

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 图书基本信息

书名：《含能化合物合成反应与过程》

13位ISBN编号：9787122103383

10位ISBN编号：7122103382

出版时间：2011-5

出版社：化学工业出版社

页数：337

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 前言

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 内容概要

《含能化合物合成反应与过程》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。

《含能化合物合成反应与过程》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。

## 书籍目录

### 1 绪论

- 1.1 含能化合物的概念
- 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
  - 1.2.2 含能化合物的分类
- 1.3 含能化合物的合成反应
  - 1.3.1 醛胺缩合反应
  - 1.3.2 曼尼希缩合反应
  - 1.3.3 直接硝化(硝解)反应
  - 1.3.4 间接硝化反应
  - 1.3.5 叠氮化反应
- 1.4 含能化合物的合成过程
  - 1.4.1 含能化合物合成工艺过程的特点
  - 1.4.2 含能化合物合成工艺进展
- 1.5 含能化合物合成反应与过程展望
  - 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
  - 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

#### 参考文献

### 2 含能化合物合成计算机辅助设计

- 2.1 含能化合物的分子设计
- 2.2 含能化合物的性能预估
  - 2.2.1 密度的预估
  - 2.2.2 生成焓的预估
  - 2.2.3 爆轰性能的计算与预估
  - 2.2.4 撞击感度的预估
- 2.3 含能化合物的计算机辅助合成路线设计
  - 2.3.1 计算机辅助合成路线设计的起源及发展
  - 2.3.2 计算机辅助合成路线设计在含能材料领域的意义
  - 2.3.3 计算机中的化学反应知识
  - 2.3.4 计算机辅助合成路线设计系统的分类
  - 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
  - 2.3.6 合成树的裁剪及合成路线优劣评价

#### 参考文献

### 3 氮杂环化合物的合成

- 3.1 氮杂四元环的合成
  - 3.1.1 1,3,3-三硝基氮杂环丁烷
  - 3.1.2 其他氮杂四元环
- 3.2 氮杂五元环的合成
  - 3.2.1 单咪唑环化合物
  - 3.2.2 5-硝基四唑及其盐类化合物
  - 3.2.3 五元氮杂环三唑类化合物
  - 3.2.4 4-氨基-3,5-二硝基吡唑(LLM.116)
  - 3.2.5 2,3,4-三硝基吡咯和2,3,4,5-四硝基吡咯
- 3.3 氮杂六元环的合成
  - 3.3.1 黑索今(RDX)母体环的合成
  - 3.3.2 1,3,5,5-四硝基-1,3-二氮杂环己烷(DNNC)的合成
  - 3.3.3 1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯(FOX.7)的合成

- 3.4 氮杂八元环的合成和机理
  - 3.4.1 DPT的合成
  - 3.4.2 TAT的合成
  - 3.4.3 小分子综合法
  - 3.4.4 其他小分子合成法
- 3.5 氮杂笼状化合物的合成
  - 3.5.1 氮杂笼状含能材料的合成进展
  - 3.5.2 CL.20的合成
  - 3.5.3 TEX的合成
- 3.6 氮杂环合成的新思路
  - 3.6.1 “点击化学”在氮杂环合成中的应用
  - 3.6.2 超分子策略在氮杂环合成中的应用

## 参考文献

- 4 氮杂环化合物的硝解
  - 4.1 氮杂环化合物的结构与?化特性
  - 4.2 硝解剂的特性及选择
  - 4.3 硝解反应机理及动力学
    - 4.3.1 硝酰阳离子结构与浓度特征
    - 4.3.2 RDX合成的硝解反应及机理
    - 4.3.3 HMX合成的硝解反应及其机理
    - 4.3.4 笼形氮杂环化合物的硝解反应

## 参考文献

- 5 含能芳香化合物的合成
  - 5.1 芳香化合物硝化概述
    - 5.1.1 芳香化合物的性质
    - 5.1.2 芳香化合物硝化反应机理简述
    - 5.1.3 芳香化合物硝化的发展动态
  - 5.2 离子液体中硝基芳香化合物的合成
    - 5.2.1 咪唑型离子液体中硝基芳香化合物的合成
    - 5.2.2 己内酰胺型离子液体中硝基芳香化合物的合成
    - 5.2.3 吡啶型离子液体中硝基芳香化合物的合成
    - 5.2.4 直链季铵盐型离子液体中硝基芳香化合物的合成
  - 5.3 无机固体酸催化作用下芳香化合物的硝化反应
    - 5.3.1 分子筛催化作用下芳香化合物的区域选择性硝化
    - 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
    - 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
    - 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
  - 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
    - 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
    - 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
    - 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
    - 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
    - 5.4.5 其他过渡金属盐对芳香化合物的催化硝化
  - 5.5 相转移催化剂在芳香化合物硝化反应中的应用
  - 5.6 微反应器在芳香化合物硝化反应中的应用
  - 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

## 参考文献

- 6 离子型含能化合物的合成
  - 6.1 概述

- 6.2 硝仿盐的合成
  - 6.2.1 硝仿的合成
  - 6.2.2 硝仿的分离、纯化
  - 6.2.3 硝仿盐的转化
- 6.3 二硝酰胺盐的合成
  - 6.3.1 ADN的合成
  - 6.3.2 其他二硝酰胺盐的合成
- 6.4 离子型富氮含能化合物的合成
  - 6.4.1 三唑类离子型富氮含能化合物的合成
  - 6.4.2 四唑类离子型富氮含能化合物的合成
  - 6.4.3 四嗪类离子型富氮含能化合物
- 6.5 离子型全氮化合物
  - 6.5.1 N+5离子盐的合成
  - 6.5.2 其他全氮离子的合成设想

## 参考文献

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

## 参考文献

- 8 强放热管式反应过程
  - 8.1 概述
  - 8.2 管式反应器中强放热反应模型举例
    - 8.2.1 管式反应器内硝化甘油反应简介
    - 8.2.2 管式反应器内质量和能量衡算
  - 8.3 管式反应器安全问题
    - 8.3.1 管式反应器的热交换能力
    - 8.3.2 管式反应器的本质安全问题举例

8.3.3 微管传热现象研究进展

8.4 微反应器在强放热反应中的应用

8.4.1 微反应器发展概况

8.4.2 微反应器的特点

8.4.3 微反应器在含能化合物合成中的应用

8.5 小型管式反应器检测技术

8.5.1 光学检测法

8.5.2 电容检测法

8.5.3 电导检测法

参考文献

## 章节摘录

版权页：插图：在进行合成路线设计时，化学家会从一类或几类相关的反应中抽象出某些通用的反应模式，再结合实际需要形成一个或多个基本切实可行的合成反应，应用于某个特定目标化合物的合成。对化学家来说，合成路线设计是一种知识的学习与运用过程。从这个角度考虑，用计算机解决合成路线设计问题，可看作是用计算机模拟化学家的这种知识学习与运用的过程。在这个过程中，首先必须解决的问题，是将化学家头脑中的反应知识转变成计算机可处理的形式，即建立所谓的反应知识表述模型。因此，计算机辅助合成路线设计系统实际上是由反应知识库和合成分析两部分组成的。为了提高系统的创新能力，就必须使系统具备与已有知识作类比和外推的能力。因此，在建立反应知识库的时候，应尽可能全地提供反应条件、反应类型、反应可能的适用范围等信息，即让系统知道此种反应对目标化合物的适用性，反应条件对目标分子中其他官能团产生的影响，或者反应起始物中官能团的存在是否会抑制反应的发生（或产生大量的副产物）等知识，以便决定应采取的应对措施。为了提高程序的外推能力，使计算机辅助合成路线设计系统更加智能化，化学家们尝试在反应知识的表达模型中加入反应的可能适用范围。例如，哪些官能团可以参与反应、反应的温度范围为多少、反应体系的pH值范围为多少、对较敏感基团在酸、碱、氧化剂、还原剂等存在的条件下是否会发生反应、需不需要采取基团的保护、钝化等保护策略。

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 编辑推荐

《含能化合物合成反应与过程》由化学工业出版社出版。

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 精彩短评

1、内容比较不错，感觉挺适合化学专业的同学来作为参考书！

# 《含能化合物合成反应与过程》

## 版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)