

文章编号: 1003-1480(2022)04-0037-06

新型富氮含能离子盐5ATNTZ的设计与合成

韩志跃¹, 王勇², 于跃³, 郝瑛⁴, 杜志明¹, 张宇鹏¹

(1. 北京理工大学 爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京, 100081; 2. 中国人民警察大学, 河北 廊坊, 065000; 3. 北京化工大学, 北京, 100029; 4. 齐齐哈尔建华机械有限公司, 黑龙江 齐齐哈尔, 161006)

摘要: 针对气胀式救生衣用产气剂使用需求, 设计并合成了一种非金属富氮含能离子盐 5ATNTZ (5-氨基四唑 3-硝基-1,2,4-三唑)。采用量子化学的方法 (DFT), 在 B3LYP/6-31+G** 水平下对 5ATNTZ 进行了结构优化和振动分析, 计算了 5ATNTZ 的结构和热力学参数。通过红外光谱分析、元素分析、核磁共振分析、质谱分析证实 5ATNTZ 被成功合成。DSC-TG 分析表明: 5ATNTZ 具有较好的热稳定性。摩擦及撞击感度测试结果表明: 5ATNTZ 的摩擦感度值大于 360N、撞击感度值大于 100J, 极为钝感, 安定性极佳。理论计算与实验测试结果表明: 5ATNTZ 是一种性能优良的富氮含能化合物, 有望作为气体发生剂中的产气药成分。

关键词: 气体发生剂; 富氮含能离子盐; 量子化学计算; 合成; 钝感

中图分类号: TJ55 文献标识码: A DOI: 10.3969/j.issn.1003-1480.2022.04.008

Design and Synthesis of New Nitrogen Rich Energetic Ionic Salts

HAN Zhi-yue¹, WANG Yong², YU Yue³, HAO Ying⁴, DU Zhi-ming¹, ZHANG Yu-peng¹

(1. State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing, 100081; 2. China People's Police University, Langfang, 065000; 3. Beijing University of Chemical Technology, Beijing, 100029; 4. Qiqihar Jianhua Machinery Co.Ltd., Qiqihar, 161006)

Abstract: Aimed at the requirement of aerogenic agents for inflatable life jackets, a non-metallic nitrogen rich energetic ionic salt 5ATNTZ was designed and prepared. Through the method of quantum chemistry (DFT), the structure optimization and vibration analysis of 5ATNTZ were carried out at the level of B3LYP/6-31+G**, and the structure and thermodynamic parameters of 5ATNTZ were calculated. Infrared spectroscopy, elemental analysis, nuclear magnetic resonance analysis and mass spectrometry confirmed that 5ATNTZ was successfully synthesized. DSC-TG analysis shows that 5ATNTZ has good thermal stability. The friction and impact sensitivity test of 5ATNTZ shows that its value of friction sensitivity is higher than 360N and that of impact sensitivity is higher than 100J, it is extremely insensitive and has excellent stability. Based on the results of theoretical calculation and experimental test, 5ATNTZ is a nitrogen rich substance with excellent performance, which is expected to be used as a gas producing composition in gas generating agent.

Key words: Gas generating agent; Nitrogen rich energetic ionic salt; Quantum chemical calculation; Synthesis; Insensitivity

为满足气胀式救生衣用产气剂的使用需求, 富氮含能化合物需满足以下要求: (1) 感度极低, 日常运输储存时不会发生危险; (2) 具有较高的氧平衡, 以降低氧化剂的使用量, 从而满足气胀式救生衣在正常

状态 (非工作状态) 下体积小、重量轻、携带方便的需求; (3) 氢含量较低, 以减少燃烧产物中的水蒸汽, 避免水上低温环境使燃烧产物中的水蒸汽冷凝, 从而导致救生衣体积减小, 浮力降低; (4) 原材料易得,

收稿日期: 2022-03-23

作者简介: 韩志跃 (1984-), 男, 副教授, 从事火工烟火技术研究。

基金项目: 河北省省级科技计划资助 (21375601D)。

合成工艺简单,生产成本低。针对以上要求,本文设计了一种非金属富氮含能离子盐(5ATNTZ),采用量子化学的方法(DFT)计算了5ATNTZ的几何结构、静电势分布、理论密度、生成焓和爆速爆压,并对其进行了合成和表征,测试了其摩擦和撞击感度。

1 富氮含能离子盐的设计

1.1 研究思路

针对感度极低的要求,该富氮含能化合物可设计为一种非金属富氮含能离子盐;为满足较高的氧平衡要求,该离子盐可选择含有硝基的有机物质作为阴离子或阳离子;同时,针对氢含量较低要求,该离子盐不能选取常用的胍类物质作为阳离子;此外,为实现原材料易得、合成工艺简单,该离子盐采用2种已工业化生产的原料合成,且这2种原料易于形成阴离子或阳离子。

1.2 阳离子原料

阳离子原料为5-氨基四唑(5-AT),结构如图1所示。5-AT氮含量高达82.4%,安定性好,结构稳定钝感,是一种性能卓越的富氮含能化合物。并且,5-AT的合成工艺成熟、易于获得^[1]。同时,5-AT易于被盐酸、硝酸等强酸质子化,形成5-AT阳离子,具有5-AT阳离子的有机离子盐的生成焓、能量密度、感度、结构稳定性等性能均较好,可以通过复分解反应与有机阴离子结合形成富氮含能离子盐^[2]。

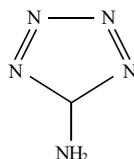


图1 5-AT 结构图

Fig.1 5-AT structure diagram

1.3 阴离子原料

阴离子原料为3-硝基-1,2,4-三唑(N TZ),结构如图2所示。

NTZ也是一类重要的化工原料,常用于含能化合物、含能离子盐、生物制剂、药物的合成^[3-4]。NTZ氮含量为49.1%,结构稳定,分解时吸热,生产工艺

成熟,易于购买与运输。1个NTZ分子中具有2个氧原子,可以改善富氮含能离子盐的氧平衡,且NTZ三唑环上的氢原子易脱落。因此,NTZ适合作为富氮含能离子盐的阴离子。

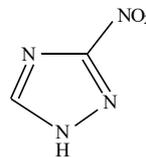


图2 NTZ 结构图

Fig.2 NTZ structure diagram

1.4 富氮有机含能离子盐

富氮有机含能离子盐设计为5-氨基四唑3-硝基-1,2,4-三唑(5ATNTZ),结构如图3所示,分子式为 $C_3N_9H_5O_2$,分子量为 $199g \cdot mol^{-1}$,氮含量达到63.3%,高于市面流行的产气剂硝基胍(53.8%)和硝酸胍(45.9%),其燃烧产物中氮气含量较高;氢含量为2.5%,低于硝基胍(3.8%)、硝酸胍(4.9%)和5-氨基四唑(3.5%),其燃烧产物中水蒸气含量较低;氧平衡为-52.2%,高于5-AT(-65.8%),其需要的氧化剂的量较少。作为一个由三唑和四唑环构成的离子盐,预测5ATNTZ的安定性较好,感度较低。Gutowski K E^[5]等在研究预测生成焓方法时曾以该物质为例计算过其生成焓,但国内外尚未合成过此物质。

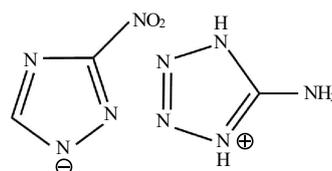


图3 5ATNTZ 结构图

Fig.3 5ATNTZ structure diagram

2 5ATNTZ 的理论计算

2.1 5ATNTZ 的结构优化

基于密度泛函理论,在B3LYP/6-31+G**水平下,采用Gaussian 09程序包计算5ATNTZ的结构参数并对其结构进行优化修正和振动分析,得到能量最低的稳定结构,如图4所示。优化后的几何结构中,键长和键角分别见表1和表2。由表2可知,5-AT阳离子中的N6-C5-N12、C5-N6-N10、N6-N10-N11、

N10-N11-N12、C5-N12-N11 的键角均在 104.2 ~ 110.3°C内;NTZ 阴离子中的 N3-C1-N8、N8-C2-N9、C1-N3-N9、C1-N8-C2、C2-N9-N3 的键角均在 101.5 ~ 115.0°C内。二者均为稳定的五元环结构,表明 5ATNTZ 理论上可以被合成。

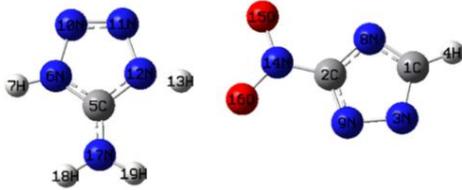


图4 5ATNTZ 优化后的几何结构图

Fig.4 The optimized geometric structure of 5ATNTZ

表1 5ATNTZ 键长

Tab.1 5ATNTZ bond length

化学键	键长/A°	化学键	键长/A°
C1-N3	1.390 6	N6-H7	1.017 7
C1-H4	1.076 9	N6-N10	1.421 4
C1-N8	1.350 2	N10-N11	1.308 2
C2-N8	1.374 2	N11-N12	1.413 7
C2-N9	1.368 1	N12-H13	1.060 2
C2-N14	1.393 6	H13-O16	1.630 7
N3-N9	1.396 7	N14-O15	1.294 9
C5-N6	1.360 5	N14-O16	1.321 5
C5-N12	1.358 4	N17-H18	1.017 5
C5-N17	1.325 6	N17-H19	1.017 4

表2 5ATNTZ 键角

Tab.2 5ATNTZ bond angle

键角	角度/°	键角	角度/°
N3-C1-H4	122.239 6	C2-N9-N3	104.226 7
N3-C1-N8	113.552 3	N6-N10-N11	106.818 4
H4-C1-N8	124.208 1	N10-N11-N12	107.973 9
N8-C2-N9	114.920 4	C5-N12-N11	110.026 4
N8-C2-N14	122.533 9	C5-N12-H13	129.667 7
N9-C2-N14	122.545 6	N11-N12-H13	120.305 9
C1-N3-N9	105.753 7	N12-H13-O16	173.622 4
N6-C5-N12	104.913 8	C2-N14-O15	120.778 8
N6-C5-N17	127.583 0	C2-N14-O16	118.577 3
N12-C5-N17	127.503 2	H13-O16-N14	120.643 9
C5-N6-H7	129.658 4	H13-O16-N14	114.605 1
C5-N6-N10	110.267 5	C5-N17-H18	121.603 1
H7-N6-N10	120.074 0	C5-N17-H19	121.218 9
C1-N8-C2	101.546 9	H18-N17-H19	117.177 9

2.2 5ATNTZ 的静电势分析

采用 Gaussian 09 程序包对优化后的 5ATNTZ 几何结构进行静电势分析,绘制了 5ATNTZ 的静电势图,如图 5 所示。图 5 中蓝色表示正电势,呈酸性;红色表示负电势,呈碱性。5-AT 离子中氨基上的氢原子与四唑环上的氢原子均显示蓝色,表明其表面正电势分布均匀,结构稳定,整体 5-AT 离子为阳离子;NTZ 离子中的 2 号和 4 号 N 原子(对应图 4 中的 N3 和 N8)均显示红色,表明其表面负电势分布均匀,

结构稳定,整体 NTZ 离子为阴离子。

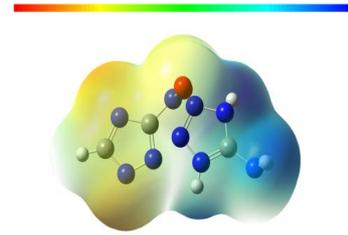


图5 5ATNTZ 的静电势分布图

Fig.5 Electrostatic potential distribution diagram of 5ATNTZ

2.3 5ATNTZ 密度计算

Kamlet 等^[6]研究发现,含能材料的密度与其爆速、爆压性能具有直接关系。采用蒙特·卡罗法计算理论体积,求得 5ATNTZ 的理论密度为 1.63g·cm⁻³。

2.4 5ATNTZ 生成焓及爆速爆压计算

运用 Born-Haber 循环求解含能材料的生成焓,求解思路如图 6 所示。

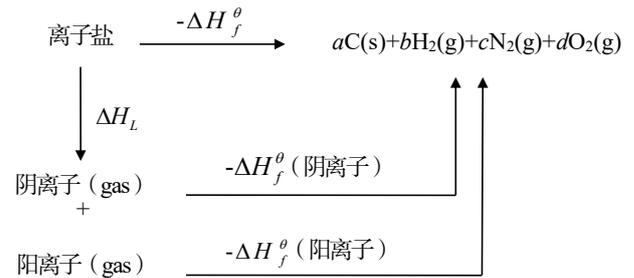


图6 Born-Haber 循环

Fig.6 Born-Haber cycle

图 6 中, ΔH_L 为离子盐的晶格焓; ΔH_f^θ 为标准生成焓。采用 Gaussian 09 程序包 (B3 LYP 方法) 分别计算阴离子和阳离子的总电子能量 (E_{elec}) 和零点振动能 (ZPE), 进而计算其质子亲核势 (PA)。按照公式 (1) ~ (3) 分别计算阳离子、阴离子和 5ATNTZ 的标准生成焓^[7]。根据 5ATNTZ 的标准生成焓和密度, 采用 EXPLO5 软件计算得到 5ATNTZ 的理论爆速和爆压, 相关计算结果见表 3。

$$\Delta H_f^\theta(\text{阳离子}, 298\text{K}) = \Delta H_f^\theta(\text{阳离子原分子}, 298\text{K}, \text{g}) - \text{PA}(\text{阳离子}) \quad (1)$$

$$\Delta H_f^\theta(\text{阴离子}, 298\text{K}) = \Delta H_f^\theta(\text{阴离子原分子}, 298\text{K}, \text{g}) + \text{PA}(\text{阴离子}) \quad (2)$$

$$\Delta H_f^\theta(\text{离子盐}, 298\text{K}) = \Delta H_f^\theta(\text{阳离子}, 298\text{K}) + \Delta H_f^\theta(\text{阴离子}, 298\text{K}) - \Delta H_L \quad (3)$$

表3 5ATNTZ 性能参数理论计算结果

Tab.3 Theoretical calculation results of 5ATNTZ performance parameters

物质	理论密度/ (g·cm ⁻³)	标准生成焓/ (kJ·mol ⁻¹)	爆速 / (m·s ⁻¹)	爆压 /GPa
5ATNTZ	1.63	220.98	6997.00	20.42

3 5ATNTZ 的合成

3.1 5ATNTZ 合成步骤

5-AT 容易被强酸质子化, 质子化后的结构稳定。NTZ 呈弱酸性, 易与碱性溶液反应, 且 3-硝基-1, 2, 4-三唑银盐 (AgNTZ) 为难溶性沉淀, 因此 5ATNTZ 的合成选择复分解法^[8]。即 5-AT 与浓 HCl 反应, 使其质子化, 得到稳定的 5-氨基四唑盐酸盐 (5ATC); NTZ 与 NaOH 溶液反应得到 NTZ 阴离子后与硝酸银溶液反应生成沉淀 AgNTZ。再经过复分解反应除去沉淀 AgCl 得到 5ATNTZ, 合成路线如图 7 所示。

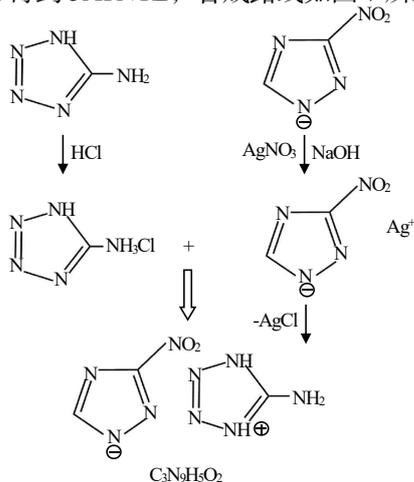


图7 5ATNTZ 合成路线图

Fig.7 Synthetic route map of 5ATNTZ

3.2 5ATNTZ 的合成与表征

3.2.1 5ATC 的合成与表征

称取 1.063g (12.5mmol) 5-AT, 置于 100 mL 三口反应瓶中, 加入 20mL 无水甲醇溶解, 再加入 5mL 浓 HCl (物质的量约为 0.3mol) 回流反应 20min, 得到无色溶液。在 35°C 以下减压旋蒸, 将剩余液体置于培养皿中风干, 可滴入少许石油醚帮助其结晶, 得到白色晶体 5ATC, 产量为 1.449g, 产率为 96.2%。

5ATC 表征的红外光谱图、¹H NMR 谱图、¹³C NMR 谱图和 DSC-TG 图如图 8 所示。由图 8 (a) 可知, IR (KBr, cm⁻¹): $\tilde{\nu}$ =3 408, 3 199, 2 858, 2 716,

1 700, 1 646, 1 581, 1 475, 1 448, 1 329, 1 274, 1 083, 1 051, 999, 987, 896, 773, 727, 713, 672, 559, 443, 432。由图 8 (b) 可见, 2.51ppm 位置为溶剂[D₆]DMSO 的特征峰, 5ATC ¹H NMR (400MHz, DMSO) δ 9.33, 3.74。由图 8 (c) 可见, 40ppm 左右位置为溶剂[D₆]DMSO 的特征峰, 5ATC ¹³C NMR (101 MHz, DMSO) δ 153.17。由图 8 (d) 可见, 其主要的分解过程对应吸热峰, 由此推测 5ATC 并不存在剧烈分解放热的危险, 是一种安全的物质。经 BAM (Bundesanstalt für Materialforschung und Prüfung) 摩擦感度测试, 5ATC 的摩擦感度大于 360 N。

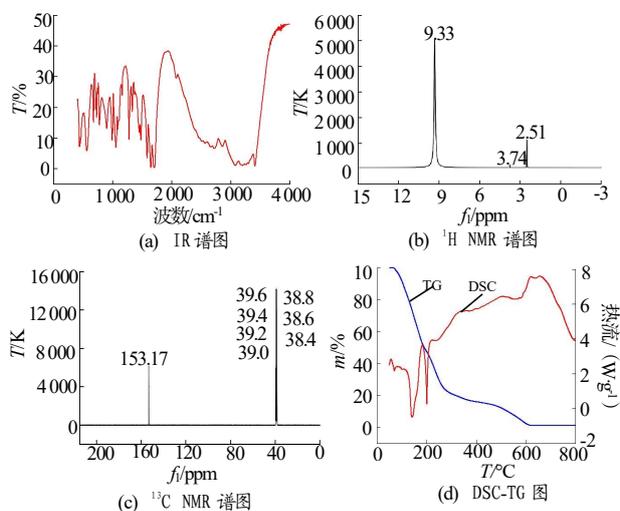


图8 5ATC 表征谱图及 DSC-TG 图

Fig.8 Characterization spectrums and DSC-TG diagram of 5ATC

3.2.2 AgNTZ 的合成与表征

将 1.0g NTZ (8.77mmol) 置于 100mL 三口反应瓶中, 加入 30mL 水, 在搅拌下逐渐加入 NaOH360 mg (9.00mmol), NTZ 溶解, 溶液变黄。滴加稀硝酸至 pH=7 (或略低于 7, 防止过量的氢氧根与 AgNO₃ 反应, 生成沉淀杂质)。将 1.49g (8.8mmol) AgNO₃ 溶于 20mL 水中, 并将该 AgNO₃ 溶液逐滴加入上述三口反应瓶中。反应体系中出现淡黄色沉淀。反应 30min 后进行抽滤, 水洗滤饼后将滤饼烘干, 得到 AgNTZ, 产量为 1.812g, 产率为 93.5%。

AgNTZ 表征的红外光谱图、¹H NMR 谱图和 DSC-TG 图如图 9 所示。由图 9 (a) 可知, IR (KBr, cm⁻¹): $\tilde{\nu}$ =1 553, 1 491, 1 412, 1 396, 1 306, 1 292, 1 170, 1 059, 839。由图 9 (b) 可知, 2.63ppm 位置为溶剂[D₆]DMSO 的特征峰, ¹H NMR (600MHz,

DMSO) δ 4.70。由于 AgNTZ 难溶于各类常见氘代试剂, 溶液中 AgNTZ 浓度过低, 无法进行 ^{13}C NMR 测试。由图 9 (c) 可知, AgNTZ 的放热峰对应于质量降低, 表明 AgNTZ 的分解温度超过 300°C , 其在受热情况下保持结构稳定的性能很好, 安全性较高。经 BAM 摩擦感度测试, AgNTZ 的摩擦感度大于 360N。

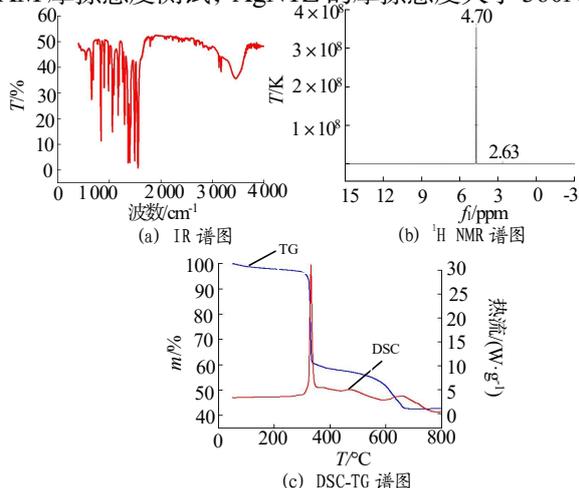


图 9 AgNTZ 表征谱图及 DSC-TG 图

Fig.9 Characterization spectrums and DSC-TG diagram of AgNTZ

3.2.3 5ATNTZ 的合成与表征

将 1.01g (8.038mmol) 5ATC、1.86 g (8.421 mmol) AgNTZ 置于 100mL 三口反应瓶中, 加入 30mLDMF, 在室温下避光过夜反应。反应完毕后, 过滤得到黄色滤液, 经 40°C 减压旋蒸得到米白色固体 5ATNTZ, 如图 10 所示, 产量为 1.409 g, 产率为 87.7%。

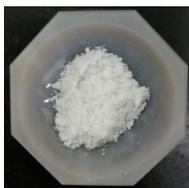


图 10 5ATNTZ 产物实图

Fig.10 5ATNTZ product image

5ATNTZ 的元素分析: 理论值 (%): C 18.10, N 63.30, H 2.53, O 16.07; 测试值 (%): C 18.01, N 63.41, H 2.58, O 16.00。测试值符合理论值。

5ATNTZ 表征的红外光谱、 ^1H NMR 谱、 ^{13}C NMR 谱、质谱图、DSC-TG 图如图 11 所示。由图 11 (a) 可知, IR (KBr, cm^{-1}): $\tilde{\nu} = 3416, 3332, 3163, 2963, 2869, 2777, 2731, 2439, 1637, 1588, 1522, 1481, 1426, 1381, 1310, 1267, 1181, 1144,$

$1107, 1067, 1047, 1019, 999, 982, 918, 880, 839, 771, 735, 677, 648, 446$ 。其中, 3416cm^{-1} 、 3332cm^{-1} 、 3163cm^{-1} 为 N-H 键的对称伸缩振动特征峰, 1381cm^{-1} 、 1522cm^{-1} 为 NO_2 振动特征峰, 1310cm^{-1} 、 1426cm^{-1} 、 1481cm^{-1} 、 1637cm^{-1} 等为四唑环骨架特征峰, 839cm^{-1} 、 1047cm^{-1} 等为三唑环骨架振动特征峰^[9]。由图 11 (b) 可知, ^1H NMR 15.25ppm 为 5ATNTZ 中使四唑环质子化的质子, 8.88ppm 为 5-AT 阳离子中的氢原子, 6.48ppm 为 NTZ 中的氢原子, 2.51 为溶剂 $[D_6]$ DMSO 的特征峰。

由图 11 (c) 可知, 156.57ppm 为四唑环上的 C, 146.13ppm 为三唑环 5 号 C, 163.03ppm 为三唑环 3 号 C, 40 ppm 左右位置为溶剂 $[D_6]$ DMSO 的特征峰^[10]。

由图 11 (d) 可知, 采用杂质较少的阴离子模式, 其中 $197.7\text{m}\cdot\text{z}^{-1}$ 为使四唑环质子化的质子脱落, 此时粒子为 -1 价, 分子量为 $197.7\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, 证明原粒子的分子量为 $198.7\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$, 符合 5ATNTZ 的理论值。

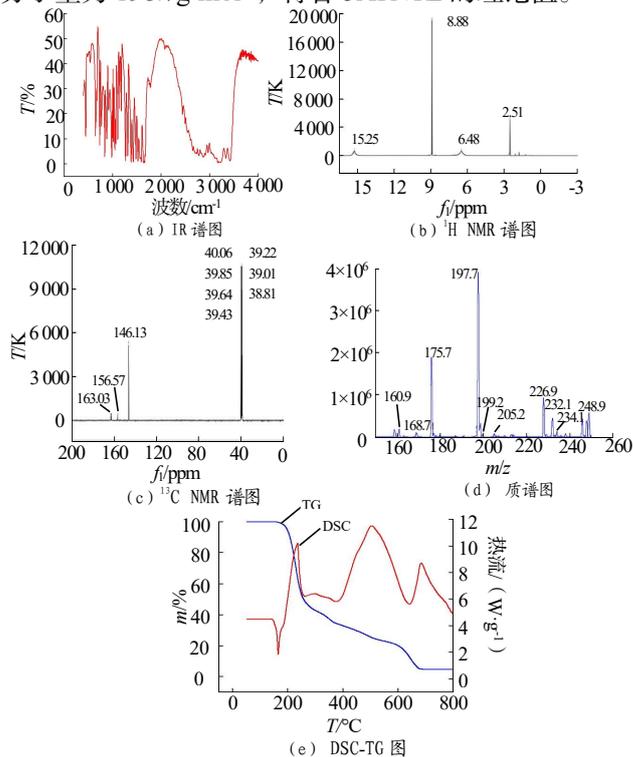


图 11 5ATNTZ 表征谱图及 DSC-TG 图

Fig.11 Characterization spectrums and DSC-TG diagram of 5ATNTZ

由图 11 (e) 可知, 保护气与吹扫气均为高纯氮气, 吹扫气流量为 $50\text{mL}\cdot\text{min}^{-1}$, 保护气流量为 $20\text{mL}\cdot\text{min}^{-1}$, 坩埚与参比坩埚均为带盖 $70\mu\text{L}$ 氧化铝陶瓷坩

塌。升温速率为 $15\text{K}\cdot\text{min}^{-1}$, 测量范围为 $50\sim 800^\circ\text{C}$ 。其中吸热峰峰值温度为 165.5°C , 结合 WRS-2 微机熔点仪的测试结果, 该温度为 5ATNTZ 的熔点, 第 1 个放热峰的峰顶温度约为 236°C , 整个放热过程有 3 个明显放热峰。

基于 BAM 标准测试的 5ATNTZ 的摩擦及撞击敏感度见表 4。由表 4 可知, 5ATNTZ 极为钝感, 是一种非常安全的含能材料, 适用于自热气胀式救生衣中。

表 4 5ATNTZ 的摩擦及撞击敏感度
Tab.4 Friction and impact sensitivity of 5ATNTZ

物质	摩擦感度 (FS) /N	撞击感度 (IS) /J
5ATNTZ	>360	>100

4 结论

(1) 设计了一种非金属富氮含能离子盐 5ATNTZ, 分子式为 $\text{C}_3\text{N}_9\text{H}_5\text{O}_2$, 氮含量达到 63.3%。采用 DFT 方法在 B3LYP/6-31+G**的水平下对 5ATNTZ 进行了结构优化和振动分析, 计算了 5ATNTZ 键长及键角参数, 对 5ATNTZ 进行了静电势分析, 证明 5ATNTZ 结构稳定。使用 EXPLO5 软件计算了 5ATNTZ 的理论爆速为 $6\,997.00\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, 理论爆压为 20.42GPa 。

(2) 进行了 5ATNTZ 合成实验, 通过红外光谱、质谱、核磁共振和元素分析对其进行表征, 结果证实 5ATNTZ 被成功合成。DSC-TG 分析表明 5ATNTZ 的熔点约为 163°C , 第 1 个放热峰的峰温约为 236°C , 整个放热过程有 3 个明显的放热峰。摩擦及撞击敏感度测试表明 5ATNTZ 的摩擦感度值大于 360 N、撞击感度值大于 100 J, 极为钝感, 安定性极佳。

(3) 理论计算与实验测试结果表明 5ATNTZ 是一种性能优良的富氮物质, 有望作为气体发生剂中的产气剂。

参考文献:

[1] 汪焱钢, 卢冰熙, 叶文法, 等. α -(5-四唑基)氨基烷基磷酸酯的

合成及其生物活性[J]. 有机化学, 2002(11): 862-866.

- [2] Thomas M. Klapötke, Carles Miró Sabaté. 5-Aminotetrazolium 5-aminotetrazolates -new insensitive nitrogen-rich materials[J]. Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie, 2010, 635(12): 1 812-1 822.
- [3] Makhaeva G F, Lushchekina S V, Boltneva N P, et al. 9-Substituted acridine derivatives as acetylcholinesterase and butyrylcholinesterase inhibitors possessing antioxidant activity for Alzheimer's disease treatment[J]. Bioorganic & Medicinal Chemistry, 2017(25): 5 981-5 994.
- [4] Palysaeva N V, Gladyshekin A G, Vatsadze I A, et al. N-(2-fluoro-2,2-dinitroethyl) azoles: a novel assembly of diverse explosophoric building blocks for energetic compound design[J]. Organic Chemistry Frontiers, 2019(6): 249-255.
- [5] Gutowski K E, Rogers R D, Dixon D A. Accurate thermochemical properties for energetic materials applications. II. heats of formation of imidazolium-, 1,2,4-triazolium-, and tetrazolium-based energetic salts fromisodesmic and lattice energy calculations[J]. Journal of Physical Chemistry B, 2007, 111(18): 4 788-4 800.
- [6] Kamlet M J, Jacobs S J. Chemistry of detonation. I. simple method for calculating detonation properties of C-H-O-N explosives[J]. Journal of Chemical Physics, 1968(48): 23-35.
- [7] 金兴辉, 胡炳成, 贾欢庆, 等. 1,2,3-三氨基胍二硝基胍盐的合成与量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2013, 34(12): 2 821-2 826.
- [8] Xiaoni Qu, Sheng Zhang, Qi Yang, et al. Silver(I)-based energetic coordination polymers: synthesis, structure and energy performance[J]. New J. Chem., 2015(39): 7 849-7 857.
- [9] 李洪珍, 黄明, 李金山, 等. 3-硝基-1,2,4-三唑-5-酮羟胺盐的合成及其晶体结构[J]. 合成化学, 2007, 15(6): 714-718.
- [10] Savateev A, Liedel C, Tröger Müller S, et al. Halogen free 1,2,3-and 1,2,4-triazolide based ionic liquids: synthesis and properties[J]. Chemical Communications, 2017, 53(73): 10 192- 10 195.