

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛА*

Т. С. Конькова¹, Ю. Н. Матюшин², Е. А. Мирошниченко³, М. Н. Махов⁴, А. Б. Воробьев⁵, А. В. Иноземцев⁶

Аннотация: Методом бомбовой калориметрии измерены энергии сгорания динитропиразола, а также модельных и энергоемких производных 1,2,4-триазола. На основании экспериментальных данных определены энтальпии образования указанных соединений в стандартном состоянии. Полученные данные наряду с имеющимися в литературе позволили вычислить величины вкладов 1,2,4-триазола и функциональных групп в энтальпию образования соединений. В литературе имеются работы, в которых описан синтез солевых структур на основе 1,2,4-триазола, рассчитаны их энтальпии образования и взрывчатые характеристики. По мнению авторов, для некоторых соединений приведенные энтальпии образования значительно завышены, что привело к заметному преувеличению их взрывчатых свойств. Используя найденные вклады для этих же солевых соединений, в работе рассчитаны энтальпии образования и по полученным величинам оценены взрывчатые характеристики. Полученные результаты сопоставлены с приведенными в литературе данными.

Ключевые слова: калориметрия; энтальпия сгорания; энтальпия образования; производные 1,2,4-триазола; взрывчатые характеристики

DOI: 10.30826/CE18110410

Литература

1. The ICT-Database of thermochemical values and the ICT-thermodynamic code. — Pfinztal, Berghausen: Fraunhofer Institut Chemische Technologie, 2004.
2. Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В., Матюшин Ю. Н. Калориметрия энергоемких соединений // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 260–270.
3. Kon'kova T. S., Matyushin Yu. N., Miroshnichenko E. A., Vorob'ev A. B. The thermochemical properties of dinitramidic acid salts // Russ. Chem. B., 2009. Vol. 58. No. 10. P. 1–8.
4. CODATA key values for thermodynamics / Eds. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev. — New York, Washington, Philadelphia, London, 1989. Final Report of the CODATA Task Group on Key Values for Thermodynamics.
5. Hermann T., Klapötke T. M., Krumm B., Stierstorfer J. Highly energetic 3-trinitromethyl-5-nitramino-1H-1,2,4-triazole — synthesis and investigation // 19th Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials Proceedings. — Pardubice: University of Pardubice, 2016. Vol. 2. P. 583–590.
6. Klapötke T. M., Schmid P. C., Stierstorfer J. Investigation on the energetic performance and thermal stability of N-bonded nitramines // 19th Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials Proceedings. — Pardubice: University of Pardubice, 2016. Vol. 2. P. 635–641.
7. Klapötke T. M., Witkowski T. G., Wilk Z., Hadzik J. Investigation of initiating of detonators containing TKX-50, MAD-XI, PETNC, DAAF, RDX, HMX or PETN as a base charge // 19th Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials Proceedings. — Pardubice: University of Pardubice, 2016. Vol. 2. P. 642–656.
8. Fischer N., Fischer D., Klapötke T. M. 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.
9. Konkova T. S., Matyushin J. N., Miroshnichenko E. A., Asachenko A. F., Dzhevakov P. B. Thermochemical properties TKX-50 (Dihydroxylammonium-5,5-bistetrazole-1,1'-diolate) // 47th Annual Conference (International) of ICT. — Karlsruhe, Germany, 2016. P. 90/1–90/8.
10. Kamlet M. J., Jacobs S. J. Chemistry of detonation.

*Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания по темам «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», АААА-А17-117040610346-5 «Создание синтетических жидких топлив для военной авиации и ракетно-космической техники и разработка новых технологий получения компонентов специальных топлив», АААА-А18-118031590088-8 и «Создание высокоэнергетических материалов нового поколения и исследование их характеристик», АААА-А18-118031490034-6.

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm@polymer.chph.ras.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, makhov@polymer.chph.ras.ru

⁵Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm07@mail.ru

⁶Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectrl@yandex.ru

- I. A simple method for calculating detonation properties of C–H–N–O explosives // *J. Chem. Phys.*, 1968. Vol. 48. P. 23–35.
11. *Махов М. Н., Архипов В. И.* К расчету скорости разлета оболочки // *Физика горения и взрыва*, 1989. Т. 25. № 3. С. 87–89.
12. *Физика взрыва* / Под ред. Л. П. Орленко. — 3-е изд. — М.: Физматлит, 2002. Т. 1. 832 с.
13. *Makhov M. N.* Explosion heat and metal acceleration ability of high explosives // 32nd Annual Conference (International) of ICT Proceedings. — Pfinztal, Germany, 2001. P. 1/97–11/97.

Поступила в редакцию 12.11.18