

Д. Л. Чижов¹, Ю. А. Квашнин¹, А. В. Станкевич², П. А. Слепухин¹, Г. Л. Русинов¹, В. Н. Чарушин¹

¹Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, Екатеринбург

²Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский НИИ технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Снежинск

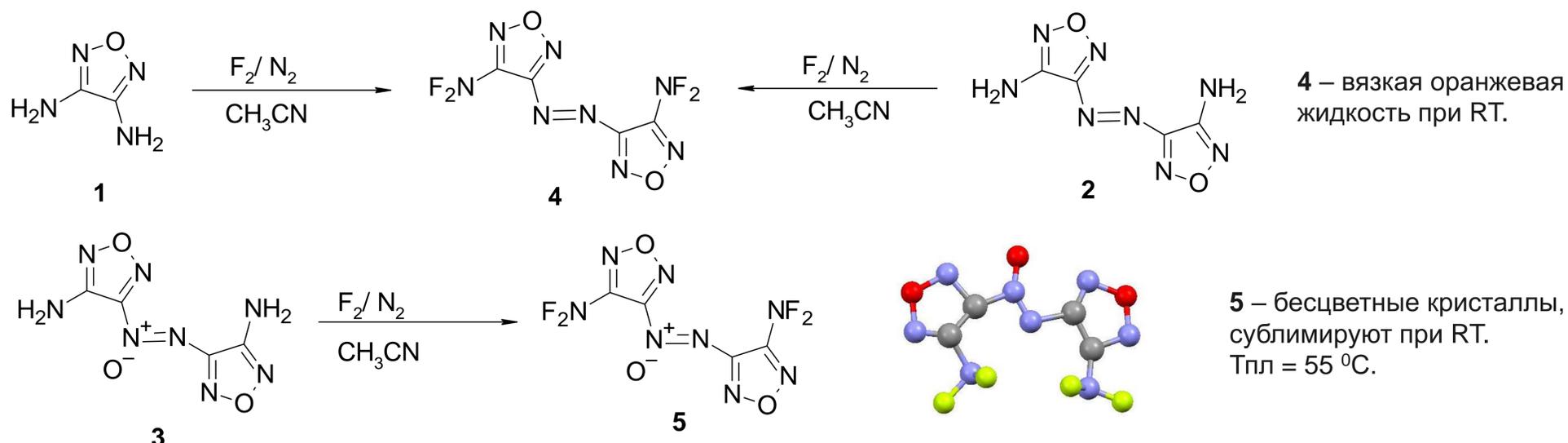
Фуразаны (1,2,5-оксадиазолы) – высокоэнтальпийные азотсодержащие гетероциклы. Различное сочетание фуразановых фрагментов с рядом классических эксплозифорных групп (нитро-, азо-, азокси- и др.) позволяет получать перспективные высокоэнергетические материалы.

Введение дифтораминальных групп (NF₂) в молекулы энергетических соединений рассматривается как перспективное направление для повышения энергетических параметров. Для фуразановых производных с NF₂ группами расчетными исследованиями было показано их некоторое преимущество по сравнению с нитроаналогами (энергетические параметры, чувствительности). Между тем, синтез таких дифтораминасодержащих фуразанов в литературе не описан.

В работе впервые проведено фторирование ряда аминозмещенных фуразанов – 3,4-диаминофуразана **1**, 4,4'-диаминоазофуразана **2** и 4,4'-диаминоазоксифуразана **3**, с целью получения новых энергонасыщенных соединений. Для фторирования применялись элементный фтор (20% в азоте) и фторирующий реагент Selectfluor.

При использовании элементного фтора были впервые получены 4,4'-бис(дифторамино)азофуразан **4** и бис(дифторамино)азоксифуразан **5**.

Selectfluor оказался неэффективен – образование соединений с NF связями не зафиксировано.



Строение полученных соединений подтверждены данными ЯМР-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа (для соединения **5**). Плотность азокси-производного **5**, по данным PCA, составляет 1,94 г/см³ при 150К.

Проведён анализ энергетических свойств исходных и синтезированных производных фуразана **2-5**.

Соединение	2	3	4	5
Наименование	4,4'-диаминоазофуразан	4,4'-диаминоазоксифуразан	4,4'-бис(дифторамино)азофуразан	4,4'-бис(дифторамино)азоксифуразан
Брутто формула	C ₄ H ₄ N ₈ O ₂	C ₄ H ₄ N ₈ O ₃	C ₄ F ₄ N ₈ O ₂	C ₄ F ₄ N ₈ O ₃
Молекулярная масса	196,13	212,13	268,09	284,09
Теплота образования, Δ _f H, кДж/моль	595,68	550,17	662,38	587,82
Плотность монокристалла, г/см ³	1,66	1,72	2,05	2,10
Скорость детонации, м/с	7500	7910	9840	10080
Давление детонации, ГПа	23,74	27,03	46,33	49,23
Объём газообразных продуктов, л/кг	758	759	554	567
Доля конденсированных продуктов	0,23	0,19	0,09	0,06
Теплота, МДж/кг	2,4	3,2	4,9	5,4
Окислительный баланс, %	-65,3	-52,8	-35,8	-28,2
КК	0,20	0,30	0,15	0,23

Таким образом, массовая теплота взрывчатого превращения и объём газовой фазы рассматриваемых новых дифтораминасодержащих энергетических материалов сопоставимы с ТНТ (4,2 кДж/г) и гексогеном (5,45 кДж/г).

Оценочные значения скоростей детонации для кристаллического 4,4'-бис(дифторамино)азоксифуразана превосходят октоген на 10% и CI-20 на 3%.