

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АЗИДОНИТРО СОЕДИНЕНИЙ. ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ

*Пащенко Л.Л.,<sup>1</sup> Мирошниченко Е.А.\*<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>МГУ, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИХФ РАН, Москва, Россия

\**eamir02@mail.ru*

Азидная группа является наиболее энергонасыщенной среди эксплозифорных групп, используемых при создании энергетических материалов: компонентов взрывчатых веществ и ракетных топлив. Однако, для этой группы до настоящего времени слабо изучены интермедиаты, энергетические характеристики энергий диссоциации связей,  $D$ , и средних термохимических энергий связей, в том числе, энергия перестройки фрагментов молекулы в радикалы. Нитропроизводные ароматических радикалов являются промежуточными соединениями реакций синтеза и превращения для различных нитроароматических соединений. По величинам их средних термохимических энергий связей и энергиям перестройки их радикалов также полностью отсутствуют литературные данные. Поэтому в работе также были определены соответствующие величины СТЭС и энергии перестройки радикалов с известными энтальпиями образования. Для решения поставленных задач измерены энтальпии сгорания и парообразования таких соединений. Энтальпии образования нитроароматических радикалов приняты на основе анализа современных справочных данных.

На основе уравнений химической физики, связывающих энтальпии образования соединений, энтальпии атомизации и энергии диссоциации связей, были определены энергии перестройки радикалов и СТЭС. Для определения данных для азидов решены совместно уравнения для фенилазида и азобензола. Энергия перестройки азидного радикала, полученная нами, равна нулю.

Полученные нами данные по энергиям перестройки азидонитро радикалов и энергиям диссоциации связей необходимы для технологических расчетов кинетики реакций с участием азидонитро содержащих веществ.