轭体系的破坏程度,似可预示超分子的结合能和稳定性排序为II>III>IV≈V>VI.

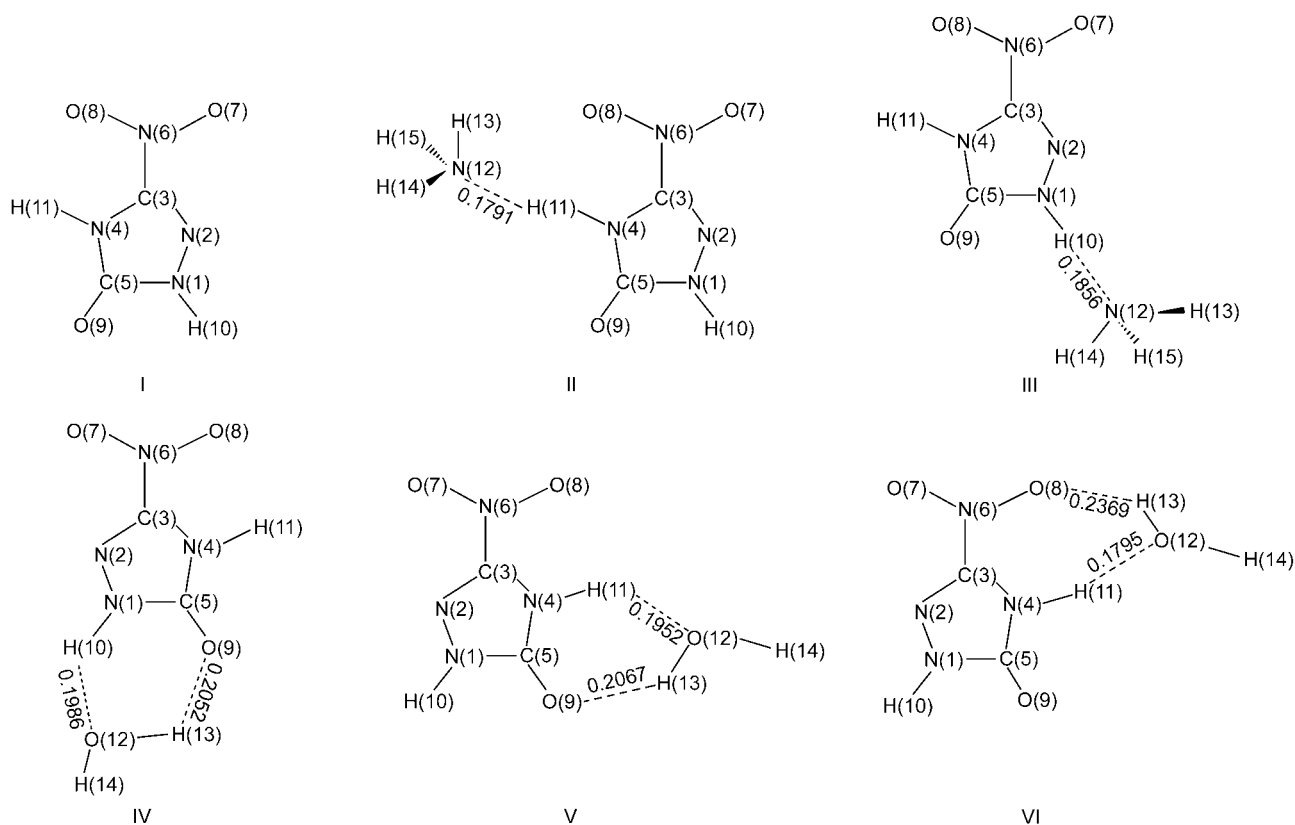


图1 NTO, NTO/NH₃和NTO/H₂O的全优化几何构型和分子间距离(nm)

Figure 1 Optimized geometries and intermolecular distance (nm) of NTO, NTO/NH₃ and NTO/H₂O

表 1 NTO, NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 的 B3LYP/6-311++G** 部分全优化几何参数^aTable 1 Part of fully optimized geometries of NTO, NTO/NH₃ and NTO/H₂O at the B3LYP/6-311++G** level

Geometry	I	II	III	IV	V	VI
N(1)—N(2)	0.1358	0.1356	0.1354	0.1354	0.1360	0.1355
N(1)—C(5)	0.1398	0.1400	0.1393	0.1389	0.1390	0.1401
N(1)—H(10)	0.1008	0.1008	0.1039	0.1019	0.1008	0.1008
N(2)—C(3)	0.1291	0.1295	0.1293	0.1292	0.1293	0.1294
C(3)—N(4)	0.1366	0.1362	0.1366	0.1368	0.1362	0.1364
C(3)—N(6)	0.1451	0.1451	0.1445	0.1449	0.1454	0.1450
N(4)—C(5)	0.1402	0.1396	0.1403	0.1395	0.1392	0.1398
N(4)—H(11)	0.1009	0.1050	0.1008	0.1009	0.1021	0.1029
C(5)—O(9)	0.1204	0.1209	0.1210	0.1216	0.1216	0.1207
N(6)—O(7)	0.1215	0.1217	0.1217	0.1215	0.1216	0.1215
N(6)—O(8)	0.1230	0.1231	0.1232	0.1231	0.1228	0.1233
N(12)—H(13)	(0.1015)	0.1016	0.1016			
N(12)—H(14)	(0.1015)	0.1017	0.1017			
N(12)—H(15)	(0.1015)	0.1016	0.1016			
O(12)—H(13)	(0.0965)			0.0972	0.0971	0.0965
O(12)—H(14)	(0.0965)			0.0961	0.0961	0.0962

^a Bond lengths are in nm and values in parentheses are data of NH₃ and H₂O.

2.2 相互作用能

表 2 列出在 B3LYP/6-311++G** 全优化构型下 NTO, NH₃, H₂O 以及 NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 的总能量以及经 BSSE 和 ZPE 校正前后的分子间相互作用能. 由表 2 可见, II, III, IV, V 和 VI 的 ZPE 校正值和 BSSE 校正值的绝对值相当, 其两者之和分别占经 ZPE 和 BSSE 校正后相互作用能 $\Delta E_{C,ZPEC}$ 的 28.21%, 29.56%, 38.02%, 38.59% 和 40.81%, 说明进行 ZPE 和 BSSE 校正是必要的. 构型 II 和 III 的结合能比构型 IV, V 和 VI 大, 表明 NTO 与 NH₃ 的相互作用比与 H₂O 的作用强. 校正后的结合能排序为 II>III>IV \approx V>VI, 与超分子中氢键强弱和几何变化造成的稳定性排序相一致, 表明氢键在分子间相互作用中起重要作用.

2.3 原子电荷和电荷转移

表 3 给出经自然集居分析所得各原子上净电荷. 结

合表 3 和图 1 可见, 原子电荷变化较大的多是两子体系邻近的原子. 与单体相比, II 中 NH₃ 分子净电荷增加 0.072e, 形成氢键的 H(11)净电荷增加 0.022e, NTO 中 N(4)净电荷减少 0.029e; 构型 III 中 NH₃ 分子净电荷增加 0.039e, 形成氢键的 H(10)净电荷增加 0.033e, N(1)净电荷降低 0.022e. 类似地, IV 中 O(12)降低 0.051e, H(13)和 H(14)分别增加 0.037e 和 0.017e, 整个 H₂O 分子净电荷增加 0.002e, NTO 中形成氢键的 H(10)净电荷增加 0.037e, O(9)净电荷降低 0.049e. V 中 H₂O 的电荷增加 0.006e, VI 中 H₂O 的电荷增加 0.034e.

以上分析表明, 子体系 NH₃ 或 H₂O 中 H 原子净电荷均有所增加, N 和 O 原子净电荷均有所降低, NH₃ 或 H₂O 子体系带正电荷, 电子由 NH₃ 或 H₂O 向 NTO 传递.

NTO, NH₃, H₂O 和 5 种超分子的偶极矩分别为 1.6528, 1.6900, 2.1589, 2.8600, 5.0638, 3.2823, 3.2993 和 1.8773 Debye.

表 2 B3LYP/6-311++G** 的总能量、零点能和相互作用能(kJ·mol⁻¹)

Table 2 Total energy, zero-point energy and interaction energy at the B3LYP/6-311++G** level

Energy	NH ₃	H ₂ O	NTO	II	III	IV	V	VI
<i>E</i>	-148557.9	-200741.9	-1370872	-1519478	-1519475	-1571655	-1571655	-1571653
ΔE				-48.18	-45.88	-41.53	-41.73	-39.13
ZPEC				6.22	6.43	8.32	8.31	6.87
BSSE				4.38	4.06	3.14	3.31	4.47
$\Delta E_{C,ZPEC}$				-37.58	-35.39	-30.14	-30.11	-27.79

表3 NTO, NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 超分子的自然原子电荷(*e*)^a
 Table 3 The calculated natural atomic charges of NTO, NTO/NH₃ and NTO/H₂O supermolecules

Atom	I	II	III	IV	V	VI
N(1)	-0.423	-0.422	-0.444	-0.420	-0.417	-0.420
N(2)	-0.221	-0.233	-0.221	-0.212	-0.229	-0.227
C(3)	0.463	0.462	0.452	0.458	0.468	0.461
N(4)	-0.620	-0.649	-0.621	-0.612	-0.622	-0.634
C(5)	0.769	0.766	0.764	0.700	0.771	0.768
N(6)	0.463	0.465	0.460	0.462	0.464	0.467
O(7)	-0.322	-0.332	-0.334	-0.323	-0.328	-0.323
O(8)	-0.386	-0.400	-0.396	-0.390	-0.374	-0.415
O(9)	-0.598	-0.621	-0.620	-0.647	-0.649	-0.609
H(10)	0.423	0.418	0.456	0.460	0.423	0.400
H(11)	0.452	0.473	0.447	0.451	0.486	0.478
N(12) [O(12)]	-1.053 (-0.916)	-1.054	-1.059	-0.968	-0.965	-0.938
H(13) [H(13)]	0.351 (0.458)	0.373	0.371	0.495	0.495	0.491
H(14) [H(14)]	0.351 (0.458)	0.380	0.375	0.475	0.476	0.481
H(15)	0.351	0.373	0.372			

^a Values in parentheses are data of H₂O.

2.4 自然键轨道(NBO)分析

在 B3LYP/6-311++G**水平下, 对 NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 超分子体系进行自然键轨道(NBO)分析. 表 4 给出电子供体(Donor)轨道 *i* 与电子受体(Acceptor)轨道 *j* 之间的相互作用稳定化能 *E*. 稳定化能 *E* 越大, 表示 *i* 与 *j* 的相互作用越强, 即 *i* 提供电子给 *j* 的倾向越大.

由表 4 并参照图 1 可见, 氢键最强的构型 II 中 N(12) 的孤对电子(1)对 N(4)—H(11)的 σ 反键轨道的稳定化能为 136.85 kJ·mol⁻¹, 氢键较弱的构型 III 中 N(12)孤对电子(1)对 N(1)—H(10)的 σ 反键轨道的稳定化能分别为

108.26 kJ·mol⁻¹. 由此可见, 构型 II 和 III 的分子间作用主要是发生在 NH₃ 中 N 的孤对电子与相近的 N—H 的反键轨道之间. 稳定化能的大小排序(II>III)与分子间氢键和分子间结合能的排序是一致的.

类似分析表明, 构型 IV, V 的分子间作用主要发生在 H₂O 中 O 的孤对电子与相近的 N—H 的反键轨道以及杂环 O 与 H₂O 中 O—H 的反键轨道之间, 构型 VI 主要通过 H₂O 中 O 的孤对电子和相近的 N—H 的反键轨道发生作用. 也均证实氢键是主要作用并揭示了氢键作用的本质.

表4 NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 的 B3LYP/6-311++G**自然键轨道分析部分结果^a
 Table 4 Parts of calculated results of NTO/NH₃ and NTO/H₂O at B3LYP/6-311++G** level by NBO analysis

Structure	Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	<i>E</i> /(kJ·mol ⁻¹)
II	BD(1) N(12)—H(13)	BD*(1) N(4)—H(11)	2.84
	BD(1) N(12)—H(14)	BD*(1) N(4)—H(11)	5.10
	BD(1) N(12)—H(15)	BD*(1) N(4)—H(11)	2.88
	LP(1) N(12)	BD*(1) N(4)—H(11)	136.85
III	BD(1) N(12)—H(13)	BD*(1) N(1)—H(10)	2.01
	BD(1) N(12)—H(14)	BD*(1) N(1)—H(10)	2.88
	BD(1) N(12)—H(15)	BD*(1) N(1)—H(10)	2.05
	LP(1) N(12)	BD*(1) N(1)—H(10)	108.26
IV	BD(1) N(1)—H(10)	BD*(1) O(12)—H(13)	1.50
	LP(1) O(9)	BD*(1) O(12)—H(14)	2.59
	LP(2) O(9)	BD*(1) O(12)—H(14)	15.76
	LP(2) O(12)	BD*(1) N(1)—N(2)	1.21
	LP(2) O(12)	BD*(1) N(1)—H(10)	25.50

续表

Structure	Donor NBO (i)	Acceptor NBO (j)	$E/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
V	BD(1) N(4)—H(11)	BD*(1) O(12)—H(13)	1.38
	LP(1) O(9)	BD*(1) O(12)—H(14)	2.42
	LP(2) O(9)	BD*(1) O(12)—H(14)	14.59
	LP(2) O(12)	BD*(1) N(4)—H(11)	31.85
VI	BD(1) N(4)—H(11)	BD*(1) O(12)—H(13)	1.21
	BD(1) O(12)—H(14)	BD*(1) N(4)—H(11)	2.59
	LP(1) O(12)	BD*(1) N(4)—H(11)	1.21
	LP(2) O(12)	BD*(1) N(4)—H(11)	75.74

^a E denotes the stabilization energy, BD denotes bonding orbital, BD* denotes antibonding orbital, LP denotes lone-pair. For BD and BD*: (1) and (2) denote σ orbital and π orbital, respectively. For LP: (1) and (2) denote the first and the second lone pair electron, respectively. Only the stable energies over $1.00 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ are listed.

2.5 热力学性质

表5列出 NTO, NH₃, H₂O, NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 各体系在不同温度下的标准恒压热容 ($C_{p,m}^\ominus$)、标准熵 (S_m^\ominus) 和标准焓 (H_m^\ominus)。不难发现, 同一温度下, 对应的2种 NTO/NH₃ 超分子的 $C_{p,m}^\ominus$ 值很相近; 同时, 分子间相互作用使它们比 NTO 与 NH₃ 的 $C_{p,m}^\ominus$ 之和大 $5.58 \sim 14.63 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。类似地, 3种 NTO/H₂O 超分子的 $C_{p,m}^\ominus$ 值也基本接近, 它们比 NTO 与 H₂O 的 $C_{p,m}^\ominus$ 之和大 $2.77 \sim 15.19 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。在温度为 $200.0 \sim 800.0 \text{ K}$ 范围内由单体形成超分子过程中, 体系的熵和焓值均减小, 因此分子间相互作用是放热过程并伴随体系混乱度减小。

由 $\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S_T$ 求得不同温度下的 ΔG_T 值。发现 298.2 K 时, 由 NTO 和 NH₃ 形成(NTO/NH₃)构型 II 和 III 的过程中, ΔG_T 均为负值, 表明在常温下该过程可自发进行; 然而, NTO 和 H₂O 只能在 200 K 以下的低温才能自发形成超分子(NTO/H₂O)构型 IV, V 和 VI。这进一步说明 NTO 与 NH₃ 的分子间相互作用强于 NTO 与 H₂O 的作用。在我们研究过的高能超分子体系中^[14~23], 能在常温或较低温度下由相应子体系自发形成的较少, 先前只发现 Fox-7 (1,1-二氨基二硝基乙烯)^[22] 和 NTO 的二聚过程^[27] $\Delta G_T < 0$, 结合能也主要由强氢键所贡献。

表5 不同温度下 NTO, NH₃, H₂O, NTO/NH₃ 和 NTO/H₂O 超分子的热力学性质^a

Table 5 The thermodynamic properties of NTO, NH₃, H₂O, NTO/NH₃ and NTO/H₂O at different temperatures

Structure	Temp./K	$C_{p,m}^\ominus / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$S_m^\ominus / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$H_m^\ominus / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\Delta S_T / (\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$\Delta H_T / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$\Delta G_T / (\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
NH ₃	200.0	33.66	187.84	6.66			
	298.2	35.43	201.56	10.04			
	400.0	38.33	212.36	13.79			
	600.0	44.63	229.09	22.09			
	800.0	50.47	242.74	31.61			
H ₂ O	200.0	33.27	175.28	6.65			
	298.2	33.53	188.59	9.93			
	400.0	34.28	198.54	13.38			
	600.0	36.41	212.82	20.44			
	800.0	38.75	223.61	27.95			
NTO	200.0	87.40	316.01	11.46			
	298.2	117.42	356.61	21.54			
	400.0	143.78	394.93	34.89			
	600.0	180.16	460.73	67.59			
	800.0	202.01	515.81	105.99			

续表

Structure	Temp./K	$C_{p,m}^{\ominus}/$ ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	$S_m^{\ominus}/$ ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	$H_m^{\ominus}/$ ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)	$\Delta S_T^{\ominus}/$ ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	$\Delta H_T^{\ominus}/$ ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)	$\Delta G_T^{\ominus}/$ ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$)
II	200.0	126.64	384.81	16.98	-119.04	-43.36	-19.50
	298.2	160.72	441.84	31.11	-116.33	-42.69	-7.99
	400.0	191.74	493.52	49.11	-113.77	-41.79	3.72
	600.0	237.32	580.54	92.34	-109.28	-39.56	26.01
	800.0	267.03	653.17	142.97	-105.38	-36.85	47.45
III	200.0	127.19	391.20	17.17	-112.65	-40.65	-18.12
	298.2	161.43	448.49	31.36	-109.68	-39.92	-7.21
	400.0	192.44	500.39	49.43	-106.9	-38.95	3.80
	600.0	237.71	587.63	92.77	-102.19	-36.61	24.70
	800.0	267.12	660.33	143.45	-98.22	-33.85	44.72
IV	200.0	123.44	367.26	15.96	-124.03	-35.71	-10.90
	298.2	158.78	423.33	29.86	-121.87	-35.17	1.16
	400.0	188.84	474.35	47.62	-119.12	-34.21	13.43
	600.0	230.26	559.44	89.87	-114.11	-31.72	36.74
	800.0	255.82	629.46	138.67	-109.96	-28.83	59.13
V	200.0	123.46	367.22	15.95	-124.07	-35.91	-11.09
	298.2	158.66	423.27	29.84	-121.93	-35.38	0.97
	400.0	188.68	474.25	47.59	-119.22	-34.43	13.25
	600.0	230.13	559.28	89.81	-114.27	-31.97	36.59
	800.0	255.75	629.27	138.59	-110.15	-29.10	59.01
VI	200.0	127.05	374.19	16.56	-117.10	-34.08	-10.66
	298.2	160.72	431.37	30.73	-113.83	-33.27	0.67
	400.0	189.79	482.81	48.63	-110.66	-32.17	12.09
	600.0	230.51	568.12	90.99	-105.43	-29.57	33.68
	800.0	255.95	638.18	139.82	-101.24	-26.65	54.33

^a $\Delta S_T^{\ominus} = (S_T^{\ominus})_i - (S_T^{\ominus})_{\text{I}} - (S_T^{\ominus})_{\text{ii}}$, $\Delta H_T^{\ominus} = (H_m^{\ominus} + E(\text{HF}) + \text{ZPE})_i - (H_m^{\ominus} + E(\text{HF}) + \text{ZPE})_{\text{I}} - (H_T^{\ominus} + E(\text{HF}) + \text{ZPE})_{\text{ii}}$ (i=II and III, ii=NH₃; i=IV, V and VI, ii=H₂O).

References

- Song, J.-R. *Study on NTO Metal Complexes*, Chemical Industry Press, Beijing, **1998** (in Chinese).
(宋纪蓉, NTO 金属配合物的研究, 化学工业出版社, 北京, **1998**.)
- Song, J.-R.; Ma, H.-X.; Huang, J.; Hu, R.-Z.; Xiao, H.-M.; Chen, Z.-X. *Sci. China, Ser. B* **2003**, *46*(3), 302.
- Song, J.-R.; Chen, Z.-X.; Xiao, H.-M.; Hu, R.-Z.; Li, F.-P. *Acta Chim. Sinica* **1998**, *56*, 270 (in Chinese).
(宋纪蓉, 陈兆旭, 肖鹤鸣, 胡荣祖, 李福平, 化学学报, **1998**, *56*, 270.)
- Gurdip, S.; Prem, F. S. *J. Mol. Struct.* **2003**, *649*, 71.
- Gurdip, S.; Prem, F. S. *Combust. Flame* **2003**, *135*, 145.
- Brill, T. B.; Zhang, T. L.; Tappan, B. C. *Combust. Flame* **2000**, *121*, 662.
- Ma, H.-X.; Song, J.-R.; Dong, W.; Hu, R.-Z.; Zhai, G.-H. *Acta Chim. Sinica* **2004**, *62*, 1139 (in Chinese).
(马海霞, 宋纪蓉, 董武, 胡荣祖, 翟高红, 化学学报, **2004**, *62*, 1139.)
- Yang, Y.-M.; Zhang, T.-L.; Zhang, J.-G.; Shao, B.; Yu, K.-B. *Chin. J. Struct. Chem.* **2002**, *21*, 321 (in Chinese).
(杨勇明, 张同来, 张建国, 邵兵, 郁开北, 结构化学, **2002**, *21*, 321.)
- Lei, Y.-J.; Hu, R.-Z.; Kang, B. *Explosive Propellants* **1997**, *20*(2), 19 (in Chinese).
(雷英杰, 胡荣祖, 康冰, 火炸药, **1997**, *20*(2), 19.)
- Chen, B.-R.; Ou, Y.-X.; Li, J.-R. *Explosive Propellants* **1988**, *11*(4), 33 (in Chinese).
(陈博仁, 欧育湘, 李加荣, 火炸药, **1988**, *11*(4), 33.)
- Li, J.-R. *Energetic Materials* **1999**, *7*(1), 11 (in Chinese).
(李加荣, 含能材料, **1999**, *7*(1), 11.)

- 12 Zhang, J.-G.; Zhang, T.-L. *Energetic Materials* **2001**, 9(2), 90 (in Chinese).
(张建国, 张同来, 含能材料, **2001**, 9(2), 90.)
- 13 Wang, W.-Z. *Initiators Pyrotechnics* **1995**, (1), 39 (in Chinese).
(王文玷, 火工品, **1995**, (1), 39.)
- 14 Xiao, H.-M.; Ju, X.-H. *Intermolecular Interactions in Energetic Systems*, Science Press, Beijing, **2003** (in Chinese).
(肖鹤鸣, 居学海, 高能体系中的分子间相互作用, 科学出版社, 北京, **2003**.)
- 15 Xiao, H.-M.; Li, J.-S.; Dong, H.-S. *Acta Chim. Sinica* **2000**, 58, 297 (in Chinese).
(肖鹤鸣, 李金山, 董海山, 化学学报, **2000**, 58, 297.)
- 16 Li, J.-S.; Xiao, H.-M.; Dong, H.-S. *Chin. J. Chem.* **2000**, 18, 815.
- 17 Li, J.-S.; Xiao, H.-M.; Dong, H.-S. *Int. J. Quantum Chem.* **2000**, 78, 94.
- 18 Xiao, H.-M.; Dong, H.-S. *J. Phys. Org. Chem.* **2001**, 14, 644.
- 19 Tan, J.-Z.; Xiao, H.-M.; Gong, X.-D.; Li, J.-S. *Acta Chim. Sinica* **2002**, 60, 200 (in Chinese).
(谭金芝, 肖鹤鸣, 贡雪东, 李金山, 化学学报, **2002**, 60, 200.)
- 20 Ji, G.-F.; Xiao, H.-M.; Dong, H.-S. *Acta Chim. Sinica* **2002**, 60, 1209 (in Chinese).
(姬广富, 肖鹤鸣, 董海山, 化学学报, **2002**, 60, 1209.)
- 21 Xia, Q.-Y.; Xiao, H.-M.; Ju, X.-H.; Gong, X.-D. *Int. J. Quantum Chem.* **2003**, 94, 279.
- 22 Ju, X.-H.; Xiao, H.-M.; Xia, Q.-Y. *J. Chem. Phys.* **2003**, 119, 10247.
- 23 Ju, X.-H.; Xiao, H.-M.; Xia, Q.-Y. *Chem. Phys. Lett.* **2003**, 382, 12.
- 24 Baker, J. J. *Comput. Chem.* **1987**, 8, 563.
- 25 Boys, S. F.; Bernadi, F. *Mol. Phys.* **1970**, 19, 533.
- 26 Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Gill, P. M. W.; Johnson, B. G.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Keith, T.; Petersson, G. A.; Montgomery, J. A.; Raghavachari, K.; Al-Laham, M. A.; Zakrzewski, V. G.; Ortiz, J. V.; Foresman, J. B.; Cioslowski, J.; Stefanov, B. B.; Nanayakkara, A.; Challacombe, M.; Peng, C. Y.; Ayala, P. Y.; Chen, W.; Wong, M. W.; Andres, J. L.; Replogle, E. S.; Gomperts, R.; Martin, R. L.; Stewart, J. P.; Head-Gordon, M.; Gonzalez, C.; Pople, J. A. *Gaussian 98*, Revision A. 7, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, **1998**.
- 27 Xu, L.-N.; Xiao, H.-M.; Fang, G.-Y.; Ju, X.-H. *Acta Chim. Sinica* **2005**, submitted (in Chinese).
(徐丽娜, 肖鹤鸣, 方国勇, 居学海, 化学学报, **2005**, 待发表.)

(A0408135 PAN, B. F.; ZHENG, G. C.)