

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.737

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

С.М. Алдошин<sup>1</sup>, З.Г. Алиев<sup>1</sup>, А.А. Астратъев<sup>3</sup>, Т.К. Гончаров<sup>1</sup>,  
Д.В. Дашко<sup>3</sup>, Ю.М. Милёхин<sup>2</sup>, А.И. Степанов<sup>3</sup>, Н.И. Шишов<sup>2</sup><sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

E-mail: aliev@icp.ac.ru

<sup>2</sup>Федеральный центр двойных технологий "Союз", Дзержинский<sup>3</sup>СКТБ "Технолог", Санкт-Петербург

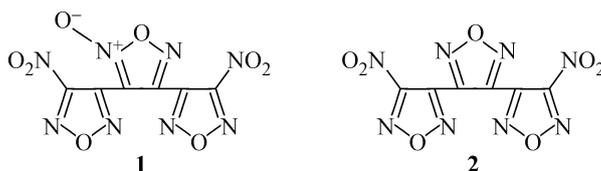
E-mail: stepanoff@pisem.net

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,  $V = 1070,8(4)$  Å<sup>3</sup>,  $M = 296,14$ ,  $d_{\text{выч}} = 1,837$  г/см<sup>3</sup>,  $Z = 4$ , пространственная группа  $P2_12_12_1$ . Набор экспериментальных отражений получен в автоматическом четырехкружном дифрактометре КМ-4 (KUMA DIFFRACTION) с  $\chi$ -геометрией методом  $\omega/2\theta$ -сканирования на монохроматизированном  $MoK_{\alpha}$ -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<sup>-1</sup>). Структура