

HANNENG HUAHEWU
HECHENG FANYING YU GUOCHENG

含能化合物 合成反应与过程

覃光明 葛忠学 著



化学工业出版社

HANNENG HUAHEWU
HECHENG FANYING YU GUOCHENG

含能化合物 合成反应与过程

覃光明 葛忠学 著



化学工业出版社

· 北京 ·

本书以含能化合物合成为主线,在简述含能化合物的概念、结构特点及其合成反应及过程的进展情况的基础上,系统介绍了含能化合物的设计、合成方法和机理、制造工艺及设备,重点论述了氮杂环化合物的合成反应、氮杂环化合物的硝解反应、芳香族化合物的硝化反应、离子型含能化合物的合成反应的反应机理,以及典型含能化合物的合成路线及方法。此外,还针对含能化合物制造过程常用的釜式反应和管式反应过程,阐述了制造过程的工艺、设备的设计基础理论,以及安全控制策略的基本原则。

本书在撰写过程中注重其理论性、新颖性、先进性、系统性及实用性。适合有机化学、含能材料合成等专业科研人员阅读参考,也可作为高等院校含能材料专业研究生的教材使用。

图书在版编目(CIP)数据

含能化合物合成反应与过程/覃光明,葛忠学著.

北京:化学工业出版社,2011.1

ISBN 978-7-122-10338-3

I. 含… II. ①覃…②葛… III. 化合物-研究

IV. O611.6

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第017699号

责任编辑:刘军

文字编辑:刘志茹

责任校对:王素芹

装帧设计:王晓宇

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装订:三河市万龙印装有限公司

710mm×1000mm 1/16 印张21 $\frac{3}{4}$ 字数436千字 2011年5月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:88.00元

版权所有 违者必究

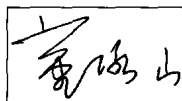
序 言

含能材料是在国防和经济建设中具有重要地位的特种材料，作为武器系统做功的能源，其性能直接决定武器的安全性、可靠性和毁伤效率。有了性能优异的含能材料，才能设计制造出具有先进水平的武器装备。含能化合物又是含能材料中的主要组成部分，新型含能化合物的研发与武器系统的更新换代密切相关，并相互促进。合成能量高、稳定性好、感度水平可接受、低目标特征、环境友好、长使用寿命的含能化合物是目前国内外高度关注的研究领域。

《含能化合物合成反应与过程》一书，以国防 973 项目的研究成果为基础，结合国内外含能化合物最新研究进展，系统论述了芳香含能化合物、氮杂含能化合物、离子型含能化合物的合成方法与关键反应的反应机理；重点探讨了硝化反应、硝解反应及其反应历程；针对含能化合物硝化反应强放热的特点，介绍了釜式反应过程与管式反应过程的设计理论与原理。全书突出新思想、新概念、新技术的发展脉络，反映了新兴的量子化学、计算化学及交叉学科、先进工艺设备等在含能化合物合成中的应用。

该书涵盖了含能材料设计、性能计算、合成探索、工艺过程等研究方向，对于推动技术创新有一定的指导和参考价值，也为从事含能材料研究开发的人员提供了一本很好的参考书。

中国工程院院士：



2010 年 10 月

前 言

含能化合物是一种具有特殊性能的合成材料，通常由化学合成的方法制造。含能化合物是生产制造混合炸药、发射药、固体推进剂的基本材料，是完成枪炮弹丸发射、火箭导弹推进的动力能源，是战斗部进行毁伤的威力能源。含能化合物的性能在很大程度上决定了武器装备的战技水平，也是发展先进武器装备的关键物质基础。

关于含能化合物合成的理论和方法，国内已有学者作过专门的研究，出版了一些论著。1984年由北京理工大学周发岐教授主编的《炸药合成化学》，主要论述了单质炸药爆轰参数的估算、合成方法及结构表征；1993年由南京理工大学吕春绪教授著的《硝化理论》，深入探讨了硝化机理及有关硝化反应的基础理论；2004年由北京理工大学欧育湘、刘进全著的《高能量密度化合物》，对高能量密度化合物，特别是CL-20的性能、结构及合成方法做了较全面的论述和评价。但针对含能化合物合成反应过程的强放热特征及安全性要求，其制造过程及控制与一般化工过程有较大的差别，目前尚未见专著做过专门的论述。

笔者结合多年科研工作及研究生论文，特别是国防973项目“高性能含能材料合成机理研究”的最新研究成果，就含能化合物结构及合成路线的计算机辅助设计、合成反应机理、合成方法、化工过程及控制等进行了归纳总结。以含能化合物结构特点分类，重点论述其合成反应的共性规律，不仅对现有的含能化合物合成研究有所帮助，并且对新型含能化合物的合成具有启发作用；本书最后两章对含能化合物制造过程的工艺、设备的设计基础理论，以及安全控制策略的基本原则进行了阐述。

本书在撰写过程中注重其理论性、新颖性、先进性、系统性及实用性。适用于本专业科研人员作为参考书，也可作为高等院校含能材料专业研究生的教材使用。

本书在撰写过程中参考了国内外有关文献资料，并结合了课题组的科学研究工作。西安近代化学研究所吕剑研究员、王伯周研究员、杨建明高级工程师、邱少君高级工程师、李春迎高级工程师、廉鹏高级工程师、刘愆高级工程师、来蔚鹏博士、余庆伟博士，北京理工大学孟子晖副教授，南京理工大学吕春绪教授、陆明教授、程广斌教授、李斌栋副教授、罗军副教授、叶志文副教授，浙江大学何潮洪教

授、黄志尧教授、戴立言副教授、雷鸣副教授、冀海峰副教授、车圆圆博士、吴可君博士、刘明硕士，中国科学院上海有机化学研究所赵刚研究员以及西北大学李华教授等为本书做了大量资料及科学实验研究工作，在此一并表示感谢。本书初稿完成后，承蒙南京理工大学吕春绪教授、西安近代化学研究所朱春华研究员审阅并提出许多宝贵意见，在此谨向他们表示衷心的感谢！

由于本书涉及专业领域较宽，限于著者学识水平，书中疏漏之处在所难免，敬请读者批评指正。

覃光明
2010年8月于西安

目 录

1 绪论	1
1.1 含能化合物的概念	1
1.2 含能化合物的结构特点及分类	1
1.2.1 含能化合物的结构特点	1
1.2.2 含能化合物的分类	2
1.3 含能化合物的合成反应	9
1.3.1 醛胺缩合反应	9
1.3.2 曼尼希缩合反应	10
1.3.3 直接硝化(硝解)反应	10
1.3.4 间接硝化反应	12
1.3.5 叠氮化反应	13
1.4 含能化合物的合成过程	13
1.4.1 含能化合物合成工艺过程的特点	14
1.4.2 含能化合物合成工艺进展	14
1.5 含能化合物合成反应与过程展望	20
1.5.1 计算机辅助设计将成为含能化合物合成与过程研究的重要手段	20
1.5.2 “清洁合成方法”是含能化合物合成反应与过程发展的目标	20
参考文献	21
2 含能化合物合成计算机辅助设计	22
2.1 含能化合物的分子设计	22
2.2 含能化合物的性能预估	25
2.2.1 密度的预估	25
2.2.2 生成焓的预估	26
2.2.3 爆轰性能的计算与预估	30
2.2.4 撞击感度的预估	33
2.3 含能化合物的计算机辅助合成路线设计	36
2.3.1 计算机辅助合成路线设计的起源及发展	37
2.3.2 计算机辅助合成路线设计在含能材料领域的意义	37
2.3.3 计算机中的化学反应知识	37
2.3.4 计算机辅助合成路线设计系统的分类	38

2.3.5 反合成法及其在含能化合物计算机辅助合成路线设计中的应用	39
2.3.6 合成树的裁剪及合成路线优劣评价	48
参考文献	49

3 氮杂环化合物的合成

3.1 氮杂四元环的合成	53
3.1.1 1,3,3-三硝基氮杂环丁烷	53
3.1.2 其他氮杂四元环	59
3.2 氮杂五元环的合成	60
3.2.1 单咪唑环化合物	60
3.2.2 5-硝基四唑及其盐类化合物	63
3.2.3 五元氮杂环三唑类化合物	64
3.2.4 4-氨基-3,5-二硝基吡唑 (LLM-116)	67
3.2.5 2,3,4-三硝基吡咯和 2,3,4,5-四硝基吡咯	68
3.3 氮杂六元环的合成	69
3.3.1 黑索今 (RDX) 母体环的合成	69
3.3.2 1,3,5,5-四硝基-1,3-二氮杂环己烷 (DNNC) 的合成	75
3.3.3 1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯 (FOX-7) 的合成	79
3.4 氮杂八元环的合成和机理	80
3.4.1 DPT 的合成	81
3.4.2 TAT 的合成	83
3.4.3 小分子综合法	86
3.4.4 其他小分子合成法	87
3.5 氮杂笼状化合物的合成	89
3.5.1 氮杂笼状含能材料的合成进展	89
3.5.2 CL-20 的合成	90
3.5.3 TEX 的合成	93
3.6 氮杂环合成的新思路	94
3.6.1 “点击化学”在氮杂环合成中的应用	94
3.6.2 超分子策略在氮杂环合成中的应用	96
参考文献	102

4 氮杂环化合物的硝解

4.1 氮杂环化合物的结构与硝化特性	108
4.2 硝解剂的特性及选择	109
4.3 硝解反应机理及动力学	111
4.3.1 硝酰阳离子结构与浓度特征	111

4.3.2 RDX 合成的硝解反应及机理	120
4.3.3 HMX 合成的硝解反应及其机理	136
4.3.4 笼形氮杂环化合物的硝解反应	160
参考文献	162

5 含能芳香化合物的合成

5.1 芳香化合物硝化概述	169
5.1.1 芳香化合物的性质	169
5.1.2 芳香化合物硝化反应机理简述	169
5.1.3 芳香化合物硝化的发展动态	170
5.2 离子液体中硝基芳香化合物的合成	171
5.2.1 咪唑型离子液体中硝基芳香化合物的合成	171
5.2.2 己内酰胺型离子液体中硝基芳香化合物的合成	178
5.2.3 吡啶型离子液体中硝基芳香化合物的合成	180
5.2.4 直链季铵盐型离子液体中硝基芳香化合物的合成	180
5.3 无机固体酸催化作用下芳香化合物的硝化反应	181
5.3.1 分子筛催化作用下芳香化合物的区域选择性硝化	181
5.3.2 负载型固体酸催化剂作用下芳香化合物的区域选择性硝化反应	193
5.3.3 杂多酸催化作用下芳香化合物的区域选择性硝化反应	199
5.3.4 固体超强酸催化作用下芳香化合物的区域选择性硝化	204
5.4 过渡金属及镧系金属盐作用下硝基芳香化合物的合成	206
5.4.1 三氟甲烷磺酸过渡金属及镧系金属盐对芳香化合物的催化硝化反应	207
5.4.2 长链全氟烷基磺酸过渡金属和镧系金属盐对芳香化合物的催化硝化反应	210
5.4.3 芳香基磺酸过渡金属盐对芳香化合物的催化硝化反应	215
5.4.4 全氟磺酰亚胺过渡金属盐对芳香化合物的催化硝化	217
5.4.5 其他过渡金属盐对芳香化合物的催化硝化	218
5.5 相转移催化剂在芳香化合物硝化反应中的应用	221
5.6 微反应器在芳香化合物硝化反应中的应用	223
5.7 其他反应新体系和新方法在芳香化合物硝化反应中的应用	226
参考文献	227

6 离子型含能化合物的合成

6.1 概述	236
6.2 硝仿盐的合成	236
6.2.1 硝仿的合成	236
6.2.2 硝仿的分离、纯化	240

6.2.3	硝仿盐的转化	240
6.3	二硝酰胺盐的合成	241
6.3.1	ADN 的合成	242
6.3.2	其他二硝酰胺盐的合成	247
6.4	离子型富氮含能化合物的合成	247
6.4.1	三唑类离子型富氮含能化合物的合成	248
6.4.2	四唑类离子型富氮含能化合物的合成	249
6.4.3	四嗪类离子型富氮含能化合物	249
6.5	离子型全氮化合物	250
6.5.1	N_5^+ 离子盐的合成	250
6.5.2	其他全氮离子的合成设想	251
	参考文献	252

7 强放热釜式反应过程 254

7.1	概述	254
7.2	含能化合物反应釜的结构	254
7.3	搅拌部件	255
7.3.1	搅拌器的类型	255
7.3.2	搅拌器的选型	258
7.3.3	搅拌附件	260
7.4	反应釜的流动特性	261
7.4.1	流体循环量和压头	261
7.4.2	叶轮雷诺数	262
7.4.3	搅拌功率的计算	263
7.5	含能化合物反应釜的传热特性	266
7.5.1	反应釜的传热方式	266
7.5.2	反应釜的传热计算	268
7.6	含能化合物釜式反应过程的数学模型	275
7.6.1	搅拌反应釜的操作方式	275
7.6.2	釜式反应器的物料衡算	275
7.6.3	釜式反应器的能量衡算	277
7.6.4	基于数学模型的反应过程优化	279
7.7	含能化合物反应过程的飞温模拟及应急措施	285
7.7.1	含能化合物反应过程的飞温模拟	285
7.7.2	含能化合物反应过程的技术预防和应急措施	288
7.8	含能化合物的反应釜放大	290
7.8.1	均相系统的放大	292

7.8.2 非均相系统的放大	296
参考文献	299

8 强放热管式反应过程 301

8.1 概述	301
8.2 管式反应器中强放热反应模型举例	301
8.2.1 管式反应器内硝化甘油反应简介	301
8.2.2 管式反应器内质量和能量衡算	302
8.3 管式反应器安全问题	306
8.3.1 管式反应器的热交换能力	306
8.3.2 管式反应器的本质安全问题举例	306
8.3.3 微管传热现象研究进展	308
8.4 微反应器在强放热反应中的应用	310
8.4.1 微反应器发展概况	310
8.4.2 微反应器的特点	310
8.4.3 微反应器在含能化合物合成中的应用	313
8.5 小型管式反应器检测技术	314
8.5.1 光学检测法	315
8.5.2 电容检测法	317
8.5.3 电导检测法	320
参考文献	334

1.1 含能化合物的概念

含能材料 (energetic materials) 是发展先进武器装备的关键性物质基础, 是完成枪炮弹丸发射、火箭导弹推进的动力能源, 是战斗部进行毁伤的威力能源, 也是航天运载、空间探测和航空救生所用助推、调姿、分离装置的动力能源。含能材料的性能在很大程度上决定了武器装备的战技水平, 是实现“远程打击, 高效毁伤”的核心技术。

含能材料是指在适当的外界能量激发作用下, 能发生爆炸反应并对周围介质做功的物质。所谓爆炸反应, 是一种速度极快且释放出大量热和气体的反应。含能材料的概念外延很大, 几乎包含了所有单体的和混合的含能物质, 如单质炸药、混合炸药、推进剂、发射药、含能化合物等。能量密度优于普通含能材料的又称为高能量密度材料 (HEDMs), 具体地说, 能量密度高于 HMX 的炸药, 性能优于 AP/Al/HT-PB 的固体火箭推进剂以及性能优于 JA₂ (NG/NC) 的发射药都是 HEDMs^[1]。

含能化合物 (energetic compounds) 是指由单一分子结构物质组成的含能材料。由于历史的原因, 人们对含能化合物的称谓有所不同。从 1771 年发现的苦味酸 (PA) 到 1960 年的奥克托今 (HMX), 其间出现的含能化合物称为单质炸药或单体炸药, 如 PA、梯恩梯 (TNT)、特屈儿 (Tetryl)、黑索今 (RDX)、HMX、硝化甘油 (NG)、太安 (PETN)、硝酸铵及氯酸钾等, 其性能都低于 HMX。20 世纪 80 年代提出的高能量密度化合物 (HEDC), 是指能量和密度至少比 HMX 高 5% 以上的含能化合物, 如六硝基苯 (HNB)、四硝基甘脲 (TNGU)、六硝基六氮杂三环十二烷二酮 (HHTDD, 中文代号 7201)、八硝基立方烷 (ONC)、二硝基咪唑基氧化咪唑 (DNITF)、六硝基六氮杂异伍兹烷 (CL-20) 等。

1.2 含能化合物的结构特点及分类

1.2.1 含能化合物的结构特点

一般地, 含能化合物应具备以下几个特点: 一是化合物自身蕴含较大能量, 无外界物质参与下可发生自身分解反应释放能量, 含能化合物能量来源于分子中可燃元素氧化的反应热, 或者具有高的正生成焓分子结构分解为小分子物质所释放的分解热; 二是化合物所蕴含的能量在发生分解反应时能够以足够快的速度释放出来, 即具有所谓的爆轰效应; 三是化合物分解反应具有体积膨胀效应, 即反应产生大量的气

体，具有较强的对外界做功能力；四是化合物具有比较高的密度，由于受到弹体容积的限制，弹药装药应该尽可能地提高装药密度，这就要求作为火炸药配方主要组分的含能化合物拥有足够高的密度；五是化合物自身具有一定的安定性和安全性。

含能化合物的应用性能决定了其结构特点。

(1) 分子结构中包含含能基团

一般的含能化合物分子结构中都含有含能基团，如含有 C—NO₂ 的硝基化合物，含有 N—NO₂ 的硝胺化合物，含有 C—O—NO₂ 的硝酸酯化合物，含有—N₃ 的叠氮化合物，含有呋咱基的呋咱化合物，含有—NF₂ 的二氟氨基化合物等。近年来出现的全氮化合物，则是含有更高阶的氮原子簇含能基团，如 N₅⁺、N₅⁻、N₈、N₁₀、N₆₀，性能可达到传统含能化合物的数倍甚至十几倍。

(2) 分子结构中包含张力环

根据有机化学的成环理论和张力学说，脂环化合物中的三元、四元环与五元、六元环相比，存在较大的键张力，结构更不稳定，能量更高。对于含能化合物来说，环张力的附加能量是含能基团能量的有效补充。以 1,3,3-三硝基氮杂环丁烷 (TNAZ) 为例，其能量除了三个硝基的贡献外，四元环分子内张力使其内能提高约 155 kJ/mol^[2]。

(3) 具有比较高的结晶密度

从分子结构的观点来看，密度主要由两方面的因素决定，一是分子内化学键和所包含的基团本身的密度，另一个是分子间相互堆积的紧密程度。化学键对化合物密度贡献的次序为：C=O>C—N>N—N>C—C>N=N>C=N>N—H>C—H，基团对化合物密度贡献的次序为：ONO₂>CNO₂>NNO₂>C=O。分子间堆积的紧密程度主要与分子偶极矩、氢键及空间位阻有关，偶极矩增大、氢键增多及位阻降低均有利于分子紧密排列。另外，分子的其他一些结构参数（对称性、环及其稠合程度等）也能明显影响含能化合物的密度。

(4) 具有适当的氧平衡 (OB)

一般含能化合物是由碳、氢、氧、氮四种元素组成的，即通常所称的 CHON 系含能化合物。组成 CHON 系含能化合物的元素按其作用来讲不外乎两大类，即可燃剂和氧化剂。氧平衡就是将含能化合物中的氧化元素用来完全氧化分子中的可燃元素后多余或不足的氧化元素的量。氧平衡不仅表征了含能化合物分子中元素的能量效率，而且与含能化合物撞击感度有密切的关系。

1.2.2 含能化合物的分类

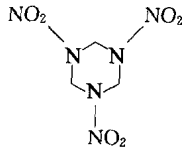
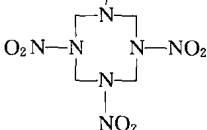
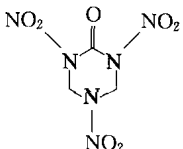
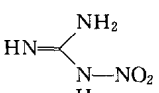
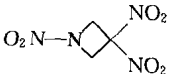
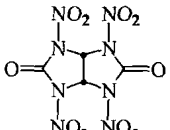
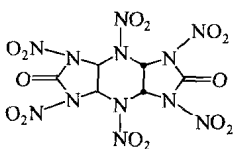
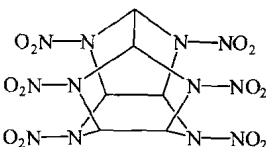
含能化合物大致有两种分类方式，一种是按功能和性能特点来分，如高能炸药、钝感炸药、含能增塑剂、含能催化剂等；另一种是按结构特点来分，如硝胺化合物、呋咱化合物等。值得注意的是，有些化合物含有多种含能基团，在分类上可能有交叉的地方，如 2,4,6-三硝基苯甲硝胺 (Tetryl, 特屈儿)，既属于硝胺类又

属于硝基芳烃类。从合成的角度看，以结构特点分类更为直观，更为细致。

(1) 硝胺化合物^[9]

分子结构中含有 N—NO₂ 基团的含能化合物称为硝胺化合物（见表 1-1），按

表 1-1 一些硝胺类含能化合物

名 称	代号	结构式	密度 (g/cm ³)	标准生成焓 (kJ/mol)
1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂环己烷(黑索今)	RDX		1.816	70.63
1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂环辛烷(奥克托今)	HMX		1.905	74.88
1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂环己酮-2(662)	TNTACH K-6		1.94	-41.84
硝基胍	NQ		1.715	-98.7
1,3,3-三硝基氮杂环丁烷	TNAZ		1.84	33.64
2,4,6,8-四硝基-2,4,6,8-四氮杂双环[3.3.0]辛二酮-3,7(四硝基甘脲)	TNGU (sorguyl)		2.01	-15.1
2,4,6,8,10,12-六硝基-2,4,6,8,10,12-六氮杂三环-[7.3.0.0 ^{3,7}]十二烷二酮-5,11(7201)	HHTDD		2.07 (A型) 1.99 (B型)	153.6
2,4,6,8,10,12-六硝基-2,4,6,8,10,12-六氮杂四环[5.5.0.0 ^{5,9} .0 ^{3,11}]十二烷	HNIW CL-20		2.04	415.47

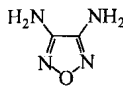
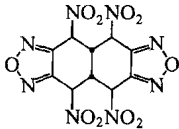
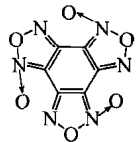
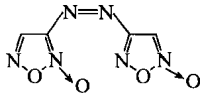
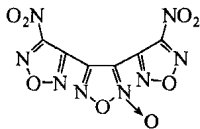
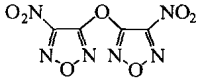
照结构特点又可进一步分为氮杂环硝胺、脂肪族硝胺、芳香族硝胺以及笼形硝胺等。硝胺化合物的感度和安定性介于硝酸酯与硝基化合物之间，能量较高，综合性能较好。

(2) 呋咱化合物

呋咱环是一个含有 2 个氮原子、1 个氧原子的五元环，又称为噁二唑环（见表 1-2）。它是一个含能基团，具有生成焓高、热稳定性好和环内存在活性氧的特点。由于呋咱环内的五个原子分布在同一平面上，因此呋咱类化合物大多具有较高的密度（ $\geq 1.8\text{g}/\text{cm}^3$ ）。此外，取代呋咱化合物不含氢原子，所以又称为“无氢炸药”或“零氢炸药”，在低特征信号推进剂中也会发挥重要的作用^[4]。

呋咱环被氧化后成为氧化呋咱环，氧化呋咱环形成一种“潜硝基”内侧环结构，一个环内含有 2 个活性氧原子，含氧量和分子的结晶密度更高，很适合作为高能材料的结构单元。研究表明，一个氧化呋咱基代替一个硝基，化合物密度可提高 $0.06\sim 0.08\text{g}/\text{cm}^3$ ，爆速可提高 $300\text{m}/\text{s}$ 左右。另外，呋咱环上的两个氮原子也可以与金属离子配位形成金属配位呋咱化合物^[5,6]。

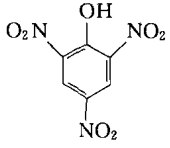
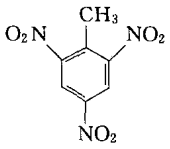
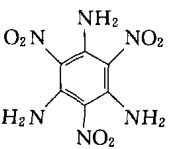
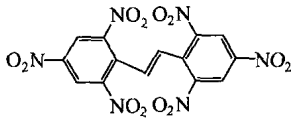
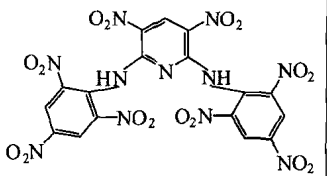
表 1-2 一些呋咱类含能化合物

名称	代号	结构式	密度 /(g/cm^3)	标准生成焓 /(kJ/mol)
3,4-二氨基呋咱	DAF		1.61	104.5
1,4,5,8-四硝基-1,4,5,8-四氮杂 氢化萘-2,3,6,7-并双呋咱			1.93	309.54
苯并三氧化呋咱	BTF		1.90	604.59
4,4'-二硝基偶氮双氧化呋咱	DNAF		2.00	667.77
3,4-二硝基呋咱及氧化呋咱	DNTF		1.94	644.30
3,3'-二硝基-4,4'-呋咱醚	FOF-1		1.91	305.56

(3) 硝基芳烃化合物

硝基化合物分子中含有 C—NO₂ 基团，包括硝基芳烃化合物及硝基脂肪化合物两种（见表 1-3）。硝基芳烃化合物目前仍然是产量最大和用途最广的一类含能化合物，其中最重要的品种是 TNT。硝基芳烃化合物的爆炸能量和机械感度均低于硝酸酯类及硝胺类含能化合物，安定性甚优，制造工艺成熟，大多原料来源充足且价格较低。

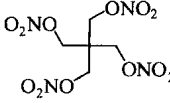

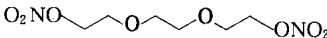
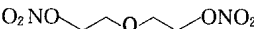
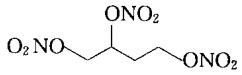
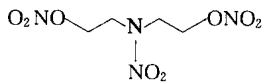
表 1-3 一些硝基芳烃类含能化合物^[7]

名称	代号	结构式	密度 (g/cm ³)	标准生成焓 (kJ/mol)
2,4,6-三硝基苯酚(苦味酸)	PA		1.76	-216.34
2,4,6-三硝基甲苯	TNT		1.66	-59.43
1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯	TATB		1.94	-139.75
2,2',4,4',6,6'-六硝基均二苯基 乙烯(六硝基底)	HNS		1.73	57.66
2,6-二苦氨基-3,5-二硝基吡啶	PYX		1.75	80.33

(4) 硝酸酯化合物

分子结构中包含 C—O—NO₂ 基团的化合物称为硝酸酯化合物（见表 1-4）。硝酸酯类化合物的特点是氧平衡较高，做功能力较大，缺点是安定性较差，感度较高。大多数硝酸酯难溶于水，但能够被水解，尤其在酸催化条件下，水解速率很快。硝酸酯含能化合物包括一元醇、二元醇、三元醇及四元醇的硝酸酯，除太安用作猛炸药外，其余多用作枪炮发射药和固体推进剂配方中，作为增塑剂组分。

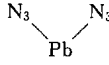
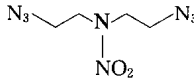

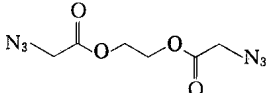
表 1-4 一些硝酸酯类含能化合物^[8]

名 称	代号	结构式	密度 /(g/cm ³)	标准生成焓 /(kJ/mol)
季戊四醇四硝酸酯(太安)	PETN		1.77	-532.60
1,2,3-丙三醇三硝酸酯(硝化甘油)	NG		1.59	-370.85
三乙二醇二硝酸酯(太根)	TGDN		1.34	-606.24
二乙二醇二硝酸酯(迪根)	DGDN		1.38	-433.00
1,2,4-丁三醇三硝酸酯	BTTN		1.52	-406.98
1,5-二硝酰氨基-3-硝基-3-氮杂戊烷(吉纳)	DINA		1.67	-315.97

(5) 叠氮化合物

除硝基之外,叠氮基(—N₃)是又一个重要的含能基团,叠氮化合物突出的优点是能量水平高,每摩尔叠氮基可提供约 356 kJ 的正标准生成焓(见表 1-5)。叠氮基是良好且丰富的氮气源,燃烧产物相对分子质量低,另外,叠氮化合物燃烧产生较少的烟雾,很适用于低特征信号推进剂中。叠氮化合物的感度适中,撞击感度一般介于硝酸酯与硝基化合物之间。

表 1-5 一些叠氮类含能化合物^[9]

名 称	代号	结构式	密度 /(g/cm ³)	标准生成焓 /(kJ/mol)
叠氮化铅	LA		4.38	421.75
1,5-二叠氮基-3-硝基-3-氮杂戊烷(叠氮硝酸胺)	DIANP DANPE		1.34	540.20
四叠氮甲基甲烷(8911)	TAPE		1.44	1260.9
双叠氮乙酸乙二醇酯	EGBAA		1.34	-167.36

(6) 离子型含能化合物

离子型含能化合物是指含能离子与其配离子构成的盐(见表 1-6)。比较典型