

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ТРИС(ПИРРОЛО)-, ТРИС(ДИАЗОЛО)БЕНЗОЛОВ И 1,3,5-АЗИНОВ КАК МОДЕЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ*

В. В. Парахин¹, В. М. Волохов², Д. Б. Лемперт³, Е. С. Амосова⁴, В. В. Воеводин⁵

Аннотация: На основе расчетных значений энтальпий образования ряда гипотетических трис(пирроло)-, трис(диазоло)бензолов и 1,3,5-азинов в газовой фазе оценены величины энтальпий образования этих соединений в конденсированной фазе. Проведен анализ их эффективности как компонентов (основных энергетических компонентов или пластификаторов связующего) смесевых модельных твердых ракетных топлив или как энергетических компонентов неметаллизированных твердых топлив (ТТ) для газогенераторных двигателей (ГГД). Установлено, что полинитропроизводные предложенных пиррол-, пиазол- и имидазолсодержащих тетрациклов могут найти применение в качестве пластификаторов активного связующего в составах смесевых ракетных топлив, в том числе на основе гидрида алюминия (ГА), металлического алюминия и в составах без металла, обеспечивающих более высокую баллистическую эффективность на всех трех ступенях ракетных систем (РС) по сравнению с аналогичными топливными композициями с использованием наиболее перспективных современных пластификаторов, например динитрофуразана (ДНФ), нитроглицерина (НГЦ) или тетранитрометана (ТНМ). Расчетами показано, что изученные тетрациклы, не содержащие нитрогрупп, могут служить в качестве высокоэнтальпийных компонентов (ВЭК) в топливных рецептурах для ГГД, обеспечивающих более высокую баллистическую эффективность относительно бинарной рецептуры диспергатора с каучуком.

Ключевые слова: высокоэнергетические материалы; твердые топлива; газогенераторный двигатель; тетрациклы; трис(пирроло)бензолы; трис(пирроло)1,3,5-азины; трис(диазоло)бензолы; трис(диазоло)1,3,5-азины; энтальпия образования; эффективный импульс

DOI: 10.30826/CE24170311

EDN: GGBJPI

Литература

1. Злотин С. Г., Далингер И. Л., Махова Н. Н., Тартаковский В. А. Нитросоединения — структурная основа перспективных энергоемких материалов и многоцелевые реагенты для органического синтеза // Успехи химии, 2020. Т. 89. № 1. С. 1–54. doi: 10.1070/RCR4908.
2. Tang J., Yang H., Cui Y., Cheng G. Nitrogen-rich tricyclic-based energetic materials // Materials Chemistry Frontiers, 2021. Vol. 5. No. 19. P. 7108–7118. doi: 10.1039/D1QM00916H.
3. Bennion J. C., Matzger A. J. Development and evolution of energetic cocrystals // Accounts Chem. Res., 2021. Vol. 54. No. 7. P. 1699–1710. doi: 10.1021/acs.accounts.0c00830.
4. Zlotin S. G., Churakov A. M., Egorov M. P., Fersh-tat L. L., Klenov M. S., Kuchurov I. V., Makhova N. N., Smirnov G. A., Tomilov Y. V., Tartakovsky V. A. Advanced energetic materials: Novel strategies and versatile applications // Mendeleev Commun., 2021. Vol. 31. No. 6. P. 731–749. doi: 10.1016/j.mencom.2021.11.001.
5. Zhou J., Zhang J., Wang B., Qiu L., Xu R., Sheremetev A. B. Recent synthetic efforts towards high energy density materials: How to design high-performance energetic structures? // FirePhysChem., 2021. Vol. 2. No. 2. P. 83–139. doi: 10.1016/j.fpc.2021.09.005.
6. Luo Y., Zheng W., Wang X., Shen F. Nitration progress of nitrogen-rich heterocyclic energetic compounds: A review // Molecules, 2022. Vol. 27. No. 5. P. 1465. doi: 10.3390/molecules27051465.
7. Yount J., Piercey D. G. Electrochemical synthesis of high-nitrogen materials and energetic materials // Chem. Rev., 2022. Vol. 122. No. 9. P. 8809–8840. doi: 10.1021/acs.chemrev.1c00935.

*Работа выполнена по темам государственных заданий, номера госрегистрации 124020100045-5 и 124013100856-9. Расчеты ресурсоемкими методами осуществлялись за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-71-00005).

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского Российской академии наук, vparakhin@ioc.ac.ru

²Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, vvm@icp.ac.ru

³Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, lempert@icp.ac.ru

⁴Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, aes@icp.ac.ru

⁵Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, voevodin@parallel.ru

8. Singh R. P., Gao H., Meshri D. T., Shreeve J. M. Nitrogen-rich heterocycles // High energy density materials. Structure and bonding / Ed. T. M. Klapötke. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2007. Vol. 125. P. 35–84. doi: 10.1007/430_2006_055.
9. Xie C., Pei L., Cai J., Yin P., Pang S. Imidazole-based energetic materials: A promising family of N-heterocyclic framework // Chem. — Asian J., 2022. Vol. 17. No. 21. P. e202200829. doi: 10.1002/asia.202200829.
10. She W., Xu Z., Zhai L., Zhang J., Huang J., Pang W., Wang B. Synthetic Methods towards energetic heterocyclic N-oxides via several cyclization reactions // Crystals, 2022. Vol. 12. No. 10. P. 1354. doi: 10.3390/cryst12101354.
11. Fershtat L. L. Recent advances in the synthesis and performance of 1,2,4,5-tetrazine-based energetic materials // FirePhysChem., 2023. Vol. 3. No. 1. P. 78–87. doi: 10.1016/j.fpc.2022.09.005.
12. Gao H., Zhang Q., Shreeve J. M. Fused heterocycle-based energetic materials // J. Mater. Chem. A, 2020. Vol. 8. No. 8. P. 4193–4216. doi: 10.1039/C9TA12704F.
13. Самсонов В. А., Володарский Л. Б., Королев В. Л., Хисамутдинов Г. Х. Синтез бензотриазола. 4-нитробензо[1,2-d:3,4-d']бистриазол и 4,4'-дикарбокси-5,5'-1H-1,2,3-триазол // Химия гетероцикл. соед., 1993. Т. 10. С. 1364–1367.
14. Хисамутдинов Г. Х., Королев В. Л., Пархоменко Т. Н., Шаронова В. М., Артемьева Е. С., Абдрахманов И. Ш., Смирнов С. П., Уграк Б. И. Синтез и свойства 1,2,4-триазоло[4,3-d]-1,2,4-триазоло-[3,4-f]фуразано[3,4-b]пиразинов // Изв. Акад. наук. Сер. хим., 1993. Т. 10. С. 1776–1778.
15. Старченков И. Б., Андрианов В. Г., Мишнев А. Ф. Химия фуразано-[3,4-b]пиразина. 7. Свойства 5,6-диамино- и 5,6-дигидразино-фуразано[3,4-b] пиразина // Химия гетероцикл. соед., 1999. Т. 4. С. 564–573.
16. Thottempudi V., Forohor F., Parrish D. A., Shreeve J. M. Tris(triazolo)benzene and its derivatives: High-density energetic materials // Angew. Chem. Int. Edit., 2012. Vol. 51. No. 39. P. 1–6. doi: 10.1002/anie.201205134.
17. Sheremetev A. B., Korolev V. L., Potemkin A. A., Aleksandrova N. S., Palysaeva N. V., Hoang T. H., Sinditskii V. P., Suponitsky K. Yu. Oxygen-rich 1,2,4-triazolo[3,4-d]-1,2,4-triazolo[3,4-f]furazano[3,4-b]pyrazines as energetic materials // Asian J. Org. Chem., 2016. Vol. 5. No. 11. P. 1388–1397. doi: 10.1002/ajoc.201600386.
18. Лемперт Д. Б., Шереметев А. Б. Полинитрометильные производные фуразано[3,4-e]ди([1,2,4]-триазоло)-[4,3-a:3',4'-c]пиразина как компоненты смесевых твердых ракетных топлив // Изв. Акад. наук. Сер. хим., 2018. Т. 11. С. 2065–2072.
19. Qu Y., Zeng Q., Wang J., Fan G., Huang J., Yang G. Synthesis and properties for benzotriazole nitrogen oxides (BTZO) and tris[1,2,4]triazolo[1,3,5]triazine derivatives // Int. J. Materials Science Applications, 2018. Vol. 7. No. 2). P. 49–57. doi: 10.11648/j.ijmsa.20180702.13.
20. Yang X., Lin X., Yang L., Zhang T. A novel method to synthesize stable nitrogen-rich polynitrobenzenes with π -stacking for high-energy-density energetic materials // Chem. Commun., 2018. Vol. 54. No. 73. P. 10296–10299. doi: 10.1039/c8cc05413d.
21. Дорофеев Е. М., Шереметев А. Б., Лемперт Д. Б. Влияние добавок алюминия на удельный импульс ракетных топлив на базе высокоэнтальпийных окислителей, содержащих NO₂- и NF₂- группы // Хим. физика, 2019. Т. 30. № 10. С. 33–40. doi: 10.1134/S0207401X19080041.
22. Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. Gaussian-4 theory using reduced order perturbation theory // J. Chem. Phys., 2007. Vol. 127. No. 12. P. 124105. doi: 10.1063/1.2770701.
23. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian 09, Revision B.01. Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc., 2010.
24. Volokhov V., Amosova E., Parakhin V., Lempert D., Akostelov I. Quantum-chemical study of some tris(pyrrolo)benzenes and tris(pyrrolo)-1,3,5-triazines // Supercomputing / Eds. V. Voevodin, S. Sobolev, M. Yakobovskiy, R. Shagaliev. — Lecture notes in computer science ser. — Cham: Springer, 2023. Vol. 14388. P. 177–189. doi: 10.1007/978-3-031-49432-1_14.
25. Westwell M. S., Searle M. S., Wales D. J., Williams D. Empirical correlations between thermodynamic properties and intermolecular forces // J. Am. Chem. Soc., 1995. Vol. 117. No. 18. P. 5013–5015. doi: 10.1021/ja00123a001.
26. Котомин А. А., Козлов А. С. Плотность органических соединений. Метод расчета плотности по вкладам фрагментов молекул. — СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2005. 38 с.
27. Волохов В. М., Парахин В. В., Амосова Е. С., Волохов А. В., Лемперт Д. Б., Зюбина Т. С. Квантовохимические расчеты энтальпии образования изомерных 5/6/5-трициклических производных тетразинов, аннелированных нитротриазолами // Хим. физика, 2024. Т. 43. № 1. С. 13–23.
28. Lempert, D. B., Nechiporenko G. N., Manelis G. B. Energetic characteristics of solid composite propellants and ways of energy increasing // Cent. Eur. J. Energ. Mat., 2006. Vol. 3. No. 4. P. 73–87.
29. Трусов Б. Г. Программная система TERRA для моделирования фазовых и химических равновесий // Сб. тез. докл. XIV Междунар. конф. по химической термодинамике. — СПб.: НИИ химии СПбГУ, 2002. С. 483–484.
30. Зюзин И. Н., Гудкова И. Ю., Лемперт Д. Б. Энергетические возможности N-динитро и N-тринитрометильных производных нитроазолов как компонентов смесевых твердых ракетных топлив // Хим. физика, 2020. Т. 39. № 9. С. 52–62. doi: 10.31857/S0207401X20090149.
31. Зюзин И. Н., Гудкова И. Ю., Лемперт Д. Б. Энергетические возможности некоторых производных 1,2,4,5-триазин N-оксидов как компонентов смесевых твердых ракетных топлив // Хим. физика, 2021. Т. 40. № 7. С. 24–34. doi: 10.31857/S0207401X2107013X.

32. Гудкова И. Ю., Зюзин И. Н., Лемперт Д. Б. Энергетические возможности 5,5'-азотетразол-1,1'-диола и его ониевых солей как компонентов смесевых твердых ракетных топлив // Хим. физика, 2022. Т. 41. № 1. С. 34–41. doi: 10.31857/S0207401X2201006X.
33. Зюзин И. Н., Гудкова И. Ю., Лемперт Д. Б. Энергетические возможности некоторых окислителей с двумя N-тринитрометилазольными фрагментами одной молекуле в качестве компонентов смесевых энергетических систем // Хим. физика, 2022. Т. 41. № 9. С. 45–54. doi: 10.31857/S0207401X2209014X.
34. Павловец Г. Я., Цуцуран В. И. Физико-химические свойства порохов и ракетных топлив. — М.: Изд-во Министерства обороны РФ, 2009. 248 с.
35. Лемперт Д. Б., Яновский Л. С., Разносчиков В. В., Аверьков И. С., Стольников А. М. О возможности повышения энергетических характеристик неметаллизованных твердых газогенераторных топлив // Боеприпасы и спецхимия, 2022. Т. 3. С. 36–44.
36. Зюзин И. Н., Дорофеев Е. М., Согласнова С. И., Лемперт Д. Б. Энергетические аспекты использования добавок к бинарным твердым топливам для газогенераторных двигателей // Боеприпасы и спецхимия, 2023. Т. 2. С. 70–78.
37. Кизин А. Н., Дворкин П. Л., Рыжова Г. Л., Лебедев Ю. А. Параметры для расчета стандартных энтальпий образования органических соединений в жидком состоянии // Изв. Акад. наук СССР. Сер. хим., 1986. Т. 2. С. 372–375.
38. Яновский Л. С., Лемперт Д. Б., Разносчиков В. В., Аверьков И. С., Стольников А. М. Оценка эффективности применения наполнителей в твердых неметаллизованных газогенераторных топливах // Боеприпасы и спецхимия, 2023. Т. 3. С. 98–107.

Поступила в редакцию 17.05.2024