

ВКЛАД АЗИД-АНИОНА В ЭНТАЛЬПИЮ ОБРАЗОВАНИЯ ЭНЕРГОЕМКИХ СОЛЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Д. В. Хакимов¹, С. А. Дегтярев², Т. С. Пивина³

Аннотация: Новый метод оценки энтальпий образования солевых соединений (MICCM, method of ions and cosystals contribution mixing) был применен для солей азотистоводородной кислоты. Метод основан на моделировании кристаллических упаковок двух типов: «истинной» соли в ионной форме и квазисоли в виде сокристалла с последующими расчетами усредненного значения энтальпий образования этих двух форм. Эффективность метода подтверждена сравнением результатов расчета с экспериментальными данными, полученными калориметрией сжигания.

Ключевые слова: метод атом-атомных потенциалов; квантово-химические методы; моделирование кристаллической структуры; энтальпия сублимации; энтальпия образования; азиды

DOI: 10.30826/CE23160211

EDN: OMNWHF

Литература

1. Thermochemical kinetics / Ed. S. W. Benson. — New York, NY, USA: Wiley, 1968. 223 p.
2. Sunner S., Mansson M. Combustion calorimetry: Experimental chemical thermodynamics. — 1st ed. — Pergamon Press, 1979. 454 p.
3. Матюшин Ю. Н., Воробьев А. Б., Конькова Т. С. Калориметр сжигания: А.с. СССР 1221568 // Б.И., 1986. № 12.
4. Mallouk T. E., Rosenthal G. L., Muller G., Busasco R., Bartlett N. Fluoride ion affinities of germanium tetrafluoride and boron trifluoride from thermodynamic and structural data for (SF₃)₂GeF₆, ClO₂GeF₅, and ClO₂BF₄ // Inorg. Chem., 1984. Vol. 23. P. 3167–3173. doi: 10.1021/ic00188a028.
5. 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. doi: 10.1021/ic011216k.
6. Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С. Метод оценки термодинамических свойств соединений солевой структуры // Горение и взрыв, 2014. Т. 7. С. 277–287.
7. Khakimov D. V., Pivina T. S. A new method for predicting the enthalpy of salt formation // J. Phys. Chem. A, 2022. Vol. 126. P. 5207–5214. doi: 10.1021/acs.jpca.2c01114.
8. Gao H., Shreeve J. M. Azole-based energetic salts // Chem. Rev., 2011. Vol. 111. P. 7377–7436. doi: 10.1021/cr200039c.
9. Fischer N., Fischer D., Klapötke T. M., Piercey D. G., Stierstorfer J. Pushing the limits of energetic materials — the synthesis and characterization of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate // J. Mater. Chem., 2012. Vol. 22. P. 20418–20422. doi: 10.1039/C2JM33646D.
10. Zhang J., Dharavath S., Mitchell L. A., Parrish D. A., Shreeve J. M. Energetic salts based on 3,5-bis(dinitromethyl)-1,2,4-triazole monoanion and dianion: Controllable preparation, characterization, and high performance // J. Am. Chem. Soc., 2016. Vol. 138. No. 24. P. 7500–7503. doi: 10.1021/jacs.6b03819.
11. Glasser L., Jenkins H. D. B., Klapötke T. M. Is the Volume-Based Thermodynamics (VBT) approach valid for the estimation of the lattice enthalpy of salts containing the 5,5'-(tetrazolate-1N-oxide) dianion? // Z. Anorg. Allg. Chem., 2014. Vol. 640. P. 1297–1299. doi: 10.1002/zaac.201400007.
12. Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Мирошниченко Е. А., Махов М. Н., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В. Энергетические свойства производных 1,2,4-триазола // Горение и взрыв, 2018. Т. 11. № 4. С. 90–99. doi: 10.30826/CE18110410.
13. Chiglien G., Etienne J., Jaulmes S., Laruelle P. Structure cristalline de l'azoture d'hydrazinium N₅H₅ // Acta Crystallogr., 1974. Vol. B30. P. 2229–2233. doi: 10.1107/S056774087406790.
14. Bracuti A. J., Extime M. W. 1,2,3-Triaminoguanidinium azide (TAZ) structure // J. Cryst. Spectrosc., 1990. Vol. 20. P. 31–35. doi: 10.1007/BF01181672.
15. Haiges R. CSD communication, 2018. doi: 10.5517/ccdc.csd.cc21bg95.
16. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Petersson G. A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A., Bloino J., Janesko B. G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H. P., Ortiz J. V., Izmaylov A. F., Sonnenberg J. L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V. G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery J. A., Jr., Peralta J. E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J. J.,

¹Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук; АО ГНЦ «Исследовательский центр им. М. В. Келдыша», 7933765@mail.ru

²АО ГНЦ «Исследовательский центр им. М. В. Келдыша», degtyarev@kerc.msk.ru

³Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, tsp@ioc.ac.ru

- Brothers E., Kudin K. N., Staroverov V. N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J. C., Iyengar S. S., Tomasi J., Cossi M., Millam J. M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J. W., Martin R. L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J. B., Fox D. J.* 2016. Gaussian 09, Revision D.01. — Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc.
17. *Grimme S.* Density functional theory with London dispersion corrections // *Wires. Comput. Mol. Sci.*, 2011. Vol. 1. P. 211–228. doi: 10.1002/wcms.30.
 18. *Pertsin A. J., Kitaigorodsky A. I.* The Atom-Atom potential method. — Berlin–Heidelberg: Springer, 1987. 397 p.
 19. *Momany F. A., Carruthers L. M., McGuire R. F., Scheraga H. A.* Intermolecular potentials from crystal data. III. Determination of empirical potentials and application to the packing configurations and lattice energies in crystals of hydrocarbons, carboxylic acids, amines, and amides // *J. Phys. Chem.*, 1974. Vol. 78. P. 1595–1620. doi: 10.1021/j100609a005.
 20. *Дзябченко А. В.* Мультипольная аппроксимация электростатического потенциала молекул // *Ж. физ. химии*, 2008. Т. 82. № 5. С. 875–884. EDN: IJUVT R.
 21. *Дзябченко А. В.* От молекулы к твердому телу: предсказание структур органических кристаллов // *Ж. физ. химии*, 2008. Т. 82. № 10. С. 1861–1870. EDN: JSJTZJ.
 22. *Cruz-Cabeza A. J., Pidcock E., Day G. M., Motherwell W. D. S., Jones W.* Space group selection for crystal structure prediction of solvates // *CrystEngComm*, 2007. Vol. 9. P. 556–560. doi: 10.1039/B702073B.
 23. *Khakimov D. V., Dzyabchenko A. V., Pivina T. S.* Crystal structure prediction of bifurazano[3,4-b:3',4'-f]furoxano[3'',4''-d]-oxacycloheptatriene (BFFO) in the experimentally known monohydrated and proposed anhydrous forms // *Propell. Explos. Pyrot.*, 2019. Vol. 44. P. 1528–1534. doi: 10.1002/prop.201900252.
 24. *Khakimov D. V., Zelenov V. P., Baraboshkin N. M., Pivina T. S.* The unusual combination of beauty and power of furoxano-1,2,3,4-tetrazine 1,3-dioxides: A theoretical study of crystal structures // *J. Mol. Model.*, 2019. Vol. 25. P. 107. doi: 10.1007/s00894-019-3986-7.
 25. *Хакимов Д. В., Дзябченко А. В., Пивина Т. С.* Компьютерное моделирование кристаллической структуры изомеров тетразинотетразинтетраоксида (ttto) с одной и двумя независимыми молекулами в элементарной ячейке // *Известия Академии наук. Сер. химическая*, 2020. № 2. С. 212–217. EDN: TZMLWM.
 26. *Khakimov D. V., Fershtat L. L., Pivina T. S., Makhova N. N.* Nitrodiaziridines: Unattainable yet, but desired energetic materials // *J. Phys. Chem. A*, 2021. Vol. 125. No. 18. P. 3920–3927. doi: 10.1021/acs.jpca.1c02960.
 27. *Montgomery J. J. A., Frisch M. J., Ochterski J. W., Petersson G. A.* A complete basis set model chemistry. VII. Use of the minimum population localization method // *J. Chem. Phys.*, 2000. Vol. 112. P. 6532–6542. doi: 10.1063/1.481224.
 28. *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 from isodesmic and lattice energy calculations // *J. Phys. Chem. B*, 2007. Vol. 111. No. 18. P. 4788–4800. doi: 10.1021/jp066420d.
 29. *Cruz-Cabeza A. J., Reutzgel-Edens S. M., Bernstein J.* Facts and fictions about polymorphism // *Chem. Soc. Rev.*, 2015. Vol. 44. P. 8619–8635. doi: 10.1039/C5CS00227C.

Поступила в редакцию 28.03.2023