



《中国工程物理研究院科技丛书》第060号

高能硝胺炸药的热分解

Thermal Decomposition of Nitamine High Explosives

舒远杰 著



国防工业出版社
National Defense Industry Press

《中国工程物理研究院科技丛书》第 060

高能硝胺炸药的热分解

Thermal Decomposition of Nitamine High Explosives

舒远杰 著

国防工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

高能硝胺炸药的热分解 / 舒远杰著. —北京:
国防工业出版社, 2010. 6

(中国工程物理研究院科技丛书)

ISBN 978 - 7 - 118 - 06746 - 0

I. ①高... II. ①舒... III. ①硝胺类炸药 - 热分解法
IV. ①TQ564. 4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 092402 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

国防工业出版社印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787 × 1092 1/16 印张 15 1/4 字数 326 千字

2010 年 6 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—3000 册 定价 58.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010) 68428422

发行邮购: (010) 68414474

发行传真: (010) 68411535

发行业务: (010) 68472764

致 读 者

本书由国防科技图书出版基金资助出版。

国防科技图书出版工作是国防科技事业的一个重要方面。优秀的国防科技图书既是国防科技成果的一部分,又是国防科技水平的重要标志。为了促进国防科技和武器装备建设事业的发展,加强社会主义物质文明和精神文明建设,培养优秀科技人才,确保国防科技优秀图书的出版,原国防科工委于1988年初决定每年拨出专款,设立国防科技图书出版基金,成立评审委员会,扶持、审定出版国防科技优秀图书。

国防科技图书出版基金资助的对象是:

1. 在国防科学技术领域中,学术水平高,内容有创见,在学科上居领先地位的基础科学理论图书;在工程技术理论方面有突破的应用科学专著。
2. 学术思想新颖,内容具体、实用,对国防科技和武器装备发展具有较大推动作用的专著;密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的高新技术内容的专著。
3. 有重要发展前景和有重大开拓使用价值,密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的新工艺、新材料内容的专著。
4. 填补目前我国科技领域空白并具有军事应用前景的薄弱学科和边缘学科的科技图书。

国防科技图书出版基金评审委员会在总装备部的领导下开展工作,负责掌握出版基金的使用方向,评审受理的图书选题,决定资助的图书选题和资助金额,以及决定中断或取消资助等。经评审给予资助的图书,由总装备部国防工业出版社列选出版。

国防科技事业已经取得了举世瞩目的成就。国防科技图书承担着记载和弘扬这些成就,积累和传播科技知识的使命。在改革开放的新形势下,原国防科工委率先设立出版基金,扶持出版科技图书,这是一项具有深远意义的创举。此举势必促使国防科技图书的出版随着国防科技事业的发展更加兴旺。

设立出版基金是一件新生事物,是对出版工作的一项改革。因而,评审工作需要不断地摸索、认真地总结和及时地改进,这样,才能使有限的基金发挥出巨大的效能。评审工作更需要国防科技和武器装备建设战线广大科技工作者、专家、教授,以及社会各界朋友的热情支持。

让我们携起手来,为祖国昌盛、科技腾飞、出版繁荣而共同奋斗!

**国防科技图书出版基金
评审委员会**

国防科技图书出版基金 第六届评审委员会组成人员

主任委员 刘成海

副主任委员 宋家树 蔡 镭 程洪彬

秘书长 程洪彬

副秘书长 邢海鹰 贺 明

委 员 (以下按姓氏笔画排序)

于景元 才鸿年 马伟明 王小谟

甘茂治 甘晓华 卢秉恒 邬江兴

刘世参 芮筱亭 李言荣 李德仁

李德毅 杨 伟 肖志力 吴有生

吴宏鑫 何新贵 张信威 陈良惠

陈冀胜 周一宇 赵万生 赵凤起

崔尔杰 韩祖南 傅惠民 魏炳波

本书主审委员 陈冀胜

《中国工程物理研究院科技丛书》

出版说明

中国工程物理研究院建院 50 年来,坚持理论研究、科学实验和工程设计密切结合的科研方向,完成了国家下达的各项国防科研任务。通过完成任务,在许多专业领域里,不论是在基础理论方面,还是在实验测试技术和工程应用技术方面,都有重要发展和创新,积累了丰富的知识经验,造就了一大批优秀科技人才。

为了扩大科技交流与合作,促进我院事业的继承与发展,系统地总结我院 50 年来在各个专业领域里集体积累起来的经验,吸收国内外最新科技成果,形成一套系列科技丛书,无疑是一件十分有意义的事情。

这套丛书将部分地反映中国工程物理研究院科技工作的成果,内容涉及本院过去开设过的 20 几个主要学科。现在和今后开设的新学科,也将编著出书,续入本丛书中。

这套丛书自 1989 年开始出版,在今后一段时期还将继续编辑出版。我院早些年零散编著出版的专业书籍,经编委会审定后,也纳入本丛书系列。

谨以这套丛书献给 50 年来为我国国防现代化而献身的人们!

《中国工程物理研究院科技丛书》

编审委员会

2008 年 5 月 8 日修改

《中国工程物理研究院科技丛书》

第六届编审委员会

学 术 顾 问 俞大光

编委会主任 杜祥琬

副 主 任 彭先觉 汪小琳 李志民

委 员 (以姓氏笔划为序):

冯建农	帅茂兵	田 勇	华欣生	刘柯钊
汤业朋	陈贤林	何建国	李 凡	李正宏
李泽仁	苏 伟	吴志杰	张 凯	张 健
张文平	张方晓	张保汉	孟凡宝	赵 峰
顾 援	莫 军	唐永建	袁光伟	傅思祖
彭述明	谢 平			

科技丛书编辑部负责人 李天惠

本册编辑 李天惠

《中国工程物理研究院科技丛书》 已出版书目

- | | |
|--------------------------------------|---------------------|
| 001 高能炸药及相关物性能
董海山 周芬芬 主编 | 科学出版社 1989 年 11 月 |
| 002 光学高速摄影测试技术
谭显祥 编著 | 科学出版社 1990 年 02 月 |
| 003 凝聚炸药起爆动力学
章冠人 等编著 | 国防工业出版社 1991 年 09 月 |
| 004 线性代数方程组的迭代解法
胡家赣 编著 | 科学出版社 1991 年 12 月 |
| 005 映象与混沌
陈式刚 编著 | 国防工业出版社 1992 年 06 月 |
| 006 再入遥测技术(上册)
谢铭勋 编著 | 国防工业出版社 1992 年 06 月 |
| 007 再入遥测技术(下册)
谢铭勋 编著 | 国防工业出版社 1992 年 12 月 |
| 008 高温辐射物理与量子辐射理论
李世昌 编著 | 国防工业出版社 1992 年 10 月 |
| 009 粘性消去法和差分格式粘性
郭柏灵 著 | 科学出版社 1993 年 03 月 |
| 010 无损检测技术及其应用
张俊哲 等著 | 科学出版社 1993 年 05 月 |
| 011 半导体材料辐射效应
曹建中 著 | 科学出版社 1993 年 05 月 |
| 012 炸药热分析
楚士晋 编著 | 科学出版社 1994 年 12 月 |
| 013 脉冲辐射场诊断技术
刘庆兆 主编 | 科学出版社 1994 年 12 月 |
| 014 放射性核素活度的测量方法和技术
古当长 编著 | 科学出版社 1994 年 12 月 |
| 015 二维非定常流和激波
王继海 编著 | 科学出版社 1994 年 12 月 |

- 016 抛物型方程差分方法引论**
李德元 陈光南 著 科学出版社 1995 年 12 月
- 017 特种结构分析**
刘新民 韦日演 主编 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 018 理论爆轰物理**
孙锦山 朱建士 著 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 019 可靠性维修性可用性评估手册**
潘吉安 编著 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 020 脉冲辐射场测量数据处理与误差分析**
陈元金 编著 国防工业出版社 1997 年 01 月
- 021 近代成像技术与图像处理**
吴世法 著 国防工业出版社 1997 年 03 月
- 022 一维流体力学差分方法**
水鸿寿 著 国防工业出版社 1998 年 02 月
- 023 抗辐射电子学—辐射效应及加固原理**
赖祖武 等著 国防工业出版社 1998 年 07 月
- 024 金属的环境氢脆及其试验技术**
周德惠 谭云 编著 国防工业出版社 1998 年 12 月
- 025 试验核物理测量中的粒子分辨**
段绍节 编著 国防工业出版社 1999 年 06 月
- 026 实验物态方程导引(第二版)**
经福谦 著 科学出版社 1999 年 09 月
- 027 无穷维动力系统**
郭柏灵 著 国防工业出版社 2000 年 01 月
- 028 真空吸取器设计及应用技术**
单景德 编著 国防工业出版社 2000 年 01 月
- 029 再入飞行器天线**
金显盛 编著 国防工业出版社 2000 年 03 月
- 030 应用爆轰物理**
孙承纬 著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 031 混沌的控制、同步与利用**
陈式刚 等著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 032 激光干涉测速技术**
胡绍楼 著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 033 空气炮理论与实验技术**
王金贵 著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 034 一维不定常流与激波**
李维新 著 国防工业出版社 2000 年 12 月

- 035 X 射线与真空紫外辐射源及其计量技术**
孙景文 编著 国防工业出版社 2001 年 03 月
- 036 含能材料热谱集**
董海山 等编著 国防工业出版社 2001 年 03 月
- 037 材料中的氦及氡渗透**
王佩璇 宋家树 著 国防工业出版社 2002 年 04 月
- 038 高温等离子体 X 射线谱学**
孙景文 编著 国防工业出版社 2003 年 01 月
- 039 激光核聚变靶物理基础**
张钧 常铁强 著 国防工业出版社 2004 年 11 月
- 040 系统可靠性工程**
金碧辉 主编 国防工业出版社 2004 年 06 月
- 041 核材料 γ 特征谱的探测和分析技术**
田东风 等编著 国防工业出版社 2004 年 06 月
- 042 高能激光系统**
苏毅 万敏 编著 国防工业出版社 2004 年 06 月
- 043 近可积无穷维动力系统**
郭柏灵 高平 陈瀚林 著 国防工业出版社 2004 年 06 月
- 044 半导体器件和集成电路的辐射效应**
陈盘训 著 国防工业出版社 2005 年 06 月
- 045 高功率脉冲技术**
刘锡三 编著 国防工业出版社 2005 年 08 月
- 046 热电池**
陆瑞生 刘效疆 编著 国防工业出版社 2005 年 08 月
- 047 原子结构、碰撞与光谱理论**
方泉玉 颜君 著 国防工业出版社 2006 年 01 月
- 048 非牛顿流动力系统**
郭柏灵 林国广 尚亚东 著 国防工业出版社 2006 年 02 月
- 049 动高压原理与技术**
经福谦 陈俊祥 主编 国防工业出版社 2006 年 03 月
- 050 直线感应电子加速器**
邓建军 主编 国防工业出版社 2006 年 10 月
- 051 中子核反应激发函数**
田东风 孙伟力 编著 国防工业出版社 2006 年 11 月
- 052 实验冲击波物理导引**
谭华 著 国防工业出版社 2007 年 3 月
- 053 核军备控制核查技术概论**
刘成安 伍钧 编著 国防工业出版社 2007 年 3 月
- 054 强流粒子束及其应用**
刘锡三 著 国防工业出版社 2007 年 7 月
- 055 氦和氡的工程技术**
蒋国强 等编著 国防工业出版社 2007 年 11 月

- | | | | |
|------------|-----------------------------------|---------|------------|
| 056 | 中子学宏观实验
段绍节 编著 | 国防工业出版社 | 2008 年 5 月 |
| 057 | 高功率微波发生器原理
丁武 著 | 国防工业出版社 | 2008 年 5 月 |
| 058 | 等离子体中辐射输运和辐射流体力学
彭惠民 编著 | 国防工业出版社 | 2008 年 8 月 |
| 059 | 非平衡统计力学
陈式刚 编著 | 科学出版社 | 2010 年 2 月 |
| 060 | 高能硝胺炸药的热分解
舒远杰 著 | 国防工业出版社 | 2010 年 6 月 |

序

高能硝胺炸药在火炸药领域占据重要地位,而热分解研究对于高能炸药配方设计、性能评估研究等具有重要意义。《高能硝胺炸药的热分解》就是这两方面的很好结合。本书涉及的炸药包括目前广泛使用的硝胺类高能炸药黑索金(RDX)、奥克托金(HMX)、新炸药 2,4,6,8,10,12-六硝基六氮杂异伍兹烷(HNIW,CL-20)、1,3,3-三硝基氮杂环丁烷(TNAZ)以及模型化合物二甲基硝胺(DMN),涉及的内容包括在气相、熔融态、溶液及固相中的热分解行为和机理的实验与理论研究;高能炸药的结构-性能关系探讨;量子化学理论在上述研究中的运用等。全书有两条主线:第一条以高能硝胺炸药及其模型化合物二甲基硝胺热分解机理研究为主线,介绍了高能炸药在不同状态下热分解规律及分解机理,研究方法与手段的最新发展动态,将炸药工程应用(配方设计、性能评估、库存老化研究、分析表征手段等)以及应用基础研究(炸药结构与性能、含能材料设计、延寿机理与途径等)很好地结合起来;第二条是全书在研究手段与方法、炸药机理、结构与性能研究方面都凸显了理论与实验研究、宏观与微观的结合。本书的显著特点是总结了关于高能硝胺炸药热分析、热分解的国内外最新研究成果和发展动态,尤其反映了作者在高能硝胺炸药在溶液中热分解研究方面取得的成果:首次系统阐述了硝胺类高能炸药在几十种溶剂中的热分解行为,第一次公开报道了高能硝胺炸药在如此多溶剂中的热分解常数,证实了俄罗斯科学家、诺贝尔奖获得者 H. H. Семенов 提出的炸药链式反应的假设;本书也反映了中国工程物理研究院化工材料研究所在高能炸药结构-性能、热分解机理方面取得的理论研究成果。

国内外还未见有高能硝胺炸药热分解专著出版。我院楚士晋研究员于 1994 年编写的《炸药热分析》一书主要介绍常用的热分析仪器和方法,苏联于 20 世纪 60 年代出版过《炸药热分解》、俄罗斯于 20 世纪 90 年代初出版过《火炸药的热分解和燃烧》,对硝胺类高能炸药涉及不多,只以章节形式进行了较简单介绍,更没有涉及一些新炸药的热分解研究。本书针对高能硝胺炸药(增加了新炸药 CL-20、TNAZ)突出其在气相、溶液、熔融态的热分解行为和机理研究,介绍了新的研究手段和方法,首次大量、系统地阐述了高能硝胺炸药在溶液中的热分解行为,并介绍了量子化学、量子力学、分子动力学等在热分解研究中的应用。

全书体现了专业的前沿和最新进展,有较强的系统性、逻辑性、完整性和实用性,它的出版和公开发行,定会对从事火炸药合成、配方设计、热性能研究及相关领域的研究人员和工程技术人员有重要的参考价值。

中国工程院院士

朱建士

2010 年 1 月

前 言

高能炸药研究与开发的历史与新型炸药的合成和实际需求紧密联系在一起。一方面,每一次新材料的出现,都推动着武器性能的明显提高或改进;另一方面,实际应用中对材料的需求反过来促进了材料的发展。炸药能量和安全性始终是实际应用中关注的主要问题。硝胺炸药黑索金(RDX)、奥克托金(HMX)等因其能量高、综合性能较好,在火炸药领域得到广泛应用,其缺点是感度较高、安全性较差。寻求能量高、安全性好的炸药是当前和今后炸药合成的主要方向。

最近二十多年,一大批新型高能炸药(如1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯(FOX-7)、八硝基立方烷(ONC)、1,3,3-三硝基氮杂环丁烷(TNAZ)、二硝酰胺铵(ADN)、2,4,6,8,10,12-六硝基六氮杂异伍兹烷(HNIW,CL-20)等)被报道或合成出来,综合性能都较好。其中硝胺炸药占了绝大部分,显示了硝胺炸药在火炸药领域的重要地位。本书所涉及的炸药主要是目前使用非常广泛的高能硝胺炸药RDX和HMX,以及新型硝胺炸药TNAZ和CL-20。为认识上述高能硝胺炸药热分解机理,选择了结构最为简单的二级硝胺——二甲基硝胺,作为高能硝胺炸药的模型化合物。

炸药化学变化形式包括缓慢的热分解、燃烧和爆轰,就其过程进行的本质及规律而言,它们之间都是相互联系的。高能炸药的几种变化形式都与其热分解行为紧密相关,开展热分解研究对于深入认识炸药转变过程有重要意义。炸药热行为的知识还可用于选择储存条件、预测寿命、预测预防事故的发生、预测储存和使用过程中变化的现象(相变、燃烧变化)等。此外,在含能材料制造、加工、运输和储存时非常关心高能炸药的热行为,需要回答一系列问题:何时反应会发生?发生的强度如何?何时会发生明显的变化?高能炸药的热行为研究对于安全生产、储存、处理以及销毁都有重要作用,而热分解的研究又是基础。美国、俄罗斯等国家历来非常重视高能炸药的热分解。

研究炸药热分解机理以及动力学定量化通常是非常困难的,研究难度体现在:通常不止一个分解步骤或一种机理,还取决于物理状态、温度、压力以及先前的加工和处理条件等多种因素。所需要的动力学研究又非常复杂、费时,而且外推到真实实用的条件还不总是适用。如果要获得更好的准确性,加上炸药又是非均相的,仅仅使用常规方法是不够的,而且还因为常规测试需要测试更多的样品或进行更多实验,这又受到安全和成本的限制。因此,寻找炸药热分解研究新方法和新技术对于深入认识其分解机理有重要的意义,本书第2章给予了详细介绍。

高能炸药分解反应研究深度取决于研究目的本身。为了确定安定性、相容性并对热爆炸进行评估,通常开展形式动力学测量就已经足够了,虽然它比较耗时费力,但常常是切实可行的。要研究提高高能炸药安定性的途径,对安定性进行预估或预测,则需要进行更深入、更复杂的研究,如确定详细的反应机理、结构和聚集状态对分解速率及分解机理

的影响。因此,安定性研究不仅包括了对实际应用的炸药进行深入研究,还包括了对高能炸药“结构—反应性”关系研究。

由于新型含能材料合成、配方、性能测试与外场实验等需要耗费大量时间、人力、物力和财力,因此含能材料设计相关过程的模拟研究受到相当的关注,这就迫切需要建立合适的模型来预测还没合成出来的含能材料的各种性能,这对于经济、高效地寻找期望中的含能材料有重要意义。借助预测模型,在研发新的含能材料过程中可以筛选、排除掉无法满足实际应用要求的候选物,凸显出其很高的经济性,也提高了目标命中率。

就现阶段而言,高能炸药的理论研究工作还不能代替实验;相反,它要求更细致、更精确的实验研究来评估、校正和完善理论研究模型。这是一个具有挑战性的要求,因为实验时间和进行的实验数量要比理论模型研究多得多。不过,在这方面已经取得了进展,实验的时间与规模已经减少。

获得定量的化学反应动力学方程以及精准的化学反应机理可以为以上工作提供研究基础。大家更加关注物理过程,关注伴随着这些物理过程同时进行着的化学转化、相变、固体结构的变化,以及热量交换和物质交换。该方法要求应用并发展新的实验技术,同时要求获得某种形式的定量的目标信息,以至于能够把实验结果应用到理论研究中用来预测不同条件下反应系统的行为。获得的这些实验结果使得人们能够定量预测高能炸药的稳定性,也使得理论计算成为可能。目前,已能成功地对热爆炸和热起爆过程进行计算,也成功地把理论计算用于发展含能材料以及高能物质系统的定量的燃烧理论。因此,本书第3章~第8章对重要高能硝胺炸药或模型化合物二甲基硝胺(DMN)、RDX、HMX、TNAZ、CL-20的热分解机理和高能炸药结构—性能关系进行了重点讨论。

近年来,由于量子化学理论及计算方法的迅速发展,计算机运算速度的飞速提高,量子化学在炸药研究中逐步得到广泛的应用。与传统的热分解实验方法相比较,运用量子化学方法研究炸药热分解具有以下优点:节省大量人力和物力;研究速度较快,精确程度较高,客观性强;在很大程度上能得到实验不能得出的数据。这些特点使得量子化学方法在研究炸药热分解机理和对新型炸药热性能的预测方面得到了广泛应用。此外,结合量子力学、分子动力学取得了很好效果,对常见的高能炸药结构—性能进行深入的研究,结果令人鼓舞。本书无论是热分解研究方法,还是炸药热分解机理研究,以及高能炸药结构设计 with 性能关系,都凸显了理论研究的重要性,而且一直强调理论与实验的结合,应相互印证与检验。

本书主要总结了高能硝胺炸药在气相、熔融态、溶液和固相中热分解行为及机理方面的研究成果和最新进展。我本人于1997年—2000年在俄罗斯科学院化学物理问题研究所(Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences)对炸药在溶液中热分解做了大量工作,首次系统研究了硝胺类高能炸药在几十种溶液中的热分解行为,这些炸药在溶液中热分解常数绝大部分是第一次公开报道,也成功证实了俄罗斯科学家、诺贝尔奖获得者 Н. Н. Семенов 提出的炸药链式反应的假设,为此,我要特别感谢我的导师——俄罗斯科学院 Г. Б. Манелис 院士和 Г. М. Назин 教授。

朱建士院士为本书作序,借此机会予以特别致谢。同样要特别感谢龙新平研究员、孙锦山研究员、田东风研究员、刘仓理研究员、汪小琳研究员、赵小东研究员、黄辉研究员、黄奕刚研究员和田勇研究员等在撰写过程中给予的大力支持,并提出了宝贵的意见。我还

要特别感谢罗顺火研究员在丛书立项中给予的大力支持,以及对本书初稿进行了细致的审阅。

研究生殷明、刘勇、杜军良、孙毅、陈星运、张浩斌等参加了资料整理和编辑工作,熊鹰、周阳、宗和厚、颜熹林同志参与了部分资料整理,在此表示感谢。

因作者水平有限,书中疏漏和错误在所难免,敬请读者批评、指正。

舒远杰

2010年4月

缩写和符号

代号	中文名	英文名
1,5 - DNN	1,5 - 二硝基萘	1,5-Dinitronaphthalene
1,8 - DNN	1,8 - 二硝基萘	1,8-Dinitronaphthalene
5 - Ph - T	5 - 苯基四唑	5-Phenyl tetrazole
ADN	二硝酰胺铵	Ammonium dinitramide
AIMD	从头算分子动力学	ab Initio molecular dynamics
AN	硝酸铵	Ammonium nitrate
AP	高氯酸铵	Ammonium perchlorate
B3LYP		Becke 3-Parameter, Lee, Yang and Parr (correlation; density functional theory)
BHT	5,5' - 双 - 1H - 四唑	5,5'-Bis-1H-tetrazole
BITNT	3,3' - 二甲基 - 2,2',4,4',6,6' - 六硝基 - 1,1' - 联苯	3,3'-Dimethyl-2,2',4,4',6,6'-hexa-nitro-1,1'-biphenyl
BTATz	3,6 - 双(1 - 氢 - 四唑 - 5 - 氨) - 1,2,4,5 - 四嗪	3,6-Bis(1H-tetrazol-5-amino)-1,2,4,5-tetrazine
BTTN	1,2,4 - 丁三醇三硝酸酯	1,2,4-Butanetriol trinitrate
cis - TNAD	顺式 - 1,4,5,8 - 四氮杂双环[4.4.0]癸烷	cis-1,4,5,8-Tetranitro-1,4,5,8-tetraazabicyclo[4.4.0]dec-alin
CL - 20	2,4,6,8,10,12 - 六硝基六氮杂异伍兹烷	2,4,6,8,10,12-Hexanitrohexaazaisowurtzitane
CPX	1,3 - 二硝基咪唑烷	1,3-Dinitroimidazolidine
CVT	正则变分过渡态理论	Canonical variational theory
DAAT	3,3' - 偶氮双(6 - 氨基 - 1,2,4,5 - 四嗪)	3,3'-Azobis (6-amino-1,2,4,5-tetrazine)
DADN	1,5 - 二乙酰基 - 3,7 - 二硝基 - 1,3,5,7 - 四氮杂环辛烷	1,5-Diacetyl-3,7-dinitro-1,3,5,7-tetrazacycloctane
DANNO	1,5 - 二乙酰基 - 3 - 硝基 - 7 - 亚甲基 - 1,3,5,7 - 四氮杂环辛烷	1,5-Diacetyl-3-nitro-7-nitroso-1,3,5,7-tetrazacycloctane
DAPT	1,7 - 二乙酰基 - 1,3,5,7 - 四氮杂环辛烷	1,7-Diacetyl-1,3,5,7-tetrazacycloctane
DAT	3,6 - 二氨基 - 1,2,4,5 - 四嗪	3,6-Diamino-1,2,4,5-tetrazine

DATB	1,3 - 二氨基 - 2,4,6 - 三硝基苯	1,3-Diamino-2,4,6-trinitrobenzene
DECAGEN	1,3,5,7,9 - 五硝基 - 1,3,5,7,9 - 五氮杂环癸烷	1,3,5,7,9-Pentanitro-1,3,5,7,9-pentaazacyclodecane
DFT	密度泛函理论	Density functional theory
DHT	3,6 - 二胍基 - 1,2,4,5 - 四嗪	3,6-Dihydrazino-1,2,4,5-tetrazine
DiAT	3,6 - 二叠氮基 - 1,2,4,5 - 四嗪	3,6-Diazino-1,2,4,5-tetrazine
DIPS	1,3,5 - 三硝基 - 2 - [(2,4,6 - 三硝基苯基)硫代]苯	1,3,5-Trinitro-2-[(2,4,6-trinitrophenyl)thio]benzene
DIPSO	1,3,5 - 三硝基 - 2 - [(2,4,6 - 三硝基苯基)磺酰基]苯	1,3,5-Trinitro-2-[(2,4,6-trinitrophenyl)sulfonyl]benzene
DMDIPS	2,4,6 - 三硝基 - 3 - [(3 - 甲基 - 2,4,6 - 三硝基苯)硫代]甲苯	2,4,6-Trinitro-3-[(3-methyl-2,4,6-trinitrophenyl)thio]toluene
DMEDNA	2,5 - 二硝基 - 2,5 - 二氮杂己烷	2,5-Dinitro-2,5-diazahexane
DMF	二甲基甲酰胺	Dimethylformamide
DMHDNA	二甲基己二硝胺	Dimethylhexyldinitroamine
DMN	二甲基硝胺	Dimethyl nitramine
DMX	乙酰唑胺	Acetazolamide
DNAF	3,3' - 二硝基 - 4,4' - 氧杂偶氮呋喃	Dinitroazofuroxan
DNA _t	4,6 - 二硝基 - 2,1 - 苯并异噁唑	4,6-Dinitro-2,1-benzisoxazole (4,6-dinitroanthranil)
DNAZ	3,3 - 二硝基氮杂环丁烷	3,3-Dinitroazetidine
DNCP	2,4 - 二硝基氯苯	2,4-Dinitrochlorobenzene
DNDC	1,4 - 二硝基派嗪	1,4-Dinitropiperazine
DNI	二硝基咪唑	Dinitroimidazole
DNNC	1,3,5,5 - 四硝基六氢嘧啶	1,3,5,5-Tetranitrohexahydropyrimidine
DNP	2,4 - 二硝基苯酚	2,4-Dinitrophenol
DPA	吡啶 - 2,6 - 二羧酸	Pyridine-2,6-dicarboxylic acid
DPE	1,3,5 - 三硝基 - 2 - [2 - (2,4,6 - 三硝基苯基)乙基]苯	1,3,5-Trinitro-2-[2-(2,4,6-trinitrophenyl)ethyl]benzene
DPT	3,7 - 二硝基 - 1,3,5,7 - 四氮杂双环[3.3.1]壬烷	3,7-Dinitro-1,3,5,7-tetraazabicyclo[3.3.1]nonane
DSC	差示扫描量热法	Differential scanning calorimetry
DTA	差热分析	Differential thermal analysis
EDD	乙二胺二硝酸盐	Ethylenediammonium dinitrate
FOX - 7	1,1 - 二氨基 - 2,2 - 二硝基乙烯	1,1-Diamino-2,2-dinitroethylene
G3MP2B3		Gaussian-3 second-order Moller-Plesset theory Becke 3-Parameter