

## ТЕРМОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕЗОИОННЫХ 1,2,3,4-ОКСАТРИАЗОЛОВ\*

Т. С. Конькова<sup>1</sup>, Е. А. Мирошниченко<sup>2</sup>, Ю. Н. Матюшин<sup>3</sup>, А. Б. Воробьев<sup>3</sup>,  
Я. О. Иноземцев<sup>4</sup>, А. В. Иноземцев<sup>4</sup>, О. В. Серушкина<sup>5</sup>, И. Л. Далингер<sup>6</sup>

**Аннотация:** Экспериментально определены энергии сгорания ряда новых мезоионных пятичленных гетероциклических соединений арилазасиднонов и арилазасидноиминов, содержащих донорные и акцепторные заместители в разных положениях фенильного кольца. Калориметрические измерения энергий сгорания выполнены на прецизионном автоматическом калориметре сжигания с изотермической оболочкой (конструкции лаборатории термодинамики энергоемких соединений ФИЦ ХФ РАН), разработанном специально для сжигания энергоемких соединений. При достаточно большом объеме бомбы (210 см<sup>3</sup>) калориметр имеет невысокий энергетический эквивалент (550 ккал/К), что позволяет использовать небольшие количества высокоэнергоемких веществ в опыте и тем самым снизить опасность перехода горения во взрыв. На основе полученных величин рассчитаны энтальпии сгорания и образования в стандартном состоянии потенциально энергоемких нитроарилпроизводных 1,2,3,4-оксатриазолий-5-олатов и 1,2,3,4-оксатриазолий-5-аминидов. Оценено влияние электронных свойств арильного заместителя. Установлено, что вклад азасидноинового фрагмента дифенильных производных составляет –189 ккал/моль. Расчетные величины для вклада азасидноинового цикла зависят от положения и природы заместителя в бензоле, и поэтому значение вклада лежит в интервале от –105 до –126 ккал/моль. На основе полученных данных по энтальпиям образования производных 1,2,3,4-оксатриазолов и установленных из них величин по вкладам фрагментов возможно прогнозирование термохимических характеристик гипотетических соединений с азасидноновыми и азасидноиновыми фрагментами.

**Ключевые слова:** калориметр; энтальпии сгорания; энтальпия образования; азасиднон; азасидноимин; мезоионный фрагмент

DOI: 10.30826/CE20130214

### Литература

1. Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В., Матюшин Ю. Н. Калориметрия энергоемких 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. Final Report of the CODATA Task Group on Key Values for Thermodynamics / Eds. J. D. Cox, D. D. Wagman, V. A. Medvedev. — New York, Washington, London, 1989.
4. Pedley J. B. Thermochemical data and structures of organic compounds. — College Station, TX, USA: Thermodynamic Research Center College Station, 1994. Vol. 1. 200 p.
5. 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.
6. Конькова Т. С., Мирошниченко Е. А., Матюшин Ю. Н., Воробьев А. Б., Иноземцев Я. О., Далингер И. Л., Шкинева Т. К., Шевелев С. А. Термохимические свойства фенилазасиднонов // Горение и взрыв, 2018. Т. 11. № 3. С. 125–129.

Поступила в редакцию 14.05.2020

\* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-29-01094 офи\_м и частично за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 44.8 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами, тема (0082-2014-0012)».

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

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

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, unp@polymer.chph.ras.ru

<sup>4</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectrl@yandex.ru

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

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