

DFT Studies on the Tetrazine Substituted by Six-membered C—N Heterocyclic Derivatives

ZHOU Yang¹, LONG Xin-ping¹, SHU Yuan-jie¹, WANG Xin², TIAN An-min²

(1. Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China;

2. Department of chemistry, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: 22 Tetrazine substituted by six-membered C—N heterocyclic derivatives have been investigated by density functional theory. Their optimized geometry structures, electronic structures, conjugation, molecular energies, heats of formation (HOF) and density (ρ) were calculated at the B3LYP/6-311G(d,p) level. The results show that most of the species keep a planar structure and exhibit considerable conjugation over the whole molecule, which enhances the stability of these derivatives. There is a good linear relationship between the molecular energies, density and N atoms in these species. The studies show most of the species have high HOFs and relative stabilities. The HOFs of these compounds are between $631.1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ and $1465.6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Key words: applied chemistry; tetrazine; C—N heterocycle; theoretical study; heat of formation

读者·作者·编者

新书推荐: 硝化反应最新专集——《硝酰阳离子理论》

由南京理工大学原副校长、博士生导师吕春绪教授撰写的专著《硝酰阳离子理论》一书,于2006年9月兵器工业出版社正式出版,由《爆破器材》编辑部发行。

吕春绪教授多年来从事硝化反应理论及其应用技术的教学、科研、开发和推广工作,是南京理工大学化工与技术一级学科带头人,应用化学国家级重点学科带头人,我国炸药领域著名的专家、学者,国家有突出贡献的中青年专家。他先后获得国家科技进步二、三等奖、国家科技发明三等奖,部委科技进步特等奖等12项、发明专利18项,出版专著教材17部。吕春绪教授在近十几年的硝化研究及指导硕士生、博士生学位论文过程中,对硝化反应,如超酸硝化剂、区域选择性硝化、绿色硝化等,硝酰阳离子与硝酸合氢离子(H_2NO^{3+})和有机物的结合过程,特别是与胺类及醇类的反应,都有独特见解及创新。这些内容反映了当前该研究领域的新成就及发展新特点。

《硝酰阳离子理论》包括了硝酰阳离子理论的基本内容,诸如被硝化物的硝化特征、硝酰阳离子结构与光谱、生成反应、宏观载体特征、反应机理、反应动力学以及两相硝化理论等,着重介绍了芳烃区域选择性(定向)硝化以及绿色硝化理论与技术。该书以硝酰阳离子为主线,突出硝酰阳离子的结构、载体特征、生成反应、与有机物相互作用及副反应,同时较详细介绍了两相硝化、区域选择性硝化和绿色硝化等内容,力求其全面性。

吕春绪教授在撰写《硝酰阳离子理论》一书的过程中注重其理论性、新颖性、先进性、系统性及实用性。特别在硝化技术方面,围绕硝化过程中的某些重点及难点,就配酸技术、过程控制、反应器设计及计算机模拟等介绍了相应的新技术。作为一本以硝酰阳离子为主线的、系统阐述硝酰阳离子理论的硝化反应方面的专著,在国内外尚属首次出版。

该书可作为高等院校有关专业的教材,适合大学生、研究生及教师阅读,也可供从事硝化反应研究、设计、生产、使用及管理的工程技术人员参考。

订购地址:南京理工大学化工学院《爆破器材》编辑部,邮编:210094,电话:025-84315530。

(中国工程物理研究院化工材料研究所 舒远杰供稿)