

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.737

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА 4,4''-ДИНИТРО-[3,3':4',3'']-ТРИС-[1,2,5]-ОКСАДИАЗОЛА

С.М. Алдошин¹, З.Г. Алиев¹, А.А. Астратъев³, Т.К. Гончаров¹,
Д.В. Дашко³, Ю.М. Милёхин², А.И. Степанов³, Н.И. Шишов²

¹Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

E-mail: aliev@icp.ac.ru

²Федеральный центр двойных технологий "Союз", Дзержинский

³СКТБ "Технолог", Санкт-Петербург

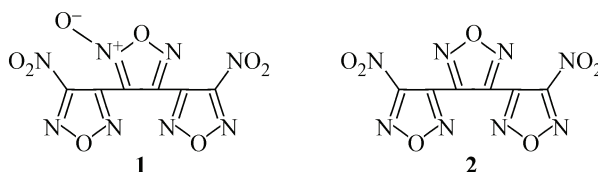
E-mail: stepanoff@pisem.net

Статья поступила 6 февраля 2012 г.

Исследована кристаллическая структура нового энергетического соединения 4,4''-динитро-[3,3':4',3'']-трис-[1,2,5]-оксадиазола.

Ключевые слова: оксадиазол, фуразан, кристаллическая структура.

Класс полициклических соединений в ряду 1,2,5-оксадиазол-2-оксида и 1,2,5-оксадиазола привлекают постоянный интерес исследователей в связи с многообразием возможных структур, их физико-химических характеристик, которые обеспечивают возможность применения их в ТРТ и в композициях взрывчатых веществ, а также тех синтетических возможностей, которые открывают соединения данного ряда. Так, недавно был описан 4,4''-динитро-[3,3':4',3'']-трис-[1,2,5]-оксадиазол-2-оксид (3,4-бис(нитрофуразано)-фуроксан, BNFF, DNTF (1)) [1]. Синтез ближайшего аналога BNFF, в котором фуроксановый цикл заменен на фуразановый, также представляет определенный интерес с практической и научной точек зрения.



4,4''-Динитро-[3,3':4',3'']-трис-[1,2,5]-оксадиазол-2'-оксид (2), (НТФ) был получен окислением раствором пероксида водорода в серной кислоте [3,3':4',3'']-трис-[1,2,5]-оксадиазол-4,4''-диамина [2] аналогично методу, предложенному для синтеза 3,4-бис(4-нитрофуразан-3-ил)фуроксана [3].

Бесцветные хорошо ограненные в виде призм кристаллы $C_6N_8O_7$ принадлежат к ромбической сингонии: $a = 7,149(1)$, $b = 9,801(2)$, $c = 15,283(3)$ Å, $V = 1070,8(4)$ Å³, $M = 296,14$, $d_{\text{выч}} = 1,837$ г/см³, $Z = 4$, пространственная группа $P2_12_12_1$. Набор экспериментальных отражений получен в автоматическом четырехкружном дифрактометре КМ-4 (KUMA DIFFRACTION) с χ -геометрией методом $\omega/2\theta$ -сканирования на монохроматизированном MoK_{α} -излучении, $\theta_{\text{max}} = 24,99^\circ$ (99,6 % обратного пространства). Всего измерено 1544 отражений, из них 1398 независимых [$R(\text{int}) = 0,0309$]. Поправки на поглощение не вводили ($\mu = 0,169$ мм⁻¹). Структура