

СКОРОСТЬ РАЗЛЕТА И ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИЙ РАЗЛОЖЕНИЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ 1,2,4,5-ТЕТРАЗИНОВ

А. В. Станкевич^{1, 2}, С. Г. Толицина², А. В. Коротина², Р. И. Ишметова², Г. Л. Русинов²

¹ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

²Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского, УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Для оценки свойств энергетических материалов принято ориентироваться на совокупность данных о термической стабильности, чувствительности к трению и удару, calorificности химических реакций в различных режимах реагирования и расчетные характеристики, полученные методами классической термодинамики. Такой подход зарекомендовал себя как относительно безопасный и не требующий большого количества ресурсов при проведении скрининга, как для синтеза большого количества вещества, так и для выполнения сложных вычислений. Однако, в большинстве случаев этих данных недостаточно для выбора того или иного материала, например, для использования в подушках безопасности транспортных средств. Поэтому существует необходимость разработки и развития дополнительных экспериментальных методов, позволяющих определять среднemasсовые характеристики газовой фазы продуктов распада и скорость перемещения газовой фазы при использовании как можно меньшего количества вещества.

В данной работе показано применение разработанной в РФЯЦ – ВНИИТФ методики определения массовой скорости разлета газообразных продуктов химических реакций [1, 2] при скрининге свойств полиазотсодержащих соединений на базе гетероциклического основания 1,2,4,5-тетразина. Газообразные продукты формировались в результате распада энергетических материалов при высокоинтенсивных воздействиях от 0,2 до 2000 К/с. При этом масса навески варьировалась от 2 до 5 мг. Кроме того, одновременно был выполнен анализ химического состава, а также построены энергетические диаграммы процессов и диаграммы перемещения частиц после разложения производных 1,2,4,5-тетразинов.

Проведенные исследования показывают прямую взаимосвязь скорости разлета продуктов химических реакций с молекулярным строением исследуемых соединений, что указывает на существенный вклад каталитических эффектов, которые ускоряют процессы химического взаимодействия между компонентами, как в твердой, так и в газовой фазе. Выявлено, что содержание нитрогрупп приводит к снижению образования дициана (C_2N_2) и синильной кислоты (HCN) [3], увеличивает среднemasсовую скорость перемещения продуктов реакций распада и роль химического потенциала в общем термодинамическом уравнении [4].

Благодарности

Данное исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (соглашение № 24-13-00420, дата 06.05.2024).

Литература

1. **Станкевич, А. В.** Регистрация массовой скорости перемещения молекулярных пучков продуктов разложения вещества [Текст] // Всероссийская конференция «Физика взрыва: теория, эксперимент, приложения». – Новосибирск : Сибирское отделение РАН, 2023. – С. 207.
2. **Станкевич, А. В.** Методика определения химизма и кинетики переходных состояний быстропротекающих химических процессов [Текст] // XVI Международная конференция «Забабахинские научные чтения»: сб. матер. – Снежинск : Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ, 2023. – С. 70.
3. **Stankevich, A. V.** Mechanism, Kinetics and Thermodynamics of Decomposition for High Energy Derivatives of [1,2,4]Triazolo[4,3-b][1,2,4,5]tetrazine [Text] / A. V. Stankevich, S. G. Tolshchina, A. V. Korotina, et al. // *Molecules*. – 2022. – Vol. 27. – P. 6966.
4. **Ландау, Л. Д.** Статистическая физика. Часть 1. Т. V. Теоретическая физика [Текст] ; изд. 4-е / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1995.