

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ И ВЗРЫВЧАТЫХ ХАРАКТЕРИСТИК АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРАЗОЛФУРАЗАНОВ И ТЕТРАЗОЛФУРОКСАНОВ

Д. В. Хахимов¹, Т. С. Пивина²

Аннотация: Методами квантовой химии смоделировано строение и вычислены теплоты образования ряда аммониевых солей замещенных тетразолфуразанов и тетразолфуроксанов. На основе оригинальных методик оценены молекулярные объемы, энтальпии сублимации и плотности молекулярных кристаллов (МК) соединений. Вычислены некоторые взрывчатые характеристики веществ.

Ключевые слова: аммониевые соли; тетразолфуразаны; тетразолфуроксаны; энтальпия образования; энтальпия сублимации; молекулярный объем; квантово-химические методы; метод Дженкинса–Глэссера

Литература

1. *Sinditskii V. P., Burzhava A. V., Sheremetev A. B., Aleksandrova N. S.* Thermal and combustion properties of 3,4-Bis(3-nitrofurazan-4-yl)furoxan (DNTF) // *Propell. Explos. Pyrot.*, 2010. Vol. 35. P. 1–6.
2. *Gao H., Shreeve J. M.* Azole-based energetic salts // *Chem. Rev.*, 2011. Vol. 6. P. 7377.
3. *Wei H., Zhang J., He C., Shreeve J. M.* Energetic salts based on furazan-functionalized tetrazoles: Routes to boost energy // *Chem. Eur. J.*, 2015. Vol. 21. P. 8607–8612.
4. *Klapotke T. M., Witkowski T. G.* Nitrogen-rich energetic 1,2,5-oxadiazole-tetrazole-based energetic materials // *Propell. Explos. Pyrot.*, 2015. Vol. 40. P. 366–373.
5. *Fershtat L. L., Epishina M. A., Kulikov A. S., et al.* An efficient access to (1H-tetrazol-5-yl)furoxan ammonium salts via a two-step dehydration/[3 + 2]-cycloaddition strategy // *Tetrahedron.*, 2015. Vol. 71. P. 6764–6775.
6. *Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С.* Метод оценки термодимических свойств соединений солевой структуры // *Горение и взрыв*, 2014. Вып. 7. С. 277–287.
7. *Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al.* Gaussian 98 Revision A.11.3. — Pittsburgh, PA, USA: Gaussian Inc., 2002.
8. *Khakimov D. V., Dalinger I. L., Pivina T. S.* Quantum chemical modeling of the thermochemical characteristics and acidity of polynitroazole salts // *Comput. Theoret. Chem.*, 2015. Vol. 1063. P. 24–28.

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, 7933765@mail.ru

²Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, tsp@ioc.ac.ru

9. *Yin P., Shreeve J. M.* From N-nitro to N-nitroamino: Preparation of high-performance energetic materials by introducing nitrogen-containing ions // *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2015. doi: 10.1002/anie.201507456.
10. *Jenkins H. D. B., Roobottom H. K., Passmore J., Glasser L.* Relationships among ionic lattice energies, molecular (formula unit) volumes, and thermochemical radii // *Inorg. Chem.*, 1999. Vol. 38. P. 3609–3620.
11. *Jenkins H. D. B., Tudela D., Glasser L.* Lattice potential energy estimation for complex ionic salts from density measurements // *Inorg. Chem.*, 2002. Vol. 41. P. 2364–2367.
12. *Kamlet M. J., Jacobs S. J.* Chemistry of detonations. I. A simple method for calculating detonation properties of C–H–N–O explosives // *J. Chem. Phys.*, 1968. Vol. 48. P. 23–35.
13. *Keshavarz M. H.* Correlations for predicting detonation temperature of pure and mixed CNO and CHNO explosives // *Indian J. Eng. Mat. Sci.*, 2005. Vol. 12. P. 159–164.

Поступила в редакцию 18.11.15