

УДК 547.7

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ НЕКОТОРЫХ СОЛЕЙ ПЕНТАЗОЛА В КАЧЕСТВЕ КОМПОНЕНТОВ МОДЕЛЬНЫХ СМЕСЕВЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

© 2025 г. И. Н. Зюзин*, И. Ю. Гудкова, Д. Б. Лемперт

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии
Российской академии наук, Черноголовка, Россия

*E-mail: zuzin@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 23.05.2024

После доработки 05.06.2024

Принята в печать 20.06.2024

Изучены энергетические возможности пяти солей пентазола в качестве наполнителей смесевых твердых топлив. Показано, что только пентазолат гидроксиламмония (IV) можно считать относительно неплохим компонентом для создания модельных смесевых твердых топлив. Соединение IV превосходит октоген по величине эффективного импульса $I_{ef}(3)$ как в бинарном составе с активным связующим, так и в аналогичных композициях с добавкой ПХА, АДНА или Al. Пентазолаты лития, аммония, гидразиния и 1,4,5-триаминотетразолия уступают октогену в качестве основного компонента смесевых твердых топлив.

Ключевые слова: пентазол, соли, гидроксиламмоний, литий, термодинамические расчеты, смесевое топливо.

DOI: 10.31857/S0207401X25020056

1. ВВЕДЕНИЕ

Мы продолжаем поиск потенциальных компонентов смесевых твердых топлив (СТТ) в ряду известных энергоемких соединений (ЭС) [1–8]. По нашим оценкам среди синтезированных в последнее десятилетие ЭС доля производных высокоэнтальпийных гетероциклов составляет не менее 70%, а среди них около половины занимают соли, причем гетероциклическое ядро может быть как в катионе, так и в анионе, а также в обоих ионах [9–23]. Энтальпия образования гетероциклов тем выше, чем больше доля азота в молекуле (как правило). Из всех реально существующих гетероциклов больше всего азота в анионе пентазола. Впервые соли пентазола описаны в 2017 году [24, 25]. После этого были получены пентазолаты аммония, гидразиния, гидроксиламмония, аминопроводных гуанидиния и некоторых катионов на основе высокоэнтальпийных гетероциклов [26–29]. Эти соли рассматривались в качестве перспективных взрывчатых веществ (ВВ) с неплохими расчетными скоростями детонации. В 2022 году изучен и предложен в качестве ВВ пентазолат лития с фантастически высокой рас-

четной скоростью детонации (11362 м/с) [30]. Неудивительно, что соли пентазола отражены во многих обзорах по ЭС [31–33].

Целью настоящей работы было изучить возможности применения пентазолата лития и некоторых других пентазолов, используемых в качестве компонентов модельных составов СТТ, и дать термодинамическое обоснование данной задачи.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

1. Выбор объектов изучения

Кроме пентазолата лития (I) [30] в качестве объектов исследования выбраны пентазолаты аммония (II) [26], гидразиния (III) [26], гидроксиламмония (IV) [26] и 1,4,5-триаминотетразолия (V) [29] (рис. 1). Свойства пентазолов I–V представлены в табл. 1.

2. Методика расчетов

Методика расчетов подробно описана в работах [1–8]. Соединения I–V использовали как основной

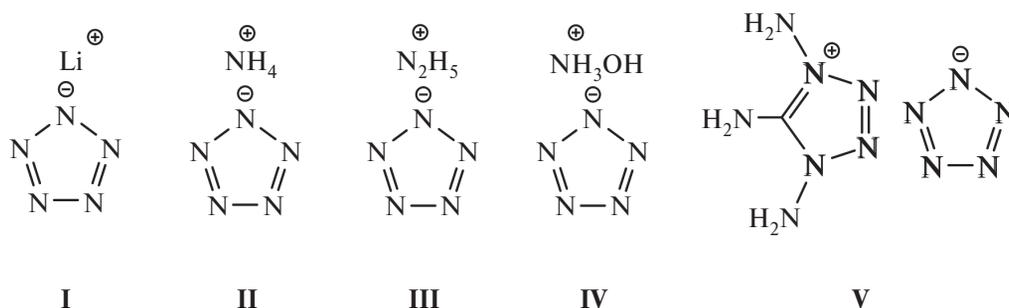


Рис. 1. Структурные формулы пентазолов I–V: I — литий; II — аммоний; III — гидразиний; IV — гидроксиламмоний; V — 1,4,5-триаминотетразолий.

Таблица 1. Физико-химические свойства пентазолов I–V

Соединение	Брутто-формула	$\Delta H_f^{\circ a}$		ρ^b , г/см ³	D^e , м/с	IS ^c , Дж	FS ^d , Н	T_{dec}^e , °С
		кДж/моль	кДж/кг					
I [30]	LiN ₅	264.5	3438	1.75	11362	3	20	133
II [26]	H ₄ N ₆	269.1	3058	1.49	8759	8	130	106.3
III [26]	H ₅ N ₇	429.6	4171	1.58	9862	7.4	120	99.6
IV [26]	H ₄ N ₆ O	327.6	3150	1.6	9473	5.5	50	105.5
V [29]	CH ₆ N ₁₂	861.9	4630	1.61	9487	2	10	96.3

^a Стандартная энтальпия образования (расчетная).

^b Плотность (экспериментальная).

^c Скорость детонации (расчетная).

^d Чувствительность к удару (экспериментальная).

^e Чувствительность к трению (экспериментальная).

^f Температура разложения.

компонент модельных смесевых топлив. В дополнение к основному компоненту брали типовое активное связующее (АС, C_{18.96}H_{34.64}N_{19.16}O_{29.32}, стандартная энтальпия образования $\Delta H_f^{\circ} = -757$ кДж/кг, плотность $\rho = 1.49$ г/см³) [34]. Кроме композиций “компонент + связующее” рассмотрены более сложные трехкомпонентные составы с добавкой алюминия как энергетического компонента или дополнительного окислителя перхлората аммония (ПХА, NH₄ClO₄, $\Delta H_f^{\circ} = -2495$ кДж/кг; $\rho = 1.95$ г/см³; $\alpha = 2.25$ [11]) или аммониевой соли динитразовой кислоты (АДНА, NH₄N₃O₄, $\Delta H_f^{\circ} = -1129$ кДж/кг; $\rho = 1.82$ г/см³; коэффициент обеспечения кислородом $\alpha = 2.0$ [35]). В качестве эталонных составов для сравнения были выбраны бинарные композиции на основе октогена (НМХ, $\Delta H_f^{\circ} = 255$ кДж/кг, $\rho = 1.9$ г/см³; $\alpha = 0.67$ [36]) — одного из самых эффективных наполнителей среди доступных соединений.

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 равнове-

сий ТЕРРА [37]. В данном исследовании мы анализировали величины эффективного импульса только на третьей ступени. Дело в том, что на нижних ступенях, где масса топлива в 4–10 раз выше, чем на третьей, чрезвычайно важны стоимость компонентов и их чувствительность к механическим воздействиям. Поэтому использование соединений I–V на нижних ступенях практически нереально. Баллистическую эффективность композиций с разными плотностями сравнивали по величине так называемого эффективного импульса $I_{ef}(3)$ на третьей ступени, значения которого рассчитывали по формуле $I_{ef}(3) = I_{sp} + 25(\rho - 1.7)$, где ρ — плотность состава СТТ в г/см³ [38]. Составы, содержащие алюминий, имеют потери в реальном значении I_{sp} из-за наличия конденсированной фазы в продуктах сгорания (двухфазные потери). Величина этих потерь оценивается в 0.22% от значения I_{sp} на каждый 1% алюминия [39] в составе. Поэтому эффективность составов с конденсированной фазой в продуктах сгорания оценивают по эффективному импульсу с учетом двухфазных потерь $I_{ef}^*(3)$; $I_{ef}^*(3) = I_{ef}(3) - 0.0022 I_{sp}[Al]$, где [Al] — процентное содержание алюми-

Таблица 2. Энергетические характеристики оптимизированных по $I_{ef}(3)$ бинарных композиций СТТ на основе соединений I–V с АС в сравнении с эталонными составами “НМХ + АС” и “АДНА + УС” при объемном содержании связующего 18%

Исследуемое соединение		Связующее	ρ , г/см ³	T_c , К	I_{sp} , с	$I_{ef}(3)$, с
№	%	АС, %				
I	84.25	15.75	1.703	2265	218.4	218.5
II	82	18.0	1.490	2075	220.4	215.2
III	82.85	17.15	1.564	2475	244.4	241.0
IV	83	17	1.580	3110	262.2	259.2
V	83.15	16.85	1.588	2595	242.8	240.0
НМХ	85.3	14.7	1.826	3165	250.4	253.6
АДНА	90.0	10	1.658	3120	250.9	249.8

ния в составе. Очевидно, что для составов без металлического горючего показатели $I_{ef}^*(3)$ и $I_{ef}(3)$ совпадают. В работе [7] подробно показано влияние двухфазных потерь на удельный импульс. Для корректного сравнения все рассматриваемые в настоящей работе составы специально подогнаны под примерно одинаковую объемную долю связующего: (18.0 ± 0.05) об. %.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

1. Рецептуры СТТ без конденсированных продуктов сгорания: “исследуемое соединение + АС”

Соединения I–V характеризуются довольно высокими значениями энтальпий образования (от 3058 до 4630 кДж/кг, табл. 1), отсутствием кислорода (I–III и V, $\alpha = 0$) или низким его содержанием (IV, $\alpha = 0.5$). Поэтому все пять соединений могут проявить себя только в сочетании с активным связующим (АС). Невысокие значения плотности этих соединений ($1.49–1.75$ г/см³, табл. 1) не позволяют ожидать от всех рассматриваемых соединений высокого потенциала в качестве энергоемких наполнителей СТТ даже на верхних ступенях. Результаты расчетов оптимизированных композиций СТТ на основе соединений I–V без конденсированных продуктов сгорания представлены в табл. 2.

Бинарные составы пентазолатов I–III и V с АС показали худшие результаты, чем классический состав с токогеном “НМХ + АС”. Только композиция “83% IV + 17% АС” с показателем $I_{ef}(3) = 259.2$ с превзошла этот классический состав на 5.6 с. Такое значение импульса на третьей ступени можно считать неплохим результатом, особенно с учетом отсутствия конденсированных продуктов сгорания и двухфазных потерь.

2. Рецептуры СТТ “исследуемое соединение + АС” с добавками

2.1. Композиции СТТ “исследуемое соединение + дополнительный окислитель ПХА или АДНА + АС”

С учетом низких значений α и невысоких плотностей соединений I–V предположим, что замена части этих наполнителей дополнительными окислителями ПХА и АДНА может дать положительный эффект. Расчеты подтвердили это предположение (табл. 3, рис. 2). Для соединений I–III и V

Таблица 3. Энергетические характеристики оптимизированных по $I_{ef}(3)$ композиций СТТ “исследуемое соединение + АС + ПХА” на основе соединений I–V при объемном содержании АС около 18% в сравнении с составом на основе октогена (НМХ)

Исследуемое соединение		Связующее	ПХА, %	ρ , г/см ³	T_c , К	I_{sp} , с	$I_{ef}(3)$, с
№	%	АС, %					
I	51.75	15.25	33	1.763	3155	240.3	241.9
II	34.1	15.9	50	1.689	3020	245.8	245.6
III	39.3	15.7	45	1.710	3125	254.0	254.3
IV	70.4	16.6	13	1.618	3190	261.7	259.7
V	39.4	15.6	45	1.724	3185	251.9	252.5
НМХ	65.4	14.6	20	1.836	3235	251.6	255.0

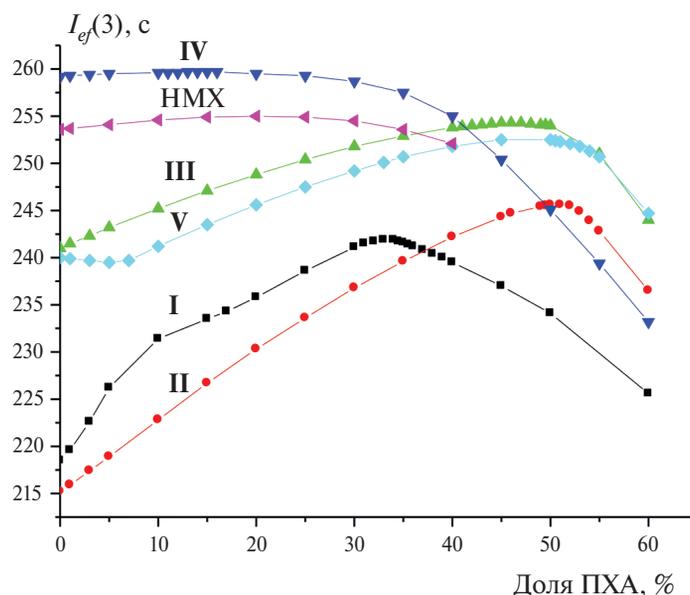


Рис. 2. Зависимость величины $I_{ef}(3)$ составов “соединения I–V или НМХ + АС + ПХА” от доли ПХА в смешанном наполнителе при объемном содержании активного связующего 18%.

Таблица 4. Энергетические характеристики оптимизированных по $I_{ef}(3)$ композиций СТТ “исследуемое соединение + АС + АДНА” на основе соединений I–V при объемном содержании АС около 18% в сравнении с составом на базе октогена (НМХ)

Исследуемое соединение		АС, %	АДНА, %	ρ , г/см ³	T_c , К	I_{sp} , с	$I_{ef}(3)$, с
№	%						
I	43.5	15.5	41	1.730	3480	241.9	242.7
II	29.8	16.2	54	1.652	3055	252.7	251.5
III	30.1	15.9	54	1.684	3140	258.9	258.5
IV	55.6	16.4	28	1.636	3220	262.8	261.2
V	33.6	15.9	50.5	1.687	3190	257.1	256.8
НМХ	55.15	14.85	30	1.803	3230	254.7	257.3

превосходство оптимизированных композиций “основной наполнитель + АС + ПХА” над бинарными весьма существенное (23.4, 30.4, 13.3 и 12.5 с соответственно), однако все они уступают классическому составу “НМХ + АС + ПХА”. Только тройная композиция “IV + АС + ПХА” существенно превосходит этот классический состав (на 4.7 с). В то же время выигрыш $I_{ef}(3)$ от добавки ПХА в бинарный состав на базе соединения IV незначителен (+0.5 с, рис. 2), поскольку этот пентазолат меньше других нуждается в дополнительном окислителе. Стоит отметить, что топлива с ПХА загрязняют атмосферу, а уменьшение вредного воздействия продуктов сгорания СТТ является одной из современных приоритетных задач.

Добавка дополнительного окислителя АДНА в бинарные составы “I–V + АС” позволяет повысить значения $I_{ef}(3)$ для всех композиций (на 24.2,

33.3, 18.5, 2.0 и 16.8 с соответственно) (табл. 2, рис. 4). Однако только композиции на основе соединений III и IV превосходят эталонный состав “НМХ + АС + АДНА” на 1.2 и 3.9 с соответственно.

Сочетание в одном составе соединения IV и окислителя АДНА может привести к еще одному осложнению – возможной химической несовместимости из-за ионного обмена между этими двумя солями с образованием нестабильной гидроксиламмониевой соли динитразовой кислоты. Подобные проблемы могут возникнуть для любых составов СТТ с двумя солевыми компонентами, если катионы в них различаются. При возможных обменных реакциях свойства СТТ будут изменяться в любом случае, даже если не будут образовываться малостабильные соединения. Это касается и составов СТТ с добавкой ПХА. Однако

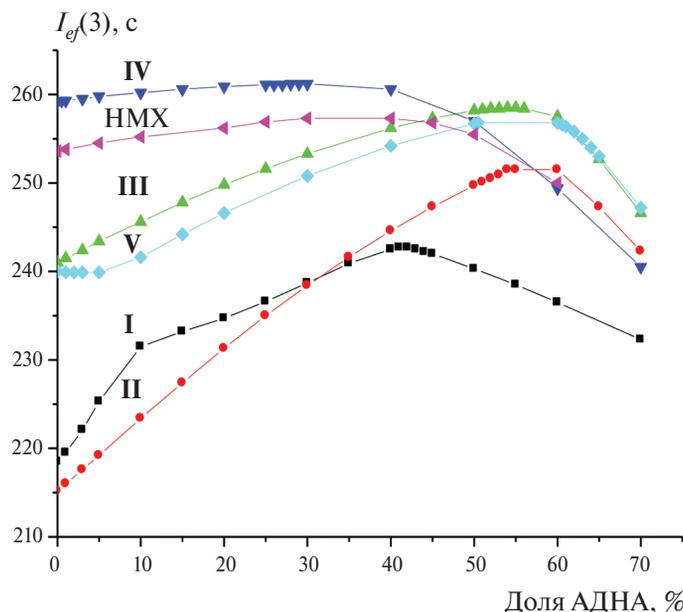


Рис. 3. Зависимость величины $I_{ef}(3)$ составов “соединения I–V или HMX + AC + АДНА” от доли АДНА в смешанном наполнителе при объемном содержании активного связующего 18%.

Таблица 5. Энергетические характеристики оптимизированных по $I_{ef}^*(3)$ композиций СТТ на основе соединений II–V “исследуемое соединение + AC + Al” на основе при объемном содержании AC около 18% в сравнении с составом на основе октогена (HMX)

Исследуемое соединение		Связующее		Al, %	ρ , г/см ³	T_c , К	I_{sp} , с	$I_{ef}^*(3)$, с
№	%	AC, %						
II	74.6	17.4		8	1.545	2500	241.4	233.3
III	76.85	16.65		6.5	1.607	2675	256.9	250.9
IV	72.8	16.2		11	1.654	3270	273.3	265.6
V	79.9	16.6		3.5	1.611	2700	247.7	243.6
HMX	75.45	14.25		10	1.882	3520	259.6	258.5

в данной работе мы рассматриваем только модельные составы СТТ и только с точки зрения энергетики.

2.2. Композиции СТТ “исследуемое соединение + AC + Al”

Добавление алюминия за счет основного наполнителя в композиции “основной наполнитель + AC” — один из эффективных приемов повышения удельного импульса даже с учетом двухфазных потерь $I_{ef}^*(3)$. Однако, как было показано в работе [39], энергетическая эффективность введения Al в композицию СТТ по мере роста ее интегральной ΔH_f° становится все менее заметной и при определенном уровне ΔH_f° сводится к нулю.

Добавление Al в бинарную композицию за счет основного наполнителя для соединений II–V повышает энергетику по сравнению с бинарным

составом на 18.1, 9.9, 6.4 и 3.6 с соответственно. Только состав “I + AC + Al” от добавки алюминия ничего не выиграл. В то же время только состав на основе соединения IV обогнал аналогичный состав с эталонным наполнителем октогеном (рис. 3). Следует отметить, что у оптимизированного состава “72.8% IV + 16.2% AC + 11% Al” значение $I_{ef}^*(3) = 265.6$ с, что на 6.4 с выше, чем у “IV + AC” (259.2 с) и является очень хорошим показателем в ряду энергоемких соединений. Очевидно, это следствие того, что в соединении IV кислород есть, а в соединениях I–III и V его нет. Значения температуры в камере сгорания T_c , для всех рассмотренных композиций гораздо ниже технологических ограничений (не выше ~3800 К).

Итак, из всех пяти солей пентазола самые плохие результаты показал пентазолат лития I. Это несколько неожиданно в свете аномально высокой расчетной скорости детонации (11362 м/с) [30].

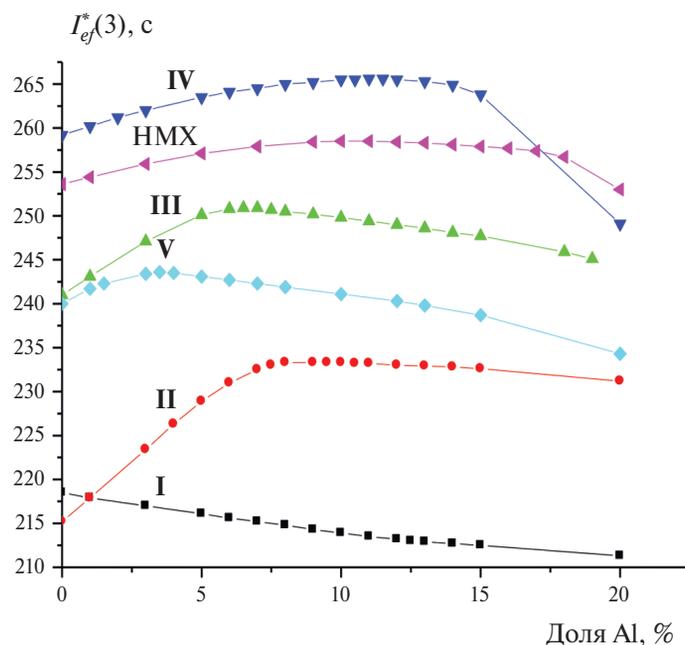


Рис. 4. Зависимость $I_{ef}^*(3)$ составов “соединения I–V или HMX + Al” от доли Al в смешанном наполнителе при объемном содержании активного связующего 18%.

С учетом выполненных расчетов энергетики СТТ с пентазолатом лития в качестве основного наполнителя столь высокая расчетная скорость детонации соли I вызывает серьезные сомнения. Неплохие результаты показала только гидроксиламмониевая соль IV, которая превосходит октоген по величине $I_{ef}(3)$ в бинарном составе с АС на 5.6 с, а в композициях с добавкой ПХА, АДНА или Al – на 4.7, 3.9 и 7.1 с соответственно. Это можно объяснить наличием кислорода в составе соли IV. Сравнительно высокое значение $\Delta H_f^\circ = 3150$ кДж/кг – недостаточный аргумент для объяснения преимущества соли IV, поскольку у солей I, III и V энтальпии образования еще более высокие (табл. 1).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из всех пяти рассмотренных соединений только пентазолат гидроксиламмония IV оказался относительно неплохим компонентом по энергетике для создания смесевых энергетических композиций. Соединение IV превосходит октоген по величине $I_{ef}(3)$ как в бинарном составе с активным связующим, так и в аналогичных композициях с добавками ПХА, АДНА или Al. Остальные соли пентазола I–III и V уступают октогену в качестве основного наполнителя СТТ. Однако надо отметить, что гидроксиламмониевая соль IV уступает по энергетике рассмотренным нами ранее [5, 8]

гидроксиламмониевым солям других высокоэнтальпийных гетероциклов (5,5'-азотетразол-1,1'-диола и некоторых нитроаминных производных конденсированных гетероциклов), причем соль IV хуже их и по термической стабильности и по чувствительности к удару. Термическая стабильность соли IV детально изучена в недавней работе [40]. Не стоит забывать и о том, что гидроксиламмин проявляет высокую химическую активность как окислитель, и как восстановитель, а также как сильный нуклеофил. Поэтому в смесевом топливе весьма вероятны проблемы совместимости гидроксиламмониевых солей с другими компонентами СТТ, прежде всего с активным связующим [41].

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации 124020100045-5). Расчеты высокопроизводительными методами осуществлялись за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-71-00005).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гудкова И.Ю., Зюзин И.Н., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 3. С. 53. <https://doi.org/10.31857/S0207401X20030061>
2. Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 9. С. 52. <https://doi.org/10.31857/S0207401X20090149>
3. Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 7. С. 24.

- <https://doi.org/10.31857/S0207401X2107013X>
4. Зюзин И.Н., Волохов В.М., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 9. С. 18.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X21090107>
 5. Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 1. С. 34.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X2201006X>
 6. Гудкова И.Ю., Зюзин И.Н., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 9. С. 45.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X22090114X>
 7. Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 12. С. 36.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X22120123>
 8. Зюзин И.Н., Гудкова И.Ю., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 2023. Т. 42. № 5. С. 20.
<https://doi.org/10.31857/S0207401X23050151>
 9. Gao H., Zhang Q., Shreeve J.M. // J. Mater. Chem. A. 2020. V. 8. P. 4193. <https://doi.org/10.1039/C9TA12704F>
 10. He P., Zhang J., Y. Xin et al. // Chem. Eur. J. 2016. V. 22. P. 7670.
<https://doi.org/10.1002/chem.201600257>
 11. Singh R.P., Verma R.D., Meshri D.T. et al. // Angew. Chem. Intern. Ed. 2006. V. 45. № 22. P. 3584.
<https://doi.org/10.1002/anie.200504236>
 12. Li G., Huang H., Yang J. et al. // Chin. J. Org. Chem. 2021. V. 41. № 4. P. 1466.
<https://doi.org/10.6023/cjoc202009019>
 13. Pei L., Xie C., Yin P. // Energ. Mater. Front. 2021. V. 2. P. 306.
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2021.11.003>
 14. Wu J., Xu J., Li W. et al. // Propellants, Explos., Pyrotech. 2020. V. 45. № 4. P. 536.
<https://doi.org/10.1002/prop.201900333>
 15. Sinditskii V.P., Serushkin V.V., Kolesov V.I. // Propellants Explos. Pyrotech. 2021. V. 46. № 10. P. 1504.
<https://doi.org/10.1002/prop.202100173>
 16. Fischer D., Klapotke T.M., Piercey D.G. et al. // Chem. Eur. J. 2013. V. 19. № 14. P. 4602.
<https://doi.org/10.1002/chem.201203493>
 17. Fischer N., Fischer D., Klapotke T.M. et al. // J. Mater. Chem. 2012. V. 22. № 38. P. 20418.
<https://doi.org/10.1039/C2JM33646D>
 18. Yin P., Zhang J., Mitchell L.A., Parrish D.A., Shreeve J.M. // Angew. Chem. Intern. Ed. 2016. V. 55. № 41. P. 12895
<https://doi.org/10.1002/anie.201606894>
 19. Liu Y., Zhao G., Tang Y. et al. // J. Mater. Chem. A. 2019. V. 7. № 13. P. 7875.
<https://doi.org/10.1039/c9ta01717h>
 20. Bian C., Feng W., Lei Q. et al. // Dalton Trans. 2020. V. 49. № 2. P. 368.
<https://doi.org/10.1039/c9dt03829a>
 21. Hu L., Yin P., Zhao G. et al. // J. Amer. Chem. Soc. 2018. V. 140. № 44. P.15001.
<https://doi.org/10.1021/jacs.8b09519>
 22. Voronin A.A., Balabanova S.P., Fedyanin I.V. et al. // Molecules. 2022. V. 27. № 19. P. 6287.
<https://doi.org/10.3390/molecules27196287>
 23. Voronin A.A., Fedyanin I.V., Churakov A.M. et al. // ACS Appl. Energy Mater. 2020. V. 3. № 9. P. 9401.
<https://doi.org/10.1021/acsaem.0c01769>
 24. Zhang C., Sun C., Hu C. et al. // Science. 2017. V. 355. P. 374.
<https://doi.org/10.1126/science.aah3840>
 25. Xu Y., Wang Q., Shen C. et al. // Nature. 2017. V. 549. P. 78. <https://doi.org/10.1038/nature23662>
 26. Yang C., Zhang C., Zheng Z. et al. // J. Amer. Chem. Soc. 2018. V. 140. № 48. P. 16488.
<https://doi.org/10.1021/jacs.8b05106>
 27. Xu Y., Tian L., Li T. et al. // J. Mater. Chem. A. 2019. V. 7. № 20. P. 12468.
<https://doi.org/10.1039/C9TA01077G>
 28. Liao S., Zhou Z., Wang K. et al. // Energ. Mater. Front. 2020. V. 1. № 3-4. P. 172.
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2020.10.001>
 29. Yu R., Liu Y., Huang W. et al. // Ibid. 2023. V. 4. P. 63.
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.05.002>
 30. Xu Y., Ding L., Yang F. et al. // Chem. Eng. J. 2022. V. 429. 132399.
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.132399>
 31. Wang P., Xu Y., Lin Q. et al. // Chem. Soc. Rev. 2018. V. 47. P. 7522.
<https://doi.org/10.1039/C8CS00372F>
 32. Yao Y., Lin Q., Zhou X., et al. // Fire Phys. Chem. 2021. V. 1. № 1. P. 33.
<https://doi.org/10.1016/j.fpc.2021.02.001>
 33. Верещагин А.Л. // Южно-Сибирский научный вестник. 2023. № 2 (48) С. 9.
<https://doi.org/10.25699/SSSB.2023.48.2.019>
 34. Lempert D.B. // Chin. J. Explos. Propel. 2015. V. 38. № 4. P. 1.
<https://doi.org/10.14077/j.issn.1007-7812.2015.04.001>
 35. Нечипоренко Г.Н., Лемперт Д.Б. // Хим. физика. 1998. Т. 17. № 10. С. 93.
 36. Meyer R., Kohler J., Homburg A. Explosives. 7th ed. Weinheim Wiley-VCH, 2016.
 37. Трусов Б.Г. // Тез. докл. XIV Междунар. конф. по хим. термодинамике. СПб: НИИ Химии СПбГУ, 2002. С. 483.
 38. Павловец Г.Я., Цуцуран В.И. Физико-химические свойства порохов и ракетных топлив. М.: Министерство обороны, 2009.
 39. Lempert D.B., Nechiporenko G.N., Manelis G.B. // Centr. Eur. J. Energ. Mater. 2006. V. 3. № 4. P. 73.
 40. Chen X., Zhu C., Hu B., et al. // Propellants Explos. Pyrotech. 2024. V. 49. № 3. P. e202300141.
<https://doi.org/10.1002/prop.202300141>
 41. Лемперт Д.Б., Нечипоренко Г.Н., Долганова Г.П. // Хим. физика. 1998. Т. 17. № 7. С. 87.

ENERGY CAPABILITIES OF SOME PENTAZOLE SALTS AS COMPONENTS OF MODEL COMPOSITE SOLID PROPELLANTS

I. N. Zyuzin*, I. Yu. Gudkova, D. B. Lempert

Federal Research Center of Problems of Chemical Physics and Medicinal Chemistry, Russian academy of sciences, Chernogolovka, Russia

*E-mail: zyuzin@icp.ac.ru

The energy capabilities of five pentazole salts as fillers for composite solid propellants (CSP) were studied. Of these, only hydroxylammonium pentazolate (**IV**) turned out to be a relatively good component for creating model CSPs. Compound **IV** is superior to HMX in terms of $I_{ef}(3)$ both in a binary composition with an active binder and in similar compositions with the addition of AP, ADN or Al. Lithium, ammonium, hydrazinium and 1,4,5-triaminotetrazolium pentazolates are inferior to HMX as the main filler for CSP.

Keywords: pentazole, salts, lithium, thermodynamic calculations, composite solid propellants (CSP).

REFERENCES

- I.Yu. Gudkova, I.N. Zyuzin, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **14** (2), 302 (2020).
<https://doi.org/10.1134/S1990793120020062>
- I.N. Zyuzin, I.Yu. Gudkova, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **14** (5), 804 (2020).
<https://doi.org/10.1134/S1990793120050140>
- I.N. Zyuzin, I.Yu. Gudkova, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **15** (4), 611 (2021).
<https://doi.org/10.1134/S1990793121040138>
- I.N. Zyuzin, V.M. Volochov, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **15** (5), 810 (2021).
<https://doi.org/10.1134/S1990793121050109>
- I.N. Zyuzin, I.Yu. Gudkova, D.B. Lempert. *J. Phys. Chem. B* **16** (1), 58 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122010067>
- I.Yu. Gudkova, I.N. Zyuzin, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **16** (5), 902 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122050141>
- I.N. Zyuzin, I.Yu. Gudkova, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **16** (6), 1117 (2022).
<https://doi.org/10.1134/S1990793122060240>
- I.N. Zyuzin, I.Yu. Gudkova, D.B. Lempert. *Russ. J. Phys. Chem. B* **17** (3), 710 (2023).
<https://doi.org/10.1134/S1990793123030156>
- Gao H., Zhang Q., J.M. Shreeve. *J. Mater. Chem. A* **8**, 4193 (2020).
<https://doi.org/10.1039/C9TA12704F>
- Piao He, Jian-Guo Zhang, Xin Yin, Jin-Ting Wu, Le Wu, Zun-Ning Zhou, and Tong-Lai Zhang, *Chem. A Eur. J.* **22** 7670 (2016).
<https://doi.org/10.1002/chem.201600257>
- R.P. Singh, R.D. Verma, D.T. Meshri, J.M. Shreeve, *Angew. Chem. Int. Ed.* **45**, 3584 (2006).
<https://doi.org/10.1002/anie.200504236>
- Guanglei Li, Haifeng Huang, Jun Yang, and Hongzhen Duan. *Chin. J. Org. Chem.* **41**, 1466 (2021).
<https://doi.org/10.6023/cjoc202009019>
- Le Pei, Chang-peng Xie, PingYin. *Energetic Materials Frontiers* **2**, 306 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2021.11.003>
- Jin-Ting Wu, Jin Xu, Wei Li, and Hong-Bo Li, *Propellants, Explos., Pyrotech.* **45**, 536 (2020).
<https://doi.org/10.1002/prep.201900333>
- V.P. Sinditskii, V.V. Serushkin, V.I. Kolesov. *Propellants Explos. Pyrotech.* **46**, 1504.
<https://doi.org/10.1002/prep.202100173>
- D. Fischer, T.M. Klapotke, D.G. Piercey, J. Stierstorfer. *Chem. Eur. J.* **19**, 4602 (2013).
<https://doi.org/10.1002/chem.201203493>
- N. Fischer, D. Fischer, T.M. Klapotke, D.G. Piercey, J. Stierstorfer. *J. Mater. Chem.* **22**, 20418 (2012).
<https://doi.org/10.1039/C2JM33646D>
- P. Yin, J. Zhang, L.A. Mitchell, D.A. Parrish, J.M. Shreeve. *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 12895 (2016).
<https://doi.org/10.1002/anie.201606894>
- Y. Liu, G. Zhao, Y. Tang, J. Zhang, Lu Hu, G.H. Imler, D.A. Parrish, J.M. Shreeve. *J. Mater. Chem. A* **7**, 7875 (2019).
<https://doi.org/10.1039/c9ta01717h>
- C. Bian, W. Feng, Q. Lei, H. Huang, X. Li, J. Wang, C. Li, Z. Xiao. *Dalton Trans.* **49**, 368 (2020).
<https://doi.org/10.1039/c9dt03829a>
- L. Hu, P. Yin, G. Zhao, C. He, G.H. Imler, D.A. Parrish, H. Gao, J.M. Shreeve. *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 15001 (2018).
<https://doi.org/10.1021/jacs.8b09519>
- A.A. Voronin, S.P. Balabanova, I.V. Fedyanin, A.M. Churakov, A.N. Pivkina, Yu.A. Strelenko, M.S. Klenov, V.A. Tartakovsky, *Molecules* **27**, 6287 (2022).
<https://doi.org/10.3390/molecules27196287>
- A.A. Voronin, I.V. Fedyanin, A.M. Churakov, A.N. Pivkina, N.V. Muravyev, Yu A. Strelenko, M.S. Klenov, D.B. Lempert, V.A. Tartakovsky. *ACS Appl. Energy Mater.* **3**, 9401 (2020).
<https://doi.org/10.1021/acsaem.0c01769>
- Chong Zhang, Chengguo Sun, Bingcheng Hu, Chuanning Yu, Ming Lu. *Science* **355**, 374 (2017).
<https://doi.org/10.1126/science.aah3840>

25. Yuangang Xu, Qian Wang, Cheng Shen, Qiuhan Lin, Pengcheng Wang, Ming Lu. *Nature* **549**, 78 (2017).
<https://doi.org/10.1038/nature23662>
26. Chen Yang, Chong Zhang, Zhansheng Zheng, Chao Jiang, Jun Luo, Yang Du Bingcheng Hu, Chengguo Sun, K.O. Christe. *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 16488 (2018).
<https://doi.org/10.1021/jacs.8b05106>
27. Yuangang Xu, Lili Tian, Dongxue Li, Pengcheng Wang, Ming Lu. *J. Mater. Chem. A*, **7**, 12468 (2019).
<https://doi.org/10.1039/C9TA01077G>
28. Sicheng Liao, Zhiyu Zhou, Kangcai Wang, Yunhe Jin, Jin Luo, Tianlin Liu, *Energetic Materials Frontiers* **1**, 172 (2020).
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2020.10.001>
29. Ru-jing Yu, Yu-ji Liu, Wei Huang, Yong-xing Tang. *Energetic Materials Frontiers* **4**, 63 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.05.002>
30. Yuangang Xu, Lujia Ding, Feng Yang, Dongxue Li, Pengcheng Wang, Qiuhan Lin, Ming Lu. *Chem. Eng. J.* **429**, 132399 (2022).
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.132399>
31. Pengcheng Wang, Yuangang Xu, Qiuhan Lin, Ming Lu. *Chem. Soc. Rev.* **47**, 7522 (2018).
<https://doi.org/10.1039/C8CS00372F>
32. Yuyang Yao, Qiuhan Lin, Xinli Zhou, Ming Lu. *FirePhysChem* **1**, 33 (2021).
<https://doi.org/10.1016/j.fpc.2021.02.001>
33. A.L. Vereshchagin. *South Siberian Scientific Bulletin [in Russian]*, Iss. **2(48)**, 9 (2023).
<https://doi.org/10.25699/SSSB.2023.48.2.019>
34. D.B. Lempert. *Chin. J. Explos. Propel.* **38** (4), 1 (2015).
<https://doi.org/10.14077/j.issn.1007-7812.2015.04.001>
35. G.N. Nechiporenko D.B. Lempert. *Khim. Fiz.*, **17** (10), 93 (1998).
36. R. Meyer, J. Kohler, A. Homburg. *Explosives*, Wiley-VCH, Weinheim, 7th edn (2016).
37. B.G. Trusov. Program System TERRA for Simulation Phase and Thermal Chemical Equilibrium, XIV Intern. Symp. on Chemical Thermodynamics, St-Petersburg, 483 (2002).
38. G. Pavlovets, V. Tsutsuran. *Physical and Chemical Properties of Powders and Rocket Propellants* (Ministry of Defense, Moscow, 2009) [in Russian].
39. D.B. Lempert, G.N. Nechiporenko, G.B. Manelis. *Centr. Eur. J. Energ. Mater.*, **3** (4), 73 (2006).
40. Xiang Chen, Chenguang Zhu, Bingcheng Hu, Chong Zhang, *Propellants Explos. Pyrotech.*, **49**, e202300141 (2024).
<https://doi.org/10.1002/prep.202300141>
41. D.B. Lempert, G. N. Nechiporenko, G.P. Dolganova. *Khim. Fizika* **17** (7), 87 (1998).