

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ НЕКОТОРЫХ НИТРОЗАМЕЩЕННЫХ ГИПОТЕТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕТРАЗОЛОВ

И. Ю. Гудкова¹, Д. Б. Лемперт^{1,2}

¹Институт проблем химической физики Российской академии наук,
Россия, 142432, Московская обл., г. Черноголовка, пр. академика Семенова, 1

²Омский государственный технический университет,
Россия, 644050, г. Омск, пр. Мира, 11

Изучены энергетические возможности композиций смесового твердого ракетного топлива на основе некоторых нитрозамещенных производных тетразолов, которые пока являются гипотетическими, но обладают потенциалом для создания твердых ракетных топлив с повышенными энергетическими характеристиками, что подтверждается проведенными в данной работе термодинамическими расчетами.

Ключевые слова: производные тетразола, ракетное топливо, удельный импульс, окислитель, связующее.

Работа выполнена на средства ИПХФ РАН по теме 0089-2014-0019 «Создание высокоэнергетических материалов и технологий для разрабатываемых и перспективных систем» при финансовой поддержке программой Президиума РАН «Фундаментальные основы технологий двойного назначения...» (тема «Исследование новых подходов к созданию высокоэнергетических соединений повышенной эффективности») и гранта РНФ «Разработка научно-технических основ сжигания отделяющихся элементов конструкций ракет космического назначения с целью снижения площади районов их падения» (согл. 16-19-10091 от 18.05.2016 с Омским государственным техническим университетом).

Введение

Поиск новых энергоемких соединений является важной задачей как для прикладной, так и для фундаментальной науки. Во всем мире растет число работ, направленных на исследование возможностей получения новых высокоэнтальпийных соединений, которые могут использоваться для производства взрывчатых веществ (ВВ), порохов, ракетных топлив [1–11]. Разработки ведутся как в направлении синтеза таких соединений, так и в направлении «конструирования» новых, сегодня еще не полученных соединений и предварительной оценки их эксплуатационных свойств (в основном энтальпия образования, плотность, термическая стабильность, чувствительность к механическим воздействиям). Создано множество программ расчета энтальпии образования ΔH^0_p , плотности ρ и других физико-химических характеристик новых химических соединений, исходя из предполагаемой химической структуры [12–20]. Синтез множества новых химических соединений, особенно энергоемких, сложен и требует больших временных и материальных затрат, поэтому весьма целесообразно проводить предварительные теоретические оценки энергетических возможностей таких новых химических материалов, чтобы снизить долю напрасных экспериментальных работ.

Если большинство взрывчатых веществ в основном состоит из одного энергоемкого компонента, то для создания смесевых твердых ракетных топлив (СТРТ) мало иметь высокоэффективное индивидуальное вещество, а необходимо создать композицию, в которой обязательно должно содержаться полимерное связующее в определенном количестве

для обеспечения необходимых физико-механических свойств готового отвержденного топливного заряда и обеспечения необходимого уровня реологических свойств неотвержденной топливной массы. Поэтому энергетические свойства СТРТ определяются не только характеристиками основного компонента, но и всей рецептуры. И именно в результате удачного подбора компонентов и их соотношения в рецептуре можно добиться максимальной достижимой величины удельного импульса I_{sp} для имеющегося набора рассматриваемых компонентов. К сожалению, во многих публикациях, касающихся новых энергоемких соединений, как реально синтезированных, так пока еще гипотетических, авторы приводят величину удельного импульса, создаваемого исследуемым соединением в индивидуальном состоянии. Эта величина абсолютно ничего не говорит о потенциальных возможностях обсуждаемого компонента, потому что, как уже упоминалось выше, композиция СТРТ не может состоять из единственного компонента. Более того, оценка энергетического потенциала только по величине удельного импульса индивидуального (или индивидуальных) компонентов приведет к совершенно неверной оценке их потенциала [21]. Например, наиболее мощный окислитель аммониевая соль динитратовой кислоты (АДНА) в индивидуальном виде имеет $I_{sp} = \sim 170$ с (композиции же с ним достигают величин I_{sp} 260 с и выше [22]), тогда как один из самых менее энергоемких окислителей нитрат аммония в смеси с обычным углеводородным связующим дает $I_{sp} = 212$ с (хотя и это весьма немного).

В последнее время основной уклон в поиске новых компонентов для СТРТ — это CHNO -соединения с плотностью выше $1,8 \text{ г/см}^3$ и эн-

тальпией образования выше 2500–3000 кДж/кг. В основном это соединения на базе N-гетероциклов, содержащие фрагменты-окислители (N-оксиды, нитрогруппы, нитраминные и пр.). Как правило, эти соединения содержат мало водорода (вплоть до его полного отсутствия), но много азота [23]. Именно высокое содержание азота, точнее, связей >N-N<, -N=N- является причиной высокой энтальпии образования. Настоящая работа посвящена исследованию двух пока еще не синтезированных представителей класса высокоэнтальпийных полиазотистых энергетических соединений [24].

В работе [24] представлено несколько гипотетических производных тетразола, расчетными методами оценены некоторые их свойства. В данной работе мы рассматриваем два из представленных гипотетических соединений N,N-бис(1-нитро-1H-тетразол-5-ил) нитрамид $C_2N_{12}O_6$ (I) и 1-(динитроамино)-1H-тетразоло[1,5-d]тетразол $CN_{10}O_4$ (II). Выбраны они благодаря достаточно высокому, около 3000 кДж/кг, величинам энтальпии образования (ΔH_f^0) и достаточно высоким значениям плотности, около 1,95 г/см³. В них относительно высокое содержание азота (~60 мас. %), тогда как большинство высокоэнтальпийных органических соединений его содержат до 40–45 мас. %.

Расчетные величины стандартных энтальпий образования и плотности приведены в табл. 1.

Постановка задачи и методы исследования

В настоящей работе оценены энергетические характеристики композиций для СТРТ, содержащих в качестве основного компонента соединения I и II, а в качестве связующего — одно из двух типовых связующих — обычное углеводородное связующее (УС, $C_{72,15}H_{119,21}O_{0,68}$; стандартная энтальпия образования $\Delta H_f^0 = -393$ кДж/кг; $\rho = 0,92$ г/см³ [22]) и активное связующее (АС, $C_{18,96}H_{34,64}N_{19,16}O_{29,32}$; стандартная энтальпия образования $\Delta H_f^0 = -757$ кДж/кг; $\rho = 1,49$ г/см³) [25]. Рассматривали как бинарные безметалльные композиции компонент I или II +

связующее, так и составы, содержащие дополнительный энергетический компонент — алюминий.

Расчеты величин удельного импульса I_{sp} и температуры в камере сгорания T_c (при давлении в камере и на срезе сопла 4,0 и 0,1 МПа соответственно) проводили с помощью программы расчета высокотемпературных химических равновесий ТЕРРА [25]. Анализ эффективности исследуемых компонентов проводили по алгоритму, описанному в [26, 27]. Для сравнения баллистической эффективности композиций, имеющих разные плотности, при их использовании в двигателях с различными объемно-массовыми характеристиками использовали т.н. величины эффективных импульсов $I_{ef}(n)$ на разных ступенях ракетных систем (n — номер ступени) [28]

$$\begin{aligned} I_{ef}(1) &= I_{sp} + 100(\rho - 1,9), \\ I_{ef}(2) &= I_{sp} + 50(\rho - 1,8), \\ I_{ef}(3) &= I_{sp} + 25(\rho - 1,7). \end{aligned}$$

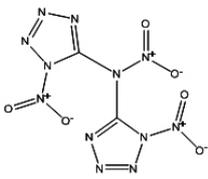
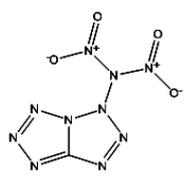
Эти величины характеризуют баллистическую эффективность топлива на соответствующих ступенях ракетных систем.

Поскольку составы, содержащие алюминий, имеют потери в реальном значении I_{sp} из-за образования конденсированной фазы в продуктах сгорания, а величина этих потерь оценивается в 0,22 % от значения I_{sp} на каждый 1 % алюминия [29], то величины эффективных импульсов с учетом этих потерь $I_{ef}^*(n)$ оценивают как $I_{ef}^*(n) = I_{ef}(n) - 0,0022 I_{sp}[Al]$, где [Al] — процентное содержание алюминия в композиции.

На данном этапе нас интересует только величина эффективного удельного импульса $I_{ef}^*(3)$, так как на нижних ступенях, где масса топлива в 4–10 раз выше, чрезвычайно важны стоимость компонентов и их чувствительность, поэтому подобные соединения, даже если и будут синтезированы, никак не смогут быть реально использованы на нижних ступенях.

Как было сказано выше, СТРТ должно содержать полимерное связующее, которое обеспечивает

Таблица 1. Расчетные свойства исследуемых соединений [24]
Table 1. Calculates properties of the compounds under consideration

Соединение	I	II
Брутто-формула, название	$C_2N_{12}O_6$ N,N-бис(1-нитро-1H-тетразол-5-ил) нитрамид	$CN_{10}O_4$ 1 (динитроамино)-1H-тетразоло [1,5-d]тетразол
Структура		
ρ^a [24]	1,951	1,961
ΔH_f^0 ^b [24]	784,4	677,1
ΔH_f^0 ^c	2722,7	3133,6
N^d	58,3	64,8
α^e	1,5	2,0

^a — плотность, г/см³
^b — стандартная энтальпия образования, кДж/моль
^c — стандартная энтальпия образования, кДж/кг
^d — процентное содержание азота в соединении, масс. %
^e — коэффициент обеспечения молекулы кислородом (для соединения $C_xH_yN_zO_w$ $\alpha = 2w/(4x + y)$)

удовлетворительные физико-механические характеристики и реологические свойства неотвержденной топливной массы. Достижение удовлетворительных показателей обычно достигается при объемном содержании связующего не ниже 18–19 об. %. Таким образом, особое внимание было обращено на эту величину, она не ниже 18 об. %.

Полученные результаты и их обсуждение

Соединения **I** и **II** имеют коэффициент обеспечения молекулы кислородом (α) 1,5 и 2,0 соответственно. Соединения с α выше 1,1–1,2 наиболее эффективно использовать в сочетании с УС, особенно, если речь идет о рецептурах, не содержащих алюминия [26]. В табл. 2 представлены расчетные данные композиций с соединением **I** как с активным связующим (АС, так и с углеводородным (УС).

В настоящей работе эффективности композиций сравниваются как по величине $I_{sp}^*(3)$, так и по температуре в камере сгорания T_c , так как она не должна превышать 3800 К. Объемное количество связующего для всех рассмотренных композиций составляло 18–19 об. %. Видно (табл. 2), что в композициях при обеспечении содержания связующего не ниже 18 об. % компонент **I** с УС без алюминия

может обеспечить $I_{ef}^*(3)$ 260,6 с при $T_c = \sim 3600$ К. Дополнительное введение алюминия в количестве до 5 % незначительно (на ~ 1 с) повышает $I_{ef}^*(3)$ и повышает T_c до 3720 К. Использование активного связующего дает худший результат — в системе без металла $I_{ef}^*(3) = 256,3$ с при $T_c = 3560$ К. Введение алюминия позволяет только незначительно (на 2,4 с) поднять $I_{ef}^*(3)$, но это сопряжено с резким повышением T_c , что делает такую композицию непригодной. Следует отметить, что величина $I_{ef}^*(3)$ безметалльных СТРТ, равная 258–260 с, присуща только небольшому числу композиций на базе новых высокоэнтальпийных соединений. Эти композиции пока еще практически не разрабатываются. Существующие же безметалльные композиции сегодня имеют $I_{ef}^*(3)$ на уровне 240 (с окислителем перхлоратом аммония) или 250 с (с АДНА).

В табл. 3 показаны характеристики композиций окислителя **II** с углеводородным связующим УС (применение АС вместо УС в паре с компонентом **II**, имеющим величину $\alpha = 2,0$, еще больше проиграет в величине энергетики, чем это было в случае компонента **I** с величиной $\alpha = 1,5$). Бинарная смесь **II** + УС при объемном содержании УС уже достигает $I_{ef}^*(3)$, равной 263,2 с, но дополнительное введение алюминия почти не повышает эту величину (максимальный прирост 0,6 с).

Таблица 2. Энергетические характеристики композиций на основе соединения **I**, АС, УС и Al
Table 2. Energy Characteristics of Compositions Based on Compound **I**, active binder, hydrocarbon binder and Al

C ₄ N ₆ O ₈ (I) %	Al, %	АС, мас. %	УС, мас. %	Связующее, об. %	ρ , г/см ³	T_c , К	I_{sp} , с	$I_s(3)$, с	$I_{ef}^*(3)$, с
90,5	0	0	9,5	18,2	1,763	3604	259,0	260,6	260,6
89,5	1	0	9,5	18,3	1,768	3625	259,7	261,4	260,9
88,5	2	0	9,5	18,3	1,772	3658	260,5	262,3	261,1
87,5	3	0	9,5	18,3	1,777	3688	261,1	263,0	261,3
86,5	4	0	9,5	18,4	1,781	3713	261,7	263,7	261,4
85,5	5	0	9,5	18,4	1,786	3732	262,2	264,4	261,5
84,5	6	0	9,5	18,5	1,790	3740	262,6	264,9	261,4
83,5	7	0	9,5	18,5	1,795	3737	262,8	265,2	261,2
83,0	7,5	0	9,5	18,6	1,797	3731	262,8	265,2	260,9
82,9	7,6	0	9,5	18,6	1,798	3729	262,8	265,2	260,8
82,8	7,7	0	9,5	18,6	1,798	3727	262,8	265,2	260,8
82,7	7,8	0	9,5	18,6	1,798	3725	262,7	265,2	260,7
82,6	7,9	0	9,5	18,6	1,799	3723	262,7	265,1	260,6
82,5	8	0	9,5	18,6	1,799	3721	262,6	265,1	260,5
80,5	10	0	9,5	18,7	1,809	3650	257,6	260,4	254,7
85,5	0	14,5	0	18,2	1,867	3559	252,1	256,3	256,3
84,5	1	14,5	0	18,2	1,872	3612	253,0	257,3	256,8
83,5	2	14,5	0	18,3	1,877	3667	253,9	258,3	257,2
82,5	3	14,5	0	18,3	1,882	3722	254,7	259,2	257,5
81,5	4	14,5	0	18,4	1,887	3777	255,4	260,1	257,8
80,5	5	14,5	0	18,4	1,892	3833	256,1	260,9	258,1
79,5	6	14,5	0	18,5	1,897	3888	256,7	261,6	258,3
78,5	7	14,5	0	18,5	1,903	3941	257,3	262,4	258,4
77,5	8	14,5	0	18,6	1,908	3993	257,9	263,1	258,5
76,5	9	14,5	0	18,6	1,913	4042	258,4	263,7	258,6
75,5	10	14,5	0	18,7	1,918	4087	258,9	264,4	258,7
74,5	11	14,5	0	18,7	1,923	4127	259,3	264,9	258,6
73,5	12	14,5	0	18,8	1,929	4161	259,7	265,4	258,6
70,5	15	14,5	0	18,9	1,945	4229	260,1	266,2	257,6

Таблица 3. Энергетические характеристики композиций на основе соединения II, УС и АI
Table 3. Energy characteristics of compositions based on compound II, hydrocarbon binder (CB) and Al

CN ₁₀ O ₄ (II) %	Al, %	УС, мас. %	Связующее, об. %	ρ, г/см ³	T _c , К	I _{sp} , с	I _s (3), с	I _{ef} '(3), с
90,5	0	9,5	18,3	1,771	3636	261,5	263,2	263,2
89,5	1	9,5	18,3	1,775	3657	262,1	264,0	263,4
88,5	2	9,5	18,4	1,779	3691	262,8	264,8	263,6
87,5	3	9,5	18,4	1,784	3721	263,4	265,5	263,8
86,5	4	9,5	18,5	1,788	3746	264,0	266,2	263,8
85,5	5	9,5	18,5	1,793	3764	264,4	266,7	263,8
84,5	6	9,5	18,6	1,797	3772	264,7	267,2	263,7
83,5	7	9,5	18,6	1,802	3769	264,9	267,4	263,3
82,5	8	9,5	18,7	1,806	3753	264,6	264,6	262,6
80,5	10	9,5	18,7	1,816	3686	259,6	259,6	256,7

Величина $I_{ef}'(3)$, равная 263 с, является очень высоким достижением, это несколько выше, чем имеет наиболее энергоемкий из известных сегодня реальных составов СТРТ — 25 % гидрид алюминия + 25 % АС + 50 % АДНА [30] — имеет величину $I_{ef}'(3) = \sim 262$ с.

Тот факт, что в случае состава, содержащего компонент I, введение алюминия еще приводит к небольшому росту $I_{ef}'(3)$, а в составе, содержащем II, роста $I_{ef}'(3)$ практически нет, объясняется тем, что, во-первых, величина энтальпии образования I хоть и велика, но все же ниже, чем у II. Во-вторых, в II содержание азота заметно выше, чем в I (64,8 % против 56,3 %), а как было показано нами совсем недавно, увеличение доли азота в высокоэнтальпийном окислителе повышает порог величины ΔH_f^0 окислителя, выше которого введение в композицию алюминия, с точки зрения повышения энергетических параметров, уже неэффективно.

Выводы

Показано, что рассмотренные гипотетические производные тетразола могут рассматриваться как перспективные компоненты смесевых твердых ракетных топлив, так как их характеристики (высокие значения стандартной энтальпии образования, коэффициент обеспечения молекулы кислородом, плотности) при содержании полимерного связующего не ниже 18 об. % могут обеспечить довольно высокие значения величин удельного (до 267 с) и эффективного импульса (до 264 с) при введении 5–10 % Al. Следовательно, развитие синтетических исследований с целью синтеза описанных и им подобных соединений может привести к возможности повышения энергетики безметалльных смесевых твердых ракетных топлив.

Список источников

- Powell I. J. Insensitive munitions — design principles and technology developments // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 409–413. DOI: 10.1002/prep.201500341.
- Politzer P., Murray J. S. High performance, low sensitivity: conflicting or compatible? // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 414–425. DOI: 10.1002/prep.201500349.
- Zeman S., Jungova M. Sensitivity and Performance of Energetic Materials // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 426–451. DOI: 10.1002/prep.201500351.

- Pagoria P. A Comparison of the Structure, Synthesis, and Properties of Insensitive Energetic Compounds // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 452–469.

- Klapötke T. M., Witkowski T. G. Covalent and ionic insensitive high-explosives // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 470–483. DOI: 10.1002/prep.201600006.

- Gao H., Shreeve J. M. Recent progress in taming FOX-7 (1,1-diamino-2,2-dinitroethene) // *RSC Advances*. 2016. Vol. 6, no. 61. P. 56271–56277. DOI: 10.1039/C6RA12412G.

- Solodyuk G. D., Boldyrev M. D., Gidasov B. V., Nikolaev V. D. Oxidation of 3,4-diaminofurazan by some Peroxide Reagents // *Zh. Org. Khim.* 1981. Vol. 17 (4). P. 861–865.

- Chavez D., Hill L., Hiskey M. [et al.]. Preparation and explosive properties of azo- and azoxy-furazans // *J. Energ. Mater.* 2000. Vol. 18. P. 219–236.

- Sinditskii V. P., Vu M. C., Sheremetev A. B., Aleksandrova N. S. Study on thermal decomposition and combustion of insensitive explosive 3,3'-Diamino-4,4'-azofurazan (DAAzF) // *Thermochimica Acta*. 2008. Vol. 473, no. 1-2. P. 25–31. DOI: 10.1016/j.tca.2008.04.004.

- Li J.-Z., Wang B.-Z., Fan X.-Z. [et al.]. Interaction and compatibility between DAAzF and some energetic materials // *Defence Technology*. 2013. Vol. 9, no. 3. P. 153–156. DOI: 10.1016/j.dt.2013.09.014.

- Koch E.-C. Insensitive high explosives II: 3,3'-Diamino-4,4'-azoxyfurazan (DAAF) // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 526–538. DOI: 10.1002/prep.201600014.

- Кизин А. Н., Дворкин П. Л., Рыжова Г. Л. [и др.] Параметры для расчета стандартных энтальпий образования органических соединений в жидком состоянии // *Известия АН СССР. Серия Химическая*. 1986. № 2. С. 372–375.

- Кизин А. Н., Лебедев Ю. А. Расчет энтальпий образования полизамещенных алифатических соединений в твердой фазе // *Доклады АН СССР*. 1982. Т. 262, № 4. С. 914–917.

- Смирнов А. С., Смирнов С. П., Пивина Т. С., Лемперт Д. Б., Маслова Л. К. Комплексная оценка физико-химических свойств новых энергоемких материалов // *Известия Академии наук. Серия Химическая*. 2016. № 10. С. 2315–2332.

- Jafari M., Keshavarz M. H. Simple approach for predicting the heats of formation of high nitrogen content materials // *Fluid Phase Equilibria*. 2016. Vol. 415. P. 166–175. DOI: 10.1016/j.fluid.2016.02.008.

- Keshavarz M., Esmailpour K., Oftadeh M. [et al.]. Assessment of two new nitrogen-rich Tetrazine derivatives as high performance and safe energetic compounds // *RSC Adv*. 2015. Vol. 5. P. 87392–87399. DOI: 10.1039/C5RA13377G.

- Zamani M., Keshavarz M. H. Thermochemical and detonation performance of boron — nitride analogues of organic azides and benzotrifuroxan as novel high energetic nitrogen-

rich precursors // Journal of the Iranian Chemical Society. 2015. Vol. 12. P. 1077–1087.

18. Zamani M., Keshavarz M. H. New NHNO₂ substituted borazine-based energetic materials with high detonation performance // Computational Materials Science. 2015. Vol. 97. P. 295–303. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.025.

19. Rice B. M., Byrd E. F. C. Evaluation of electrostatic descriptors for predicting crystalline density // Journal of Computational Chemistry. 2013. Vol. 34. P. 2146–2151. DOI: 10.1002/jcc.23369.

20. Keshavarz M. H., Esmailpour K., Zamani M. [et al.]. Thermochemical, sensitivity and detonation characteristics of new thermally stable high performance explosives // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. 2015. Vol. 40, no. 6. P. 886–891. DOI: 10.1002/prep.201500017.

21. Lempert D. B. Dependence of specific impulse of metal-free formulations on CHNO-oxidizer's element content and enthalpy of formation // Chinese Journal of Explosives & Propellant. 2015. Vol. 38, no. 4. P. 1–4.

22. Lempert D., Nechiporenko G., Manelis G. Energetic characteristics of solid composite propellants and ways of energy increasing // Central European Journal of Energetic Materials. 2006. Vol. 3 (4). P. 73–87.

23. Keshavarz M. H., Abadi Ya. H., Esmailpou K. [et al.]. Introducing novel tetrazole derivatives as high performance energetic compounds for confined explosion and as oxidizer in solid propellants // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. 2017. Vol. 42, no. 5. P. 492–498. DOI: 10.1002/prep.201600249.

24. Keshavarz M. H., Abadi Ya. H., Esmailpou K. [et al.]. A novel class of nitrogen-rich explosives containing high oxygen balans to use as high performance oxidizers in solid propellants // Propellants, Explosives, Pyrotechnics. 2017. Vol. 42, no. 10. P. 1155–1160. DOI: 10.1002/prep.201700139.

25. Сняряев Г. Б., Ватолин Н. А., Трусов Б. Г. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М.: Наука, 1982. 267 с.

26. Лемперт Д. Б., Шереметев А. Б. Энергетические возможности нитропроизводных азо- и азокси-фуразанов как компонентов смесевых ракетных топлив // Химия гетероциклических соединений. 2016. Т. 52 (12). С. 1070–1077.

27. Алдошин С. М., Лемперт Д. Б., Гончаров Т. К., Казаков А. И., Согласнова С. И., Дорофеенко Е. М., Плишкин Н. А. Энергетические возможности СТРТ на основе бимолекулярных кристаллов, содержащих CL-20 // Известия РАН. Сер. Химическая. 2016. № 8. С. 2018–2024.

28. Павловец Г., Цуцуран В. Физико-химические свойства порохов и ракетных топлив. М.: Изд-во М-ва обороны, 2009. 408 с.

29. Нечипоренко Г. Н., Лемперт Д. Б. Исследование энергетических возможностей ракетных топлив, содержащих бериллий и его гидрид // Химическая физика. 1998. Т. 17, № 10. С. 93–100.

30. Лемперт Д. Б., Нечипоренко Г. Н., Согласнова С. И. Исследование энергетических возможностей ракетных топлив, содержащих гидрид алюминия // Химическая физика. 1999. Т. 18, № 9. С. 86–94.

ГУДКОВА Инесса Юрьевна, кандидат технических наук, научный сотрудник лаборатории «Термодинамика высокотемпературных процессов» Института проблем химической физики РАН, г. Черноголовка. AuthorID (РИНЦ): 162854

ЛЕМПЕРТ Давид Борисович, кандидат химических наук, заведующий лабораторией «Термодинамика высокотемпературных процессов» Института проблем химической физики РАН, г. Черноголовка; старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Двигательные установки микротяги малых космических аппаратов» Омского государственного технического университета, г. Омск. AuthorID (РИНЦ): 43977
ORCID: 0000-0002-0219-1571
ResearcherID: J-7125-2018

Адрес для переписки: lempert@icp.ac.ru

Для цитирования

Гудкова И. Ю., Лемперт Д. Б. Энергетический потенциал некоторых нитрозамещенных гипотетических производных тетразолов // Омский научный вестник. Сер. Авиационно-ракетное и энергетическое машиностроение. 2018. Т. 2, № 3. С. 51–57. DOI: 10.25206/2588-0373-2018-2-3-51-57.

Статья поступила в редакцию 25.05.2018 г.
© И. Ю. Гудкова, Д. Б. Лемперт

THE ENERGY POTENTIAL OF SOME HYPOTHETICAL NITROSUBSTITUTED TETRAZOLES DERIVATIVES

I. Yu. Gudkova¹, D. B. Lempert^{1,2}

¹Institute of Problems of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences,
Russia, Moscow region, Chernogolovka, Academician Semenov Ave., 1, 142432

²Omsk State Technical University,
Russia, Omsk, Mira Ave., 11, 644050

The energy abilities of solid composite propellants based on some nitrosubstituted tetrazole derivatives, which are still hypothetical but they are promising for create on their basis rather powerful propellants, have been considered. It is confirmed by the thermodynamic calculations.

Keywords: tetrazole derivatives, solid composite propellants, specific impulse, oxidant, binder.

References

1. Powell I. J. Insensitive munitions — design principles and technology developments // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 409–413. DOI: 10.1002/prop.201500341. (In Engl.).
2. Politzer P., Murray J. S. High performance, low sensitivity: conflicting or compatible? // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 414–425. DOI: 10.1002/prop.201500349. (In Engl.).
3. Zeman S., Jungova M. Sensitivity and Performance of Energetic Materials // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 426–451. DOI: 10.1002/prop.201500351. (In Engl.).
4. Pagoria P. A Comparison of the Structure, Synthesis, and Properties of Insensitive Energetic Compounds // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 452–469. (In Engl.).
5. Klapötke T. M., Witkowski T. G. Covalent and ionic insensitive high-explosives // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 470–483. DOI: 10.1002/prop.201600006. (In Engl.).
6. Gao H., Shreeve J. M. Recent progress in taming FOX-7 (1,1-diamino-2,2-dinitroethene) // *RSC Advances*. 2016. Vol. 6, no. 61. P. 56271–56277. DOI: 10.1039/C6RA12412G. (In Engl.).
7. Solodyuk G. D., Boldyrev M. D., Gidaspov B. V., Nikolaev V. D. Oxidation of 3,4-diaminofurazan by some Peroxide Reagents // *Zh. Org. Khim.* 1981. Vol. 17 (4). P. 861–865. (In Engl.).
8. Chavez D., Hill L., Hiskey M. [et al.]. Preparation and explosive properties of azo- and azoxy-furazans // *J. Energ. Mater.* 2000. Vol. 18. P. 219–236. (In Engl.).
9. Sinditskii V. P., Vu M. C., Sheremetev A. B., Aleksandrova N. S. Study on thermal decomposition and combustion of insensitive explosive 3,3'-Diamino-4,4'-azofurazan (DAAzF) // *Thermochimica Acta*. 2008. Vol. 473, no. 1-2. P. 25–31. DOI: 10.1016/j.tca.2008.04.004. (In Engl.).
10. Li J.-Z., Wang B.-Z., Fan X.-Z. [et al.]. Interaction and compatibility between DAAzF and some energetic materials // *Defence Technology*. 2013. Vol. 9, no. 3. P. 153–156. DOI: 10.1016/j.dt.2013.09.014. (In Engl.).
11. Koch E.-C. Insensitive high explosives II: 3,3'-Diamino-4,4'-azoxyfurazan (DAAF) // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2016. Vol. 41, no. 3. P. 526–538. DOI: 10.1002/prop.201600014. (In Engl.).
12. Kizin A. N., Dvorkin P. L., Ryzhova G. L., Lebedev Yu. A. Parametry dlya rascheta standartnykh ental'piy obrazovaniya organicheskikh soyedineniy v zhidkom sostoyanii [Parameters for calculating the standard enthalpies of the formation of organic compounds in the liquid state] // *Izvestiya AN SSSR. Seriya Khimicheskaya. Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Division of Chemical Sciences*. 1986. No. 2. P. 372–375. (In Russ.).
13. Kizin A. N., Lebedev Yu. A. Raschet ental'piy obrazovaniya polizameshchennykh alifaticeskikh soyedineniy v tverdoy faze [Calculation of the enthalpies of formation of poly-substituted aliphatic compounds in the solid phase] // *Doklady AN SSSR. Doklady AN SSSR*. 1982. Vol. 262, no. 4. P. 914–917. (In Russ.).
14. Smirnov A. S., Smirnov S. P., Pivina T. S., Lempert D. B., Maslova L. K. Kompleksnaya otsenka fiziko-khimicheskikh svoystv novykh energoyemkikh materialov [Comprehensive assessment of physicochemical properties of new energetic materials] // *Izvestiya AN SSSR. Seriya Khimicheskaya. Bulletin of the Academy of Sciences. Division of Chemical Sciences*. 2016. No. 10. P. 2315–2332. (In Russ.).
15. Jafari M., Keshavarz M. H. Simple approach for predicting the heats of formation of high nitrogen content materials // *Fluid Phase Equilibria*. 2016. Vol. 415. P. 166–175. DOI: 10.1016/j.fluid.2016.02.008. (In Engl.).
16. Keshavarz M., Esmailpour K., Oftadeh M. [et al.]. Assessment of two new nitrogen-rich Tetrazine derivatives as high performance and safe energetic compounds // *RSC Adv*. 2015. Vol. 5. P. 87392–87399. DOI: 10.1039/C5RA13377G. (In Engl.).
17. Zamani M., Keshavarz M. H. Thermochemical and detonation performance of boron — nitride analogues of organic azides and benzotrifuroxan as novel high energetic nitrogen-rich precursors // *Journal of the Iranian Chemical Society*. 2015. Vol. 12. P. 1077–1087. (In Engl.).
18. Zamani M., Keshavarz M. H. New NHNO₂ substituted borazine-based energetic materials with high detonation performance // *Computational Materials Science*. 2015. Vol. 97. P. 295–303. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.025. (In Engl.).
19. Rice B. M., Byrd E. F. C. Evaluation of electrostatic descriptors for predicting crystalline density // *Journal of Computational Chemistry*. 2013. Vol. 34. P. 2146–2151. DOI: 10.1002/jcc.23369. (In Engl.).
20. Keshavarz M. H., Esmailpour K., Zamani M. [et al.]. Thermochemical, sensitivity and detonation characteristics of new thermally stable high performance explosives // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2015. Vol. 40, no. 6. P. 886–891. DOI: 10.1002/prop.201500017. (In Engl.).
21. Lempert D. B. Dependence of specific impulse of metal-free formulations on CHNO-oxidizer's element content and enthalpy of formation // *Chinese Journal of Explosives & Propellant*. 2015. Vol. 38, no. 4. P. 1–4. (In Engl.).

22. Lempert D., Nechiporenko G., Manelis G. Energetic characteristics of solid composite propellants and ways of energy increasing // *Central European Journal of Energetic Materials*. 2006. Vol. 3 (4). P. 73–87. (In Engl.).

23. Keshavarz M. H., Abadi Ya. H., Esmailpou K. [et al.]. Introducing novel tetrazole derivatives as high performance energetic compounds for confined explosion and as oxidizer in solid propellants // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2017. Vol. 42, no. 5. P. 492–498. DOI: 10.1002/prop.201600249. (In Engl.).

24. Keshavarz M. H., Abadi Ya. H., Esmailpou K. [et al.]. A novel class of nitrogen-rich explosives containing high oxygen balans to use as high performance oxidizers in solid propellants // *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2017. Vol. 42, no. 10. P. 1155–1160. DOI: 10.1002/prop.201700139. (In Engl.).

25. Sinyarev G. B., Vatolin N. A., Trusov B. G. Primeneniye EVM dlya termodinamicheskikh raschetov metallurgicheskikh protsessov [The use of computers for the thermodynamic calculations of metallurgical processes]. Moscow: Nauka Publ., 1982. 267 p. (In Russ.).

26. Lempert D. B., Sheremetev A. B. Energeticheskiye vozmozhnosti nitroproizvodnykh azo- i azoksi-furazanov kak komponentov smesevykh raketnykh topliv [Energy capabilities of nitroderivatives of azo- and azoxy-furazans as components of solid composite propellants] // *Khimiya geterotsiklicheskikh soyedineniy. Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2016. Vol. 52 (12). P. 1070–1077. (In Russ.).

27. Aldoshin S. M., Lempert D. B., Goncharov T. K., Kazakov A. I., Soglasnova S. I., Dorofeyenko E. M., Plishkin N. A. Energeticheskiye vozmozhnosti STRT na osnove bimolekulyarnykh kristallov, sodержashchikh CL-20 [Energy capabilities of the STBT based on bimolecular crystals containing CL-20] // *Izvestiya Akademii nauk. Ser. Khimicheskaya. Bulletin of the Academy of Sciences. Division of Chemical Sciences*. 2016. No. 8. P. 2018–2024. (In Russ.).

28. Pavlovets G., Tsutsuran V. Fiziko-khimicheskiye svoystva porokhov i raketnykh topliv [Physico-chemical properties of propellants and rocket fuels]. Moscow: M-vo oborony Publ., 2009. 408 p. (In Russ.).

29. Nechiporenko G. H., Lempert D. B. Issledovaniye energeticheskikh vozmozhnostey raketnykh topliv, sodержashchikh berilliy i ego gidrid [Investigation of the energy

capabilities of rocket fuels containing beryllium and its hydride] // *Khimicheskaya fizika. Khimicheskaya Fizika*. 1998. Vol. 17, no. 10. P. 93–100. (In Russ.).

30. Lempert D. B., Nechiporenko G. N., Soglasnova S. I. Issledovaniye energeticheskikh vozmozhnostey raketnykh topliv, sodержashchikh gidrid alyuminiya [Investigation of the energy capabilities of rocket fuels containing aluminum hydride] // *Khimicheskaya fizika. Khimicheskaya Fizika*. 1999. Vol. 18, no. 9. P. 86–94. (In Russ.).

GUDKOVA Inessa Yur'yevna, Candidate of Technical Sciences, Researcher of Laboratory of Thermodynamics of High-Temperature Processes of Institute of Problems of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Chernogolovka.

AuthorID (RSCI): 162854

LEMPERT David Borisovich, Candidate of Chemical Sciences, Head of Laboratory of Thermodynamics of High-Temperature Processes, IPCP RAS, Chernogolovka; Senior Researcher of Research Laboratory of Propulsion Systems for Microtraining of Small Spacecraft of Omsk State Technical University, Omsk.

AuthorID (RSCI): 43977

ORCID: 0000-0002-0219-1571

ResearcherID: J-7125-2018

Address for correspondence: lempert@icp.ac.ru

For citations

Gudkova I. Yu., Lempert D. B. The energy potential of some hypothetical nitrosubstituted tetrazoles derivatives // *Omsk Scientific Bulletin. Series Aviation-Rocket and Power Engineering*. 2018. Vol. 2, no. 3. P. 51–57. DOI: 10.25206/2588-0373-2018-2-3-51-57.

Received 25 May 2018.

© I. Yu. Gudkova, D. B. Lempert