

ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИТРОФЕНИЛТЕТРАЗОЛОВ*

Т. С. Конькова¹, Е. А. Мирошниченко², Ю. Н. Матюшин³, А. Б. Воробьев³,
Я. О. Иноземцев⁴, А. В. Иноземцев⁴, О. В. Серушкина⁵, И. Л. Далингер⁶

Аннотация: Экспериментально измерены энергии сгорания ряда азотсодержащих ароматических соединений — производных нитрофенилтетразолов. На основе полученных характеристик рассчитаны энтальпии сгорания и образования в стандартном состоянии этих соединений. Установлено, что введение в ароматические структуры бензола и нитробензола высокоэнтальпийного фрагмента тетразола значительно повышает энергетику соединений по сравнению с введением в эти же структуры азасиднонового фрагмента.

Ключевые слова: энтальпии сгорания и образования; нитрофенилы; азасидноновая группа; тетразолы

DOI: 10.30826/CE19120215

Литература

1. Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В., Матюшин Ю. Н. Калориметрия энергоёмких соединений // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 260–270.
2. Конькова Т. С., Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Воробьев А. Б., Иноземцев Я. О., Далингер И. Л., Шкинева Т. К., Шевелев С. А. Энергии солеобразования гетероциклических соединений // Горение и взрыв, 2015. Т. 8. № 2. С. 174–185.
3. 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.
4. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. — College Station, TX, USA: Thermodynamic Research Center, 1994. Vol. 1. 200 p.
5. Конькова Т. С., Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Воробьев А. Б., Иноземцев Я. О., Иноземцев А. В., Серушкина О. В., Далингер И. Л. Термохимические свойства фенилазасиднонов // Горение и взрыв, 2018. Т. 11. № 3. С. 125–129.
6. Stull D. R., Westrum E. F., Sinke G. C. The chemical thermodynamics of organic compounds. — London, 1971. 807 p.
7. Suntsova M. A., Dorofeeva O. V. Use of G4 theory for the assessment of inaccuracies in experimental enthalpies of formation of aromatic nitro compounds // J. Chem. Eng. Data, 2016. No. 1. P. 313–329.
8. The ICT-Database of Thermochemical Values and the ICT-Thermodynamic Code. — Pfinztal, Berghausen: Fraunhofer Institute for Chemical Technology, 1997.

Поступила в редакцию 18.01.19

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-29-01094-офи_м) и частично за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 44.8 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоёмких материалов и разработка научных основ управления этими процессами (тема 0082-2014-0012)» и «Создание синтетических жидких топлив для военной авиации и ракетно-космической техники и разработка новых технологий получения компонентов специальных топлив (тема 0082-2018-0004)».

¹ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, taskon@mail.ru

² Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

³ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ynm07@mail.ru

⁴ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectr1@yandex.ru

⁵ Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, olgvikser@rambler.ru

⁶ Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, dalinger@ioc.ac.ru