

ЭНЕРГИИ СОЛЕОБРАЗОВАНИЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Т. С. Конькова¹, Е. А. Мирошниченко², Ю. Н. Матюшин³, А. Б. Воробьев⁴, Я. О. Иноземцев⁴, И. Л. Далингер⁵, Т. К. Шкинева⁶, С. А. Шевелев⁷

Аннотация: Измерены энергии сгорания 3,4,5-тринитропиразола, 1-метил-3,4,5-тринитропиразола и аммониевой соли 3,4,5-тринитропиразола. Рассчитаны энтальпии образования этих соединений и оценена энергия, теряемая энтальпиями аниона и катиона при солеобразовании в стандартном состоянии. Эта величина сопоставлена с аналогичными величинами для 3,4-динитропиразола, 3,5-динитропиразола, 2,4-динитроимидазола и 4,5-динитроимидазола. Установлено, что энергия солеобразования коррелирует с NH-кислотностью исходных пиразолов.

Ключевые слова: 3,4,5-тринитропиразол; 1-метил-3,4,5-тринитропиразол; аммониевая соль 3,4,5-тринитропиразола; энергия сгорания; энтальпия образования; энтальпия солеобразования

Литература

1. Gao H., Shreeve J. M. Azole-based energetic salts (review) // Chem. Rev., 2011. Vol. 111. No. 11. P. 7377–7436.
2. Матюшин Ю. Н., Конькова Т. С. Метод оценки термодимических свойств соединений солевой структуры // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 277–287.
3. Janssen J. W. A. M., Koeners H. J., Kruse C. G., Habraken C. L. Pyrazoles. XII. The preparation of 3(5)-nitropyrazoles by thermal rearrangement of N-nitropyrazoles // J. Org. Chem., 1973. Vol. 38. No. 10. P. 1777–1782.
4. Cho J. R., Kim K. J., Cho S. G., Kim J. K. Synthesis and characterization of 1-methyl-2,4,5-trinitroimidazole (MTNI) // J. Het. Chem., 2002. Vol. 39. P. 141–147.
5. Katritzky A. R., Sing S., Kirichenko K., Smiglak M., Holbrey J. D., Reichert W. M., Spear S. K., Rogers R. D. In search of ionic liquids incorporating azolate anions // Chem. A Eur. J., 2006. Vol. 12. No. 17. P. 4630–4641.

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

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, eamir02@mail.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, unm@polymer.chph.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vectr1@yandex.ru

⁵Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, dalinger@ioc.ac.ru

⁶Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, tanya_shkineva@mail.ru

⁷Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, shevelev@ioc.ac.ru

6. *Dalinger I. L., Vatsadze I. A., Shkineva T. K., Popova G. P., Shevelev S. A.* The specific reactivity of 3,4,5-trinitro-1H-pyrazole // *Mendeleev Commun.*, 2010. Vol. 20. No. 5. P. 253–254.
7. *Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Матюшин Ю. Н.* Калориметр для контроля эффективности энергоемких систем и калорийности энергоресурсов // *Горение и взрыв*, 2009. Вып. 2. С. 156–160.
8. *Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Мирошниченко Е. А., Воробьев А. Б.* Термохимические свойства солей динитразовой кислоты // *Изв. Акад. наук. Сер. химия*, 2009. Т. 10. С. 1958–1965.
9. *Конькова Т. С., Мирошниченко Е. А., Воробьев А. Б., Иноземцев Я. О., Матюшин Ю. Н., Далингер И. Л., Шкинева Т., К., Шевелев С. А.* Термохимия аммониевых солей динитродиазолов // *Горение и взрыв*, 2013. Вып. 6. С. 251–254.
10. 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.
11. *Herve G., Roussel C., Graindorge H.* Selective preparation of 3,4,5-1H-pyrazole: A stable allcarbon — nitrated arene. *Angewandte Chemie / Supporting Information*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH, 2010. 50 p.
12. *Zhang Y., Parrish D. A., Shreeve J. M.* Synthesis and properties of 3,4,5-trinitropyrazole-1-ol and its energetic salts // *Energ. Salts J. Mater. Chem.*, 2012. Vol. 22. P. 12659–12665.
13. *Мирошниченко Е. А., Конькова Т. С., Матюшин Ю. Н., Иноземцев Я. О., Воробьев А. Б., Иноземцев А. В.* Термохимические свойства гетероазолов // *Горение и взрыв*, 2012. Вып. 5. С. 291–296.
14. *Catalan J., Abband J. L., Elguero J.* Basicity and acidity of azoles // *Adv. Het. Chem.*, 1987. Vol. 41, P. 187–274.

Поступила в редакцию 01.11.14