



Исследования
и разработки
Москва 2016

Приоритетное направление:
**Энергоэффективность,
энергосбережение и ядерная
энергетика**

Программное мероприятие:
**2.1 Проведение исследований в
рамках международного
многостороннего и двустороннего
сотрудничества.**

Федеральная целевая программа «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014—2020 годы»

Соглашение № 14.613.21.0043 от 10.11.2015 на период 2015 - 2016 гг.
Тема: Исследование закономерностей зависимости важнейших эксплуатационных характеристик полиазотистых гетероциклических соединений от строения для создания новых технологий создания высокоэнергетических материалов

Руководитель проекта: Директор ИПХФ РАН, академик Алдошин С.М.

Получатель субсидии

Институт проблем химической физики РАН

Индустриальный партнер

Сианьский исследовательский институт современной химии
(КНР, г. Сиань), (Xi'an Modern Chemistry Research Institute, China, Xi'an)

разработка энергоемких компонентов и композиций

иностраный партнер

Ожидаемые результаты проекта

1. Получение кинетических параметров термораспада ряда полиазотистых энергетических соединений, описание продуктов термораспада и механизмов реакций.
2. Синтез нескольких новых энергоемких соединений на базе производных триазола, пиразола, пиридина и пиримидина. Исследование их основных свойств и эффективности в энергоемких композициях.
3. Получение новых экспериментальных данных по величинам стандартной энтальпии образования (ЭО) как впервые синтезированных энергоемких соединений, так и ранее известных, но с пока неизвестными или спорными величинами ЭО.

Цели и задачи проекта

1. Выявление взаимосвязи молекулярной структуры полиазотистых энергоемких соединений (ПЭС) с их важнейшими эксплуатационными свойствами (термической стабильностью, величинами стандартных энтальпий образования).
2. расширение базы данных для прогнозирования термической стабильности и величин стандартных энтальпий образования этих соединений на стадии молекулярного дизайна.
3. Синтезировать ряд новых соединений на базе пиразола, пиридина, триазина, пиримидина, где наряду с высокоэнтальпийным N-гетероциклом будет находиться одна и более групп-окислителей (-NO₂ и др.) или высокоэнтальпийные азидные группы для повышения энергетических свойств.

Перспективы практического использования

1. Найдены новые соединения, не уступающие по энергетике октогену, но с меньшей величиной Q_{тах}, т.е. на их основе можно создавать СТРТ с меньшей чувствительностью.
2. Новые 3,4,5-триазидопиридин-2,6-дикарбонитрил, 2,3,5,6-тетраазидопиридин-4-карбонитрил и N,N-бис(4,6-диазидо-1,3,5-триазинил)-амин могут найти применение как экологически чистые иницирующие ВВ и компоненты других энергоемких материалов, а также в качестве фоторезисторов, кросс-сшивающих агентов для полимерной химии и исходными для получения углерод-нитридных наноматериалов и нанотрубок.
3. Разработанный новый метод синтеза 1-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)пиразола может стать основой для общего метода синтеза 1-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этильных слабоосновных субстратов (схема M)

Текущие результаты проекта

<Схемы, графики, фото с подписями>

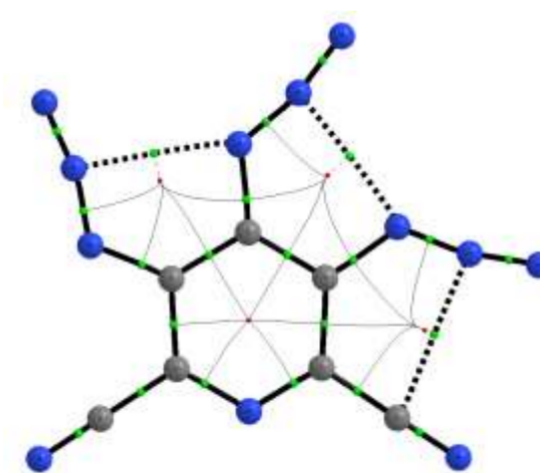
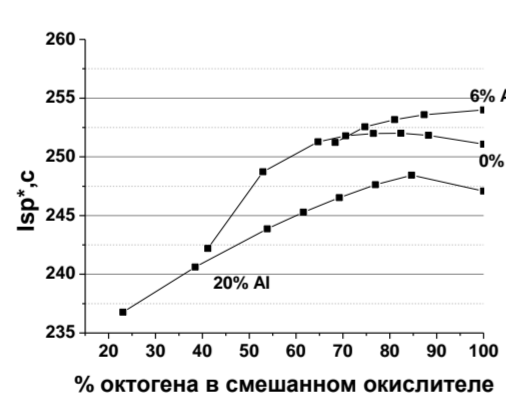
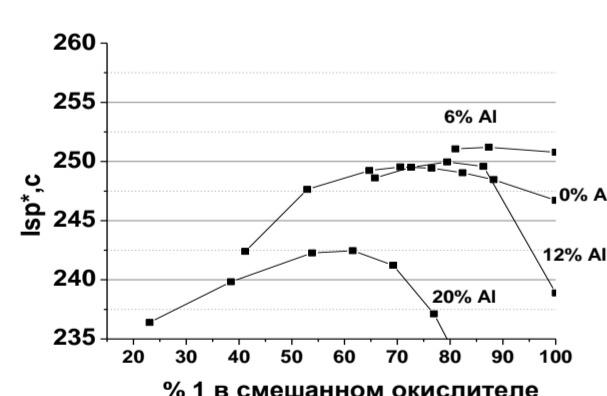


Схема 1. Isp* композиций связующее 15% + AI + ПХА + октоген (справа) или 1 (слева) как функция доли октогена или 1 в смеси окислителя с ПХА

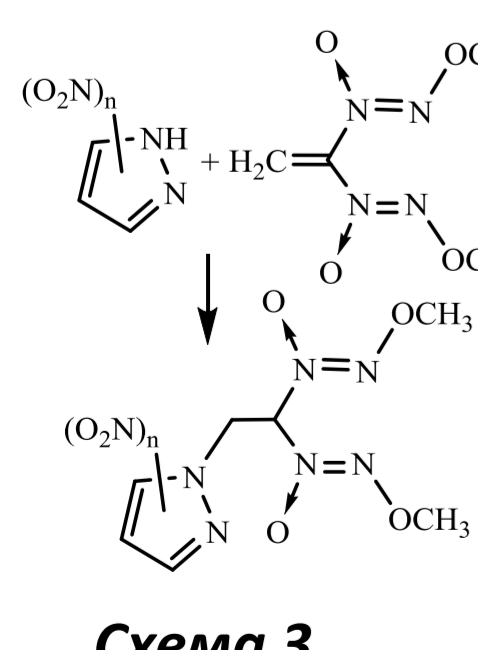


Схема 3

Схема 2

3,4,5-триазидопиридин-2,6-дикарбонитрил

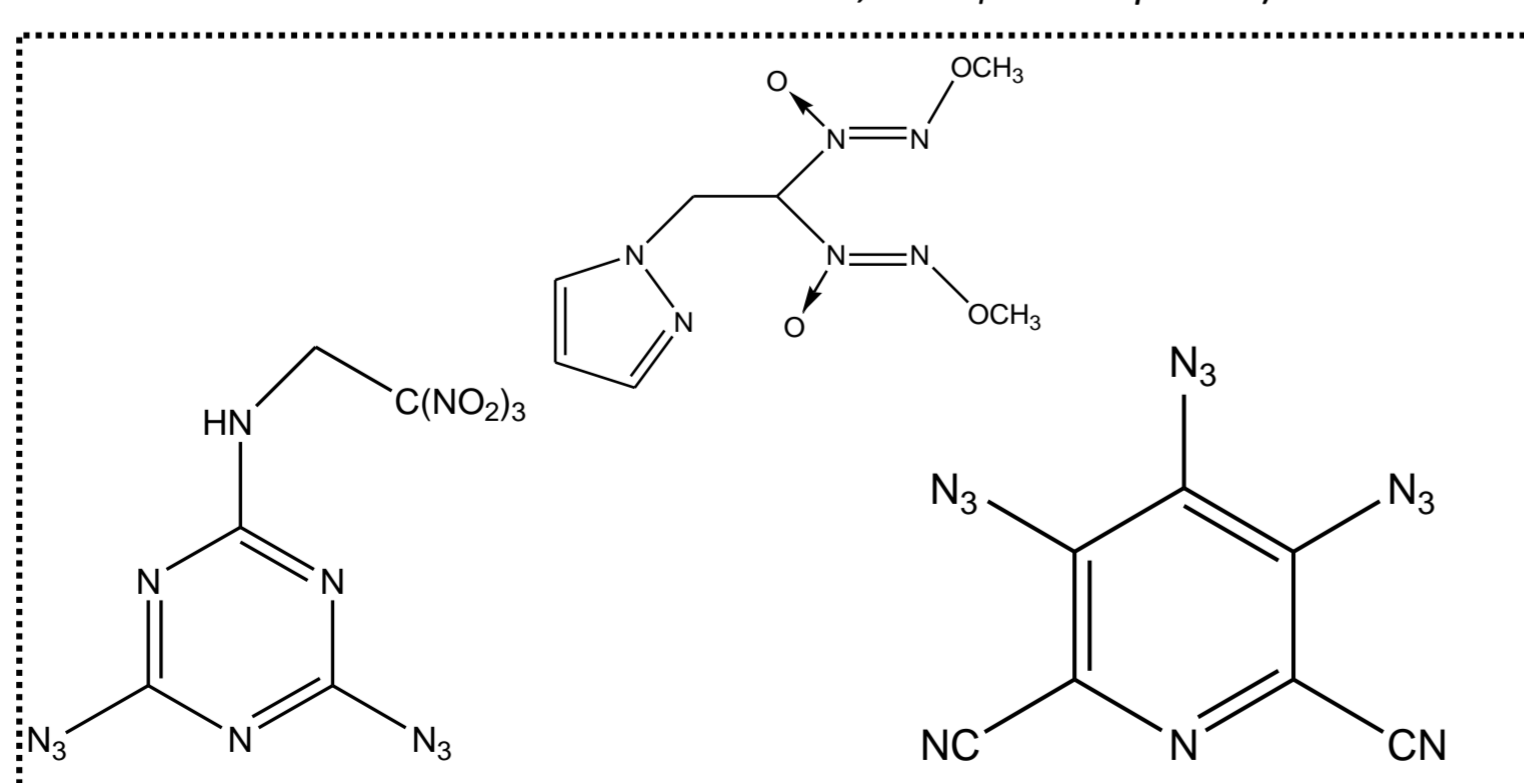


Схема 4

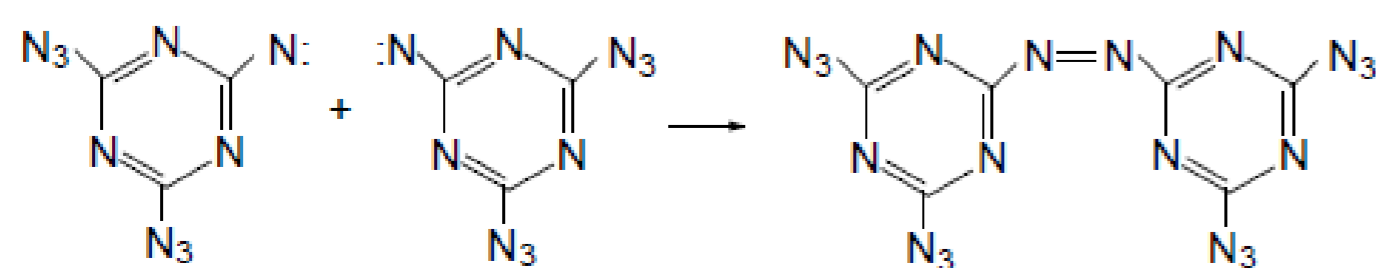


Схема 5

Описание текущих результатов, комментарии>

1. На рис.1 показано, что впервые синтезированный 4,6-диазидо-2-(2,2,2-тринитроэтил)амино-1,3,5-триазин (1) как компонент СТРТ уступает октогену лишь 2-3 с октогену в величине Isp*.
2. Определена структура нескольких молекулярных кристаллов, например, см. на схеме 2. Обнаружено, что существенное влияние на структуру и свойства азидогрупп в таких соединениях оказывают внутримолекулярные контакты азидогрупп (пунктиры на схеме 2)
3. Синтезированы ранее неизвестные 1-(2,2-бис(метокси-NNO-азокси)этил)-производные пиразола, 4-нитропиразола и 3,4-динитропиразола (схема 3).
4. Экспериментально определены величины ЭО семи соединений, часть из которых представлена на схеме 4.
5. Показано, что термические превращения полиазидопроизводных триазина, пиридина и пиримидина протекают по механизму полимеризации соответствующих нитренов (схема 5)
6. Получены данные по эффективности исследованных соединений в качестве компонентов ракетных топлив, часть полученных соединений могут стать конкурентами компонентам, применяемым сегодня.