

Angewandte Berichtigung

Hypergolic Ionic Liquids with the 2,2-Dialkyltriazanium Cation

H. Gao, Y.-H. Joo, B. Twamley, Z. Zhou,*
J. M. Shreeve* ————— 2830–2833

Angew. Chem. 2009, 121

DOI: 10.1002/ange.200900094

In dieser Zuschrift führte die falsche G2-Enthalpie „–56.944771 (see Table S2 in Supporting Information)“ für das NH_4^+ -Kation zu falschen berechneten Bildungswärmen der 2,2-Dialkyltriazanium-Kationen. Der korrekte Wert beträgt „–56.777599.“

Dieser Fehler entstand durch die Eingabe falscher Parameter für „Charge“ und „Multiplicity“ bei der G2-Rechnung für das NH_4^+ -Kation; anstelle der korrekten Werte „Charge = 1; Multiplicity = 1“ wurde „Charge = 0; Multiplicity = 2“ verwendet. Als Folge dieses Fehlers sind die Werte für $\Delta H_f^{\text{cation}}$, ΔH_f , P , vD und I_{sp} der Salze **1** bis **7** in Tabelle 1 falsch. Die korrigierte Tabelle 1 ist hier wiedergegeben.

Überdies muss der Satz „All of the 2,2-dimethyl triazanium salts have positive heats of formation with **6** the highest (905 kJ mol^{–1}, Table 1)“ auf S. 2832, linke Spalte, durch „Five 2,2-dimethyl triazanium salts have positive heats of formation with **6** the highest (465.4 kJ mol^{–1}, Table 1).“ ersetzt werden.

Alle übrigen Ergebnisse und Schlussfolgerungen dieser Zuschrift bleiben von diesem Fehler unbeeinflusst. Die Autoren entschuldigen sich für ihren Rechenfehler.

Table 1: Properties of energetic 2,2-dimethyltriazanium salts.^[a]

Salts	$d^{[b]}$	$T_m^{[c]}$	$T_d^{[d]}$	Ignition delay ^[e] N_2O_4	WFNA	Lattice energy ^[f]	$\Delta H_f^{[f]}$ cation	$\Delta H_f^{[f]}$ anion	$\Delta H_f^{[f]}$	$P^{[g]}$	$vD^{[h]}$	$I_{sp}^{[i]}$	$IS^{[j]}$
1 ^[k]	1.47	–	–	26	nh ^[l]	576.7	756.8	–230.3	–50.2	–	–	–	> 60
2	1.26	–0.19	145.7	8	16	501.2	756.8	–27.1	228.5	16.0	7169	226	> 60
3	1.15	10.7	134.2	sh ^[m]	22 ^[l]	506.5	756.8	113.4	363.7	12.1	6516	201	> 60
4	1.48	–	134.2	nh ^[l]	nh ^[l]	490.9	756.8	–127.7	138.2	21.2	7644	227	> 60
5	1.35	47.8	142.5	nh ^[l]	nh ^[l]	492.2	756.8	32.2	296.8	15.5	7009	211	> 60
6	1.20	74.4	153.3	nh ^[l]	nh ^[l]	491.7	756.8	200.3	465.4	11.1	6207	190	> 60
7	1.47	99.0	145.6	10	4	544.5	756.8	–307.9	–95.6	22.2	8034	228	> 60
IL A ^[n]	1.25	–61	–	–	15	481.4	908.0	113.4	540	8.9	5721	186.7	–
IL B ^[o]	1.41 ^[p]	–66	–	–	31	525.8	895.6	113.4	483	16.2	7158	213.3	–

[a] The P , vD , and I_{sp} values of salts **2** to **7** were calculated using Cheetah 6.0 instead of Cheetah 5.0. [b] Density [g cm^{–3}]. [c] Melting point [°C] (from DSC measurement with $b = 10^\circ\text{C min}^{-1}$). [d] Decomposition temperature [°C], DSC onsets from measurement with $b = 108^\circ\text{C min}^{-1}$. [e] [ms].

[f] Heat of formation [kJ mol^{–1}]. [g] Detonation pressure [GPa]. [h] Detonation velocity [m s^{–1}]. [i] Specific impulse measured in seconds (additional information). [j] Impact sensitivity [J] (BAM Fallhammer). [k] The Cheetah calculation for salt **1** failed. [l] nh = not hypergolic. [m] Hypergolic when a second drop of fuel was dropped into N_2O_4 . [n] 1-(2-Pentynyl)-3-methylimidazolium dicyanamide (ref. [3]). [o] 1-Methyl-4-amino-1,2,4-triazolium dicyanamide (ref. [3]). [p] Calculated (ref. [5f]).