

Федеральное государственное унитарное предприятие  
«Специальное конструкторско-технологическое бюро «Технолог»



А. А. Котомин, С. А. Душенюк, А. С. Козлов

# ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ И КОМПОЗИЦИЙ





ЛАНЬ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ · МОСКВА · КРАСНОДАР  
2021

А. А. КОТОМИН  
С. А. ДУШЕНОК  
А. С. КОЗЛОВ

# ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ И КОМПОЗИЦИЙ

МОНОГРАФИЯ

*Издание второе, стереотипное*



ЛАНЬ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГ · МОСКВА · КРАСНОДАР  
2021

УДК 622.235.2  
ББК 35.63я73

**К 73     Котомин А. А.** Эмпирические методы расчета взрывчатых веществ и композиций : монография / А. А. Котомин, С. А. Душенков, А. С. Козлов. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — Текст : непосредственный.

**ISBN 978-5-8114-6985-7**

Рассмотрены эмпирические методы расчета параметров идеальной и неидеальной детонации взрывчатых композиций различного вида, плотности монокристаллов и скорости детонации индивидуальных ВВ, а также характеристик ударного сжатия ВВ и растворов ВВ. Даны подробные примеры расчета. Большинство изложенных методов разработано авторами на кафедре Химии и технологии органических соединений азота Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета) и в СКТБ «Технолог».

Книга предназначена для научных сотрудников и специалистов, занимающихся разработкой взрывчатых композиций различного назначения и их использованием в разных областях. Кроме того, она может быть полезна для подготовки специалистов по специальности «Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий», а также аспирантов по специальности «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ».

УДК 622.235.2  
ББК 35.63я73

**Рецензенты:**

*И. В. КРАУКЛИШ* — доктор технических наук, профессор,  
советник директора-главного конструктора ФГУП «СКТБ «Технолог»;

*А. С. МАЗУР* — доктор технических наук, профессор,  
декан инженерно-технологического факультета Санкт-Петербургского  
государственного технологического института (технического университета).

**Обложка**  
*П. И. ПОЛЯКОВА*

© Издательство «Лань», 2021  
© Коллектив авторов, 2021  
© Издательство «Лань»,  
художественное оформление, 2021

# СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	7
---------------	---

## ГЛАВА 1

ГОМОГЕННЫЕ ВЗРЫВЧАТЫЕ СИСТЕМЫ.....	8
------------------------------------	---

1.1. Плотность монокристаллов взрывчатых веществ (ВВ) .....	8
1.1.1. Основы методов расчета плотности ВВ.....	8
1.1.2. Метод расчета плотности твердых и жидких ВВ по вкладам фрагментов молекул. Примеры расчета .....	12
1.2. Некоторые схемы расчета параметров ударного сжатия .....	54
1.2.1. Обобщенная ударная адиабата органических веществ.....	54
1.2.2. Ударная адиабата растворов.....	55
1.2.3. Расчет температуры и скорости звука ударно-сжатого вещества .....	55
1.2.4. Расчет параметров ударного сжатия растворов.....	57
1.3. Разложение ряда жидких ВВ и их растворов в детонационной волне ...	58
1.3.1. Исследование нитратов спиртов и их растворов .....	60
1.3.2. Исследование некоторых ЖВВ различного химического строения и их растворов .....	63
1.4. Критические диаметры и скорость детонации растворов ЖВВ в инертных органических растворителях .....	75
1.4.1. Экспериментальное исследование и метод расчета критических диаметров детонации растворов ЖВВ. Примеры расчета .....	75
1.4.2. Экспериментальное исследование и метод расчета скорости детонации растворов ЖВВ. Примеры расчета .....	84

## ГЛАВА 2

ГЕТЕРОГЕННЫЕ ВЗРЫВЧАТЫЕ СИСТЕМЫ.....	92
--------------------------------------	----

2.1. Эмпирические методы расчета параметров детонации индивидуальных ВВ .....	92
2.1.1. Некоторые экспресс-методы расчета.....	92
2.1.2. Аддитивный метод расчета параметров детонации ВВ по вкладам химических связей и групп. Примеры расчета ....	94
2.1.3. Метод расчета скорости детонации комплексных ВВ с катионами металлов и анионами-окислителями. Примеры расчета .....	115
2.1.4. Зависимость скорости детонации FOX-7 от плотности заряда.....	129

2.2. Методы расчета параметров детонации взрывчатых композиций . . . .	131
2.2.1. Теоретический метод, учитывающий ударную сжимаемость и разгон частиц инертных компонентов . . . . .	131
2.2.2. Эмпирический метод расчета взрывчатых композиций . . . . .	134
2.2.2.1. Скорость детонации ВВ с инертными органическими добавками . . . . .	136
2.2.2.2. Скорость детонации ВВ с инертными малосжимаемыми добавками (металлы, оксиды, соли и др.) . . . . .	138
2.2.2.3. Расчет скорости детонации взрывчатой композиции при реальной плотности заряда ( $\rho_0$ ) . . . . .	139
2.2.2.4. Зависимость показателя политропы продуктов взрыва композиций от вида и содержания инертных добавок . . . . .	140
2.2.2.5. Общая схема расчета взрывчатых композиций. Примеры расчета . . . . .	148
2.2.3. Расчет скорости детонации аммиачноселитренных и перхлоратных взрывчатых композиций. . . . .	158
2.2.4. Расчет параметров неидеальной детонации взрывчатых композиций. Примеры расчета . . . . .	174
2.3. Критические диаметры детонации взрывчатых композиций . . . . .	181
2.3.1. Влияние дисперсности, дефектности кристаллов и содержания ВВ . . . . .	182
2.3.2. Влияние свойств инертных органических добавок . . . . .	193
2.3.3. Влияние свойств инертных неорганических добавок . . . . .	197
2.3.4. Водные суспензии кристаллических ВВ . . . . .	199
2.3.5. Основные способы регулирования детонационной способности взрывчатых композиций . . . . .	205
2.3.6. Метод расчета критических диаметров детонации взрывчатых композиций. Примеры расчета . . . . .	223
2.3.7. Опытные и расчетно-экспериментальные величины критических диаметров детонации различных ВВ и композиций . . . . .	228

## П Р И Л О Ж Е Н И Е

ОПЫТНЫЕ И РАСЧЕТНЫЕ ПЛОТНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ. . . . .	244
Алифатические соединения . . . . .	244
Алициклические и насыщенные гетероциклические соединения . . . . .	260
Ароматические и гетероароматические соединения . . . . .	270
Органические соли и металлокомплексы . . . . .	314
Жидкие соединения . . . . .	361

ЛИТЕРАТУРА . . . . .	369
----------------------	-----

## ВВЕДЕНИЕ

**В**зрывчатые материалы нашли широкое применение в технике, промышленности, строительстве, физическом эксперименте. Современные взрывчатые композиции представляют собой сложные высоконаполненные полидисперсные системы на основе кристаллических бризантных взрывчатых веществ (ВВ) различных классов и могут содержать полимерные связующие, пластификаторы, структурообразователи, армирующие и вулканизующие добавки, флегматизаторы, сенсibilизаторы, антиоксиданты, пламегасители, красители, поверхностно-активные вещества и другие компоненты.

При разработке взрывчатых композиций с заданным комплексом характеристик для решения конкретных задач специалисты используют известные надежные методы расчета физико-химических, энергетических и детонационных параметров ВВ и композиций на их основе.

В данной книге рассмотрены, в основном, эмпирические методы расчета параметров идеальной и неидеальной детонации гомогенных и гетерогенных взрывчатых систем. Представлены также метод расчета плотности твердых и жидких ВВ по вкладам фрагментов молекул и расчет характеристик ударного сжатия ВВ и расщеплений ВВ. Даны подробные примеры расчета.

Большинство изложенных методов расчета разработано авторами книги на основе результатов проведенных ими экспериментальных исследований зависимостей различных характеристик взрывчатых композиций от их состава и структуры.

# ГОМОГЕННЫЕ ВЗРЫВЧАТЫЕ СИСТЕМЫ

## 1.1. ПЛОТНОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ (ВВ)

### 1.1.1. ОСНОВЫ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ ВВ

Плотность — важнейшая характеристика вещества. Она связана с основными физико-химическими свойствами веществ и эксплуатационными характеристиками материалов на их основе. Для органических соединений на этапе планирования синтеза, наряду с молекулярным дизайном, необходимо прогнозировать их характеристики, в том числе плотность, поэтому разработка и развитие наиболее общих и точных методов расчета плотности является актуальной задачей.

Особенно остро эта проблема стоит для взрывчатых веществ и материалов, для которых плотность во многом определяет их эффективность, детонационную способность, чувствительность к внешним воздействиям, склонность к переходу горения в детонацию. Плотность используется при расчетах скорости детонации, детонационного давления, энергии взрыва, скорости горения, критического диаметра детонации и параметров различного вида воздействия взрыва на окружающую среду (бризантности, фугасности, метательной способности и др.).

Все известные методы расчета плотности ВВ можно разделить на три группы:

**Теоретические методы.** Методы Стайна, Кэди, молекулярной механики, квантово-химические методы, включая компьютерное моделирование, позволяют рассчитать плотность вещества исходя из основных физических характеристик молекул, таких как Ван-дер-Ваальсовы радиусы атомов, межатомные расстояния и углы, электростатические потенциалы, внутрирешетчатые силы притяжения и т. д. При этом используются принципы моделирования структуры молекул твердого тела и создания моделей упаковки молекул кристалла для различных пространственных конфигураций [1–8].

**Эмпирические методы.** Методы Смирнова, Тарвера, Иммиризи и Перини и других являются аддитивными и позволяют рассчитать мольный объем и плотность вещества по вкладам атомов или групп,



поправочным и иным коэффициентам, вычисленным непосредственно из опытных значений плотностей органических соединений различных классов [9–11].

**Полуэмпирические методы.** Методы Пиаценза, Якоба, Граиндорга, Блайве, Галло и других включают в себя как физические характеристики молекул, так и эмпирические коэффициенты.

Большинство эмпирических методов, прогнозирующих плотность органических соединений по вкладам входящих в них групп или атомов, либо содержат довольно малое количество вкладов и, соответственно, не являются общими, либо имеют недостаточную точность. В связи с изложенным, понятен как научный, так и практический интерес к исследованию взаимосвязи плотности органических соединений с их химическим строением и разработке современных методов расчета.

Ниже приведены некоторые известные методы расчета плотности ВВ, представляющие перечисленные группы.

#### Метод Стайна

Метод Стайна был разработан в 1981 году. Он основан на предположении, что объем единичной ячейки кристалла равен сумме объемов молекулярных элементов (составных частей молекулы, которые фактически включают некоторую часть межмолекулярного свободного объема). Молекулярный элемент — это атом в окружающей его специфической среде. Все объемы молекулярных элементов  $V_{co}$  определены для атомов H, C, N, O, F и используются для различных структур без изменений. Кристаллический молекулярный объем ( $V_{cm}$ ) рассчитывается как сумма объемов молекулярных элементов:

$$V_{cm} = \sum V_{co}. \quad (1.1)$$

Кристаллическая плотность ( $d_{Stine}$ ) рассчитывается следующим образом:

$$d_{Stine} = \frac{Mol.wt}{V_{cm}} \quad (1.2)$$

Метод Стайна пригоден для расчета плотностей только твердых веществ и в чистом виде без поправок дает значительную погрешность.

#### Метод Кэди

В данном методе для расчета объема молекулы используются физические радиусы Ван-дер-Ваальса и упаковочный коэффициент  $k$ , рассчитываемый из отношения: количество атомов водорода, связанных с атомами углерода, к общему количеству атомов в молекуле. Метод

позволяет вычислить полный объем молекулы ( $V$ ) суммированием физических Ван-дер-Ваальсовых объемов всех атомов молекулы. Это дает теоретическую максимальную плотность ( $TDM$ ), рассчитываемую как

$$TDM = \frac{Mol.wt}{V} \quad (1.3)$$

Отсюда получают предполагаемую плотность:

$$d_{Cady} = TDM \cdot k, \quad (1.4)$$

где  $k$  предположительно является эквивалентом упаковочному коэффициенту и оценивается двумя параметрами:

$$k = 0,7686 - 0,1280 \cdot \left( \frac{nbCH}{TAnb} \right), \quad (1.5)$$

где  $nbCH$  — число атомов водорода, связанных с атомами углерода;  $TAnb$  — общее количество атомов в молекуле.

### Эмпирический метод расчета плотности молекулярных кристаллов С, Н, О, N, Cl, F, Br-содержащих органических соединений С. П. Смирнова

В ряде работ показано, что плотность может быть вычислена из значений молекулярной массы и мольного объема вещества, т. е. объема занимаемого одним молем. Мольный объем как для жидких, так и для кристаллических веществ является величиной аддитивной и для него выполняется условие, выраженное следующим уравнением:

$$V_m = \sum_{i=1}^{i=n} v_i, \quad (1.6)$$

где  $V_m$  — мольный объем ( $\text{см}^3/\text{моль}$ ).

В данном методе расчета  $v_i$  — вклады атомов в мольный объем соединения (значения вкладов зависят от вида функциональной группы или цикла, в которые они входят, и особенностей химического строения молекулы), а также поправки, учитывающие некоторые дополнительные факторы (число атомов в цикле, аннелирование связей и т. д.).

По вычисленным значениям молекулярной массы ( $MM$ ) и мольного объема ( $V_m$ ) соединения рассчитывается его плотность:

$$\rho_{\text{МК}} = \frac{MM}{V_m} (\text{г/см}^3). \quad (1.7)$$

Средняя квадратичная ошибка данного метода расчета составляет  $0,031 \text{ г/см}^3$  при систематической ошибке не хуже  $0,002 \text{ г/см}^3$ . Максимально возможная ошибка при доверительной вероятности  $0,95$

заклучается в пределах 0,059–0,064 г/см<sup>3</sup>, что является удовлетворительным для ряда практических целей.

В работе [9] данный метод был модернизирован и известен как метод *MAC* — Method of Atomic Contributions.

### Метод Тарвера

Описываемый эмпирический метод разработан в конце 70-х годов XX века и предназначен для оценки плотности жидких и расчета плотности монокристаллов твердых органических веществ, содержащих атомы H, C, O, N, F [10]. Автор данного метода дает набор вкладов химических групп в мольный объем, рассчитанных из 188 структур алифатических, алициклических и ароматических нитро-, нитрозо- и аминоксоединений, кислот и спиртов. Плотность соединений рассчитывается по формуле:

$$\rho = \frac{MM}{V}, \quad (1.8)$$

где *MM* — молекулярная масса вещества, *V* — мольный объем.

Мольный объем рассчитывается как сумма вкладов отдельных групп, причем в зависимости от окружения вклады могут быть различными.

Погрешность данного метода составляет 3 %, максимальная — 8 %.

Попытка создать единый метод для расчета жидких и твердых соединений оказалась не очень удачной, т.к. автор не дает корреляционных соотношений между плотностями твердых и жидких веществ, что ограничивает использование данного метода. Кроме того, малое число вкладов позволяет рассчитывать только те соединения, которые близки по структуре с приведенными в работе [10].

### Метод Иммиризи и Перини

Данный эмпирический метод разработан также в середине 70-х годов XX века. Он позволяет рассчитывать плотность органических кристаллов исходя из объема молекул, входящих в данный кристалл. Объем молекул рассчитывается как сумма объемов атомов, входящих в молекулу [11].

С помощью методов математического моделирования, исходя из данных по плотностям пятисот органических соединений, содержащих атомы H, C, O, N, S, F, Cl, Br, I, Na, K, Rb, были рассчитаны приведенные молярные объемы для указанных атомов. Были определены поправки на наличие водородных связей и поправки для неароматических циклов.

Погрешность данного метода составляет 2,8 %, максимальная — 7 %. Однако этот метод позволяет достоверно рассчитывать плотность соединений только алифатического и ароматического рядов.

### 1.1.2. МЕТОД РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ ТВЕРДЫХ И ЖИДКИХ ВВ ПО ВКЛАДАМ ФРАГМЕНТОВ МОЛЕКУЛ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

В работах [12–14] авторами был предложен эмпирический метод расчета плотности монокристаллов органических веществ, в том числе энергонасыщенных, по вкладам фрагментов молекул. В [15–17, 64, 99, 100, 138] этот метод развит и применен для взрывчатых веществ различных классов, включая органические соли, органические иницирующие ВВ (ИВВ) и металлокомплексы.

В целом разработана комплексная система вкладов фрагментов молекул в мольный объем для твердых веществ: алифатических, алициклических, насыщенных гетероциклических, ароматических и гетероароматических соединений, в том числе конденсированных и каркасных, а также для смешанных структур, состоящих из алициклических (насыщенных гетероциклических) и ароматических (гетероароматических) колец. Даны также вклады ионных фрагментов: органических и катионов металлов. Найдены поправки на взаимодействие фрагментов, тип структуры и связь между циклами, позволяющие более тонко учесть многообразие химического строения соединений. Величины вкладов и поправок получены из опытных значений большого числа органических соединений, в том числе около 2000 энергонасыщенных веществ, из справочной и научной литературы, часть источников приведена в списке литературы [18–59].

В данном методе структурными составляющими являются фрагменты молекул, в значении вкладов которых учтено взаимодействие элементов внутри них и с близлежащими атомами. Взаимодействие электроотрицательных групп, наличие водородной связи, стерические факторы учитываются как в значении вкладов фрагментов, которые зависят от окружения, так и в различных поправках.

Фрагментами являются и функциональные группы, а для некоторых структур — атомы. Разделение молекулы на фрагменты проводится последовательно по принципу от большего к меньшему. Сначала молекула делится на более крупные фрагменты, затем оставшая часть молекулы делится на меньшие фрагменты, а возможный остаток — на атомы. При этом сумма молекулярных масс всех фрагментов равна молекулярной массе соединения. Структурные составляющие, на которые следует разделять молекулу, для различных классов соединений представлены в табл. 1.5, 1.7, 1.10.

Особое внимание уделено энергонасыщенным органическим веществам различного химического строения. Для таких соединений найдена большая часть значений вкладов фрагментов молекул, поправок на их взаимодействие, тип структуры и связь между циклами. Можно также рассчитывать плотность ионных и солевых структур, координационных соединений и кристаллогидратов, включая органические

инициирующие взрывчатые вещества. В состав органических соединений могут входить атомы C, H, N, O, S, F, Cl, Br, I, Na, K, Fe, Co, Cu, Pb, Ba, Li, Ag, Sr, Rb, Cs, Cd, Mn, Ni, Ce, Hg, Zr.

Разработанный метод позволяет рассчитывать плотность соединений при стандартной температуре 20 °C со средней относительной погрешностью: для твердых веществ 1,5 %, для жидких веществ 2,5 %. Он может быть использован в научных исследованиях, проектных работах и для экспресс-оценки плотности энергонасыщенных веществ и других органических соединений на этапе планирования синтеза.

По данному методу плотность твердого органического соединения определяется:

$$\rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V}, \quad M = \sum M_i, \quad V = \sum V_i + \sum \delta_i, \quad (1.9)$$

где  $\rho_{\text{мк}}$  — плотность монокристалла органического вещества;  $M$  — молекулярная масса соединения;  $M_i$  — молекулярная масса фрагмента;  $V$  — мольный объем соединения;  $V_i$  — мольный объем фрагмента;  $\sum \delta_i$  — сумма поправок на взаимодействие фрагментов, тип структуры, связь между циклами.

В табл. 1.5–1.14 приведены мольные объемы и молекулярные массы фрагментов органических соединений различных классов и значения поправок на взаимодействие фрагментов, тип структуры и связь между циклами.

### **Взаимосвязь плотностей органических соединений в твердом и жидком состоянии.**

Была исследована корреляция между плотностями органических соединений различных классов в твердом и жидком состоянии при стандартной температуре 20 °C. Ниже, в табл. 1.1–1.4 представлены экспериментальные плотности жидких органических соединений различных классов  $\rho_{\text{ж}}$  и рассчитанные по предложенному методу плотности этих соединений в твердом состоянии  $\rho_{\text{мк}}$  (табл. 1.1 — алифатические соединения, табл. 1.2 — алициклические и насыщенные гетероциклические соединения, табл. 1.3 — ароматические и гетероароматические соединения, табл. 1.4 — смешанные структуры, включающие алициклические или насыщенные гетероциклические и ароматические или гетероароматические циклы).

На рис. 1.1–1.4 представлены соответствующие расчетно-экспериментальные зависимости. На оси абсцисс отложены плотности соединений, рассчитанные по предложенному методу для твердого состояния ( $\rho_{\text{мк}}$ ), а на оси ординат — экспериментальные плотности для жидкого состояния ( $\rho_{\text{ж}}$ ).

Таблица 1.1

**Плотности алифатических соединений в твердом и жидком состоянии**

Соединения	$\rho_{ж}, \text{г/см}^3$ (эксп.)	$\rho_{мк}, \text{г/см}^3$ (расч.)
Нитроглицерин	1,600	1,730 (эксп)
Этиленгликольдинитрат	1,480	1,630
Диэтиленгликольдинитрат	1,380	1,541
Триэтиленгликольдинитрат	1,320	1,492
Пропиленгликольдинитрат	1,380	1,533
Этилнитрат	1,100	1,203
Нитроизобутилглицеринтринитрат	1,640	1,786
Бис-(фтординитроэтил)формаль	1,595	1,689
1-нитроэтан	1,045	1,081
3-нитробутанол	1,133	1,280
2-бутанол	0,808	0,860
2,2-дифторпропан	0,921	1,005
Изопентанолглицеринтринитрат	1,540	1,717
N,N-диэтилнитрамин	1,057	1,124
N,N,N-триметилнитрамин	0,636	0,698
Диэтилацеталь	0,831	0,934

Таблица 1.2

**Плотности алициклических и насыщенных гетероциклических соединений в твердом и жидком состоянии**

Соединения	$\rho_{ж}, \text{г/см}^3$ (эксп.)	$\rho_{мк}, \text{г/см}^3$ (расч.)
Циклогексан	0,779	0,845
Циклобутан	0,703	0,763
Циклогептан	0,810	0,880
Циклооктан	0,835	0,905
Циклопентан	0,745	0,811
Тетрагидрофуран	0,889	0,944
Тетрагидропиран	0,881	0,963
Пиперидин	0,861	0,935
Тетрагидропиррол	0,866	0,912
Морфолин	1,001	1,077

Окончание табл. 1.2

Соединения	$\rho_{ж}, \text{г/см}^3$ (эксп.)	$\rho_{мк}, \text{г/см}^3$ (расч.)
Циклогексанон	0,948	1,029
Третбутилциклогексан	0,810	0,862
Циклопропилциклопропан	0,790	0,838
Циклононан	0,850	0,923
Циклодекан	0,871	0,930
Цис-декагидронафталин	0,897	0,962

Таблица 1.3

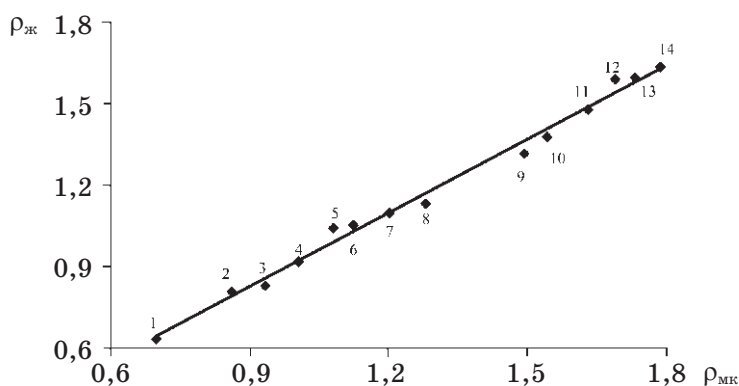
**Плотности ароматических и гетероароматических соединений  
в твердом и жидком состоянии**

Соединения	$\rho_{ж}, \text{г/см}^3$ (эксп.)	$\rho_{мк}, \text{г/см}^3$ (расч.)
Нитробензол	1,229	1,382
о-Нитрофенол	1,295	1,486 м-: 1,485 (эксп.) п-: 1,479 (эксп.)
о-Нитротолуол	1,163	1,329
Тринитротолуол	1,500 (экстраполяция)	1,663 (эксп.)
Анилин	1,022	1,190
м-Крезол	1,034	1,203
о-Крезол	1,047	1,203
п-Крезол	1,034	1,203
м-Толуидин	0,989	1,160
п-Толуидин	0,999	1,160
Динитрофуразан	1,620	1,870
N-метиланилин	0,989	1,124
N-этиланилин	0,963	1,094
1-винил-1,2,4-триазол	1,099	1,246
Пиридазин	1,107	1,222
1,2,4-триметилбензол	0,876	1,059
3-фенилпиридин	1,089	1,210
4-метилпиразол	1,022	1,210

Таблица 1.4

**Плотности смешанных структур, включающих алициклы или насыщенные гетероциклы и ароматические или гетероароматические циклы, в твердом и жидком состоянии**

Соединения	$\rho_{\text{ж}}, \text{г/см}^3$ (эксп.)	$\rho_{\text{мк}}, \text{г/см}^3$ (расч.)
Инден	0,997	1,070
Тетрагидронафталин	0,969	1,034
1,2-дигидронафталин	0,996	1,063
Индан	0,961	1,030
1,3-бензодиоксол	1,185	1,295
м-Аминометил-1,3-бензодиоксол	1,214	1,349
1,4-бензодиоксан	1,170	1,282
2,3-дигидробензофуран	1,083	1,156
N-фенилпиперазин	1,065	1,193
N-(2-метоксифенил)-пиперазин	1,106	1,193
N-фенилтетрагидропиррол	1,018	1,120
2-фенил-1,3-диоксан	1,112	1,258
4-фенил-1,3-диоксан	1,106	1,246
Циклопропилбензол	0,932	1,042
Циклогексилбензол	0,943	1,057
Окись стирола	1,052	1,171
4-(пиперидин-2-ил)-пиридин	1,045	1,164



**Рис. 1.1.** Расчетно-экспериментальная зависимость между плотностями алифатических соединений в твердом ( $\rho_{\text{мк}}$ ) и жидком ( $\rho_{\text{ж}}$ ) состоянии:

1 — N,N,N-триметилнитрамин; 2 — 2-бутанол; 3 — диэтилацеталь; 4 — 2,2-дифторпропан; 5 — 1-нитроэтан; 6 — N,N-диэтилнитрамин; 7 — этиленнитрат; 8 — 3-нитробутанол; 9 — триэтиленгликольдинитрат; 10 — диэтиленгликольдинитрат; 11 — этиленгликольдинитрат; 12 — бис-(фтординитроэтил)формаль; 13 — глицеринтринитрат; 14 — нитроизобутилглицеринтринитрат. Коэффициент корреляции — 0,99



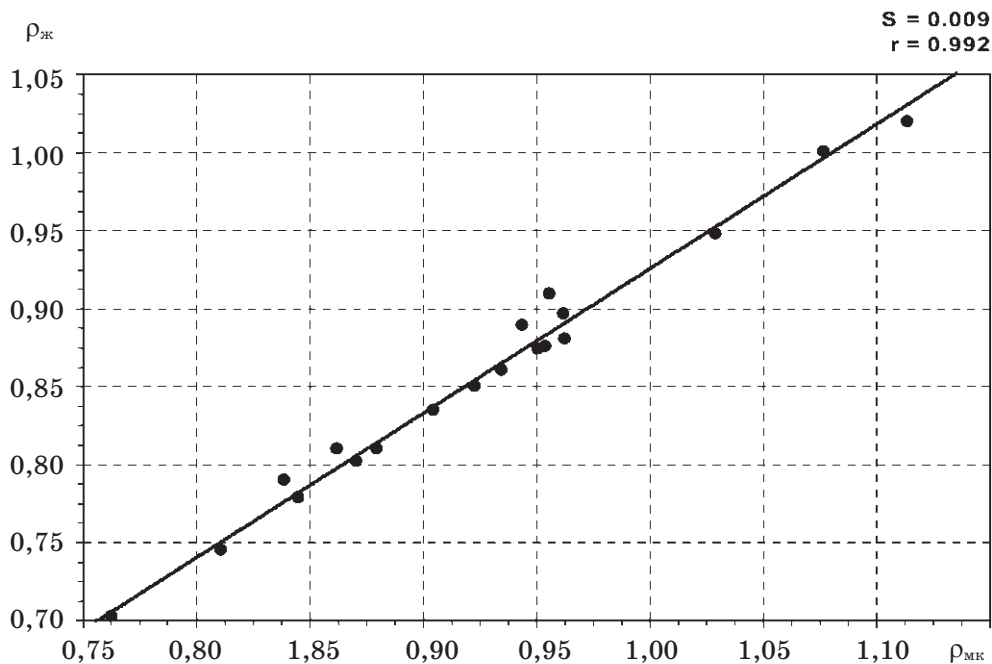


Рис. 1.2. Расчетно-экспериментальная зависимость между плотностями алициклических и насыщенных гетероциклических соединений в твердом и жидком состоянии

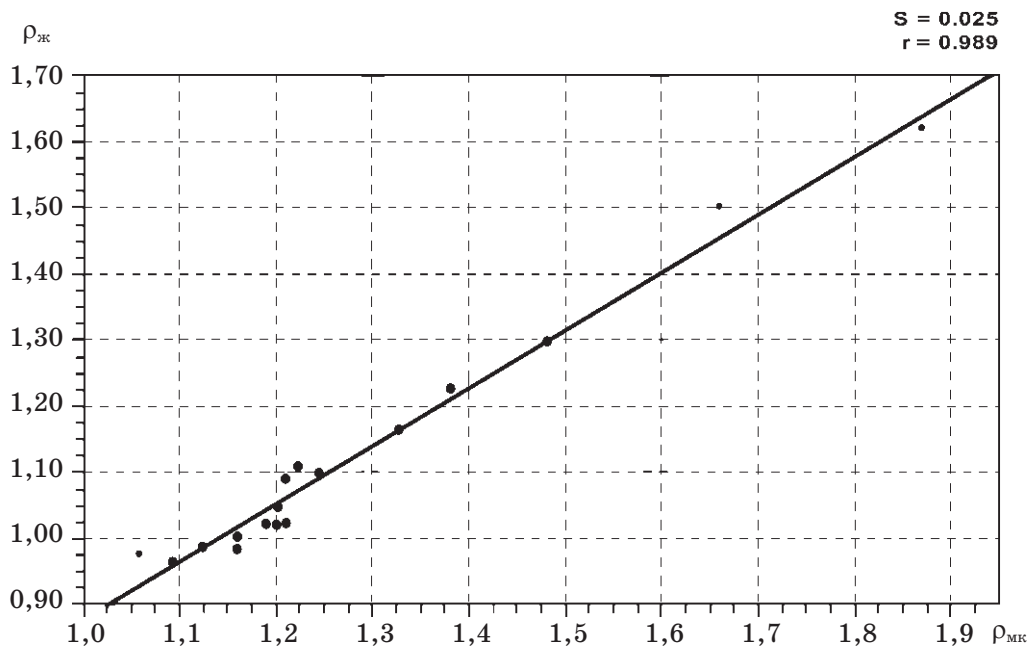


Рис. 1.3. Расчетно-экспериментальная зависимость между плотностями ароматических и гетероароматических соединений в твердом и жидком состоянии

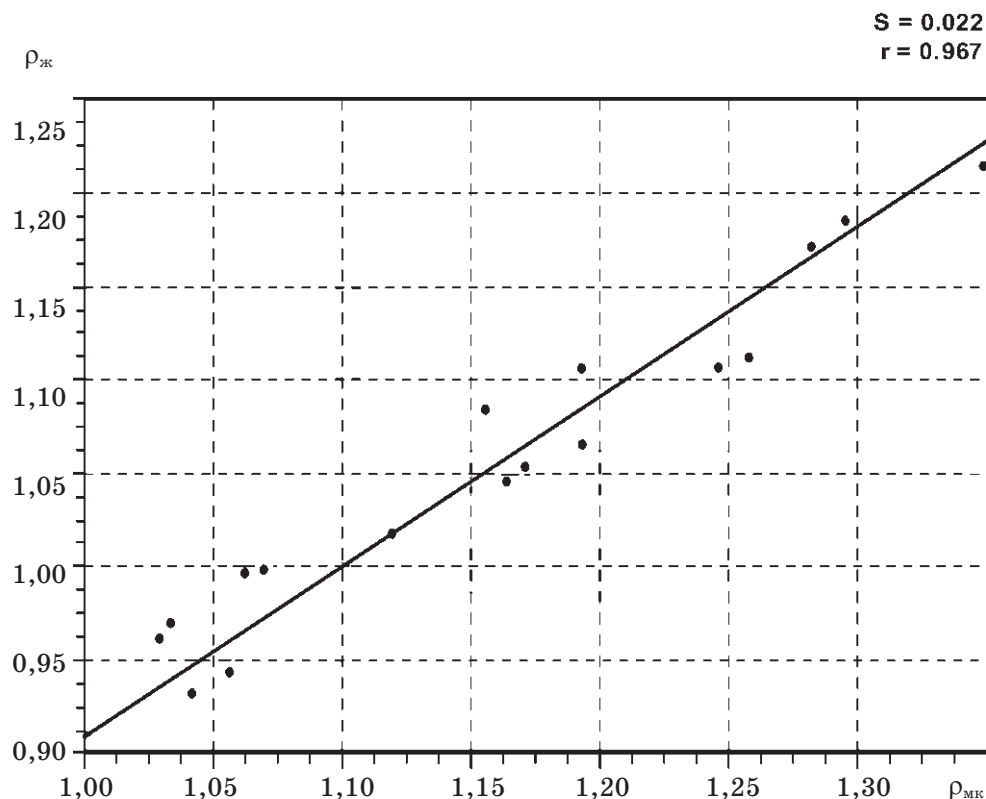


Рис. 1.4. Расчетно-экспериментальная зависимость между плотностями смешанных структур, включающих алициклические или насыщенные гетероциклические и ароматические или гетероароматические циклы, в твердом и жидком состоянии

Из приведенных рисунков видно, что между плотностями органических соединений различных классов в твердом и жидком состоянии (при стандартной температуре 20 °С) существует линейная зависимость, которая аппроксимируется следующим уравнением:

$$\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}, \quad (1.10)$$

где  $\rho_{\text{ж}}$  — плотность жидкого вещества;  $k$  — коэффициент ( $k = 0,92$  для алифатических, алициклических и насыщенных гетероциклических соединений;  $k = 0,88$  для ароматических и гетероароматических соединений;  $k = 0,90$  для смешанных структур, включающих алициклические или насыщенные гетероциклические и ароматические или гетероароматические циклы).

Установленная корреляция дает возможность прогнозировать также плотность жидких органических веществ.

Таблица 1.5

## Вклады фрагментов в мольный объем для алифатических соединений

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>С, СН, СН<sub>2</sub>, СН<sub>3</sub>-содержащие фрагменты</b>					
—CH <sub>3</sub> (для ортоэфиров, формалей, ацеталей)	28,52 24,69	15,03	=CH—	13,05	13,02
—CH <sub>2</sub> —	14,77	14,03	$\diagup$ C=	4,47	12,01
$\begin{array}{c} \text{—CH—} \\   \end{array}$	1,76	13,02	=C=	6,32	12,01
$\diagup$ C $\diagdown$	—8,92	12,01	≡CH	23,02	13,02
=CH <sub>2</sub>	25,93	14,03	≡C—	7,92	12,01
<b>ОН, О, СО, СОО-содержащие фрагменты</b>					
—ОН	11,77	17,01	=C=O	22,95	28,01
—O—	4,19	16,00	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{H}_2\text{C} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	38,35	46,02
(N)→O	5,87	16,00	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{—HC} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	23,03	45,01
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{—C} \\ \diagdown \\ \text{O—} \end{array}$	21,83	44,00	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{HC} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	34,61	61,00
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{—C} \\ \diagdown \\ \text{H} \end{array}$	22,47	29,02	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{—C} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	18,74	59,99
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \\ \text{—C} \\ \diagdown \\ \text{OH} \end{array}$	23,35	45,01	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{—O} \diagup \text{C} \diagdown \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	37,27	76,00
$\begin{array}{c} \text{(C)} \diagup \\ \text{(C)} \diagdown \end{array} \text{C=O}$	9,71	28,01	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{O=C} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	24,38	59,99
$\begin{array}{c} \text{(C,O)} \diagup \\ \text{(N,O)} \diagdown \end{array} \text{C=O}$	12,83	28,01	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{F}_2\text{C} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	46,45	82,00
$\begin{array}{c} \text{(N)} \diagup \\ \text{(N)} \diagdown \end{array} \text{C=O}$	14,89	28,01	$\begin{array}{c} \text{O—} \\ \text{(NF}_2\text{)}_2\text{C} \diagup \text{O—} \\ \text{O—} \end{array}$	82,61	148,01

Продолжение табл. 1.5

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>N, NH, NH<sub>2</sub>, N<sub>3</sub>, CN, CNH, NOH, NNO<sub>2</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$\text{—NH}_2$ (в положении 1,2 с $\text{—NO}_2$ , $\text{—COOH}$ )	15,52 11,96	16,03	$\text{—C}\equiv\text{N}$	21,00	26,02
$\text{—NH—}$	6,03	15,01	$\text{—N}_3$	29,87	42,02
$\text{—N=}$	7,03	14,01	$\text{=NOH}$	15,28	31,02
$\begin{smallmatrix} \text{(N)} \\ \diagdown \\ \text{C=NH} \\ \diagup \\ \text{(N)} \end{smallmatrix}$	15,75	27,03	$\text{>N—}$	—2,25	14,01
$\begin{smallmatrix} \text{(C)} \\ \diagdown \\ \text{C=N—} \\ \diagup \\ \text{(C)} \end{smallmatrix}$	3,64	26,02	$\text{>NNO}_2$	17,69	60,00
$\begin{smallmatrix} \text{(N)} \\ \diagdown \\ \text{C=N—} \\ \diagup \\ \text{(N)} \end{smallmatrix}$	9,62	26,02	$\text{—N(NO}_2)_2$	50,58	106,00
$\text{—N=C=N—}$	17,63	40,03	$\begin{smallmatrix} \text{(N)} \\ \diagdown \\ \text{C=NNO}_2 \\ \diagup \\ \text{(N)} \end{smallmatrix}$	36,24	72,01
<b>NO<sub>2</sub>, ONO<sub>2</sub>, NO, NHNO<sub>2</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$\text{—CH}_2\text{NO}_2$	40,47	60,02	$\text{>CHONO}_2$	39,24	75,01
$\text{>CHNO}_2$	24,72	59,01	$\text{>C(CH}_2\text{ONO}_2)_2$	104,80	164,13
$\text{=CHNO}_2$	36,05	59,01	$\text{—C(CH}_2\text{ONO}_2)_3$	145,64	240,19
$\text{≡CNO}_2$	18,64	58,01	$\text{—ONO}$	22,57	46,01
$\text{—CH(NO}_2)_2$	53,28	105,01	$\text{—C(NO}_2)_2\text{F}$	63,85	123,00
$\text{>C(NO}_2)_2$	41,69	104,00	$\text{F}_2\text{C—NO}_2$ 	59,71	96,00
$\text{=C(NO}_2)_2$	50,17	104,00			
$\text{—C(NO}_2)_3$	75,40	150,00	$\text{—OC(NO}_2)_2\text{F}$	72,02	138,99
$\text{—CH}_2\text{ONO}_2$	46,77	76,02	$\text{—NHNO}_2$	30,44	61,01

Продолжение табл. 1.5

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>F, Cl, Br, S-содержащие фрагменты</b>					
$-\text{CF}_3$	46,37	69,01	$-\text{Br}$	25,02	79,90
$-\text{CHF}_2$	37,22	51,02	$-\text{S}-$	12,99	32,06
$-\text{CF}_2-$	21,75	50,01	$-\text{SH}$	24,46	33,07
$-\text{OCF}_3$	52,81	85,00	$=\text{S}$	17,21	32,06
$-\text{NF}_2$	30,02	52,00	$\begin{array}{c} (\text{C}) \diagup \\ (\text{C}) \diagdown \end{array} \text{C}=\text{S}$	13,82	44,07
$-\text{F}$	15,49	19,00	$\begin{array}{c} (\text{N}) \diagup \\ (\text{N}) \diagdown \end{array} \text{C}=\text{S}$	19,80	44,07
$-\text{Cl}$	21,14	35,45	$\begin{array}{c} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{O} \end{array} \text{S}$	27,52	64,06
$-\text{CCl}_3$	67,01	118,36	$\begin{array}{c} -\text{O} \diagup \\ -\text{O} \diagdown \end{array} \text{S}=\text{O}$	33,64	80,06
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ -\text{C} \\ \diagup \\ \text{Cl} \end{array}$	36,59	63,46	$\begin{array}{c} -\text{O} \diagup \\ -\text{O} \diagdown \end{array} \text{S} \begin{array}{c} \diagup \text{O} \\ \diagdown \text{O} \end{array}$	36,09	96,06
<b>Ионные фрагменты</b>					
$^+\text{NH}_4$	23,42	18,04	$\text{ClO}_3^-$	35,58	83,45
$^+\text{N}_2\text{H}_5$	30,36	33,07	$\text{ClO}_4^-$	41,83	99,45
$^+\text{N}(\text{CH}_3)_4$	81,64	74,15	$\text{HCO}_3^-$	30,97	61,02
$-\text{NH}_3^+$	15,59	17,03	$\text{CO}_3^{-2}$	33,21	60,01
$^-\text{NO}_3$	29,02	61,99	$\text{SO}_3^{-2}$	30,19	80,06
$^-\text{NO}_2$	21,76	46,00	$\text{HSO}_4^-$	47,22	97,07
$^-\text{N}_3$	27,59	42,02	$\text{SO}_4^{-2}$	36,53	96,06

Окончание табл. 1.5

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
$\text{N}^-(\text{NO}_2)_2$	45,30	106,00	$\text{CN}^-$	22,14	26,02
$\text{C}^-(\text{NO}_2)_3$	75,32	150,00	$\text{NH}_3\text{OH}^+$	24,47	34,04
$\text{N}^-\text{NO}_2$	17,83	60,00	$\begin{array}{c} (\text{N}) \diagup \\ (\text{N}) \text{---} \text{C}^+ \\ (\text{N}) \diagdown \end{array}$	18,87	12,01
$\text{C}^-(\text{NO}_2)_2$	40,21	104,00	$\begin{array}{c} (\text{N}) \diagup \\ (\text{N}) \text{---} \text{C}^+ = \text{NH}_2 \end{array}$	20,61	28,03
$\text{Cl}^-$	17,68	35,45	$\begin{array}{c} (\text{N}) \diagup \\ (\text{N}) \text{---} \text{C}^+ = \text{NH} \text{---} \end{array}$	19,32	27,03
$\text{F}^-$	9,20	19,00	$\begin{array}{c} (\text{C}) \diagup \\ (\text{C}) \text{---} \text{N}^+ \text{---} \text{NH}_2 \\ (\text{C}) \diagdown \end{array}$	-18,17	30,03
$\text{Br}^-$	22,97	79,90			
Для координационных соединений и кристаллогидратов					
$\text{NH}_3$	15,91	17,03	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	18,02
$\text{NH}_2 - \text{NH}_2$	24,77	32,05			

Таблица 1.6

**Поправки на взаимодействие фрагментов (на каждое)  
для алифатических соединений**

Фрагменты	$\delta_i$	Фрагменты	$\delta_i$
$-\text{OH} \dots -\text{OH}$ (положение 1,2; виц.)	+1,56	$\begin{array}{l} >\text{NNO}_2 \dots >\text{C}=\text{O} \\ -\text{NO}_2 \dots >\text{C}=\text{O} \\ \alpha\text{-нитро(нитрамино)} \\ \text{карбонил} \end{array}$	+3,88
$\begin{array}{l} -\text{NO}_2 \dots -\text{NO}_2 \\ -\text{NO}_2 \dots -\text{ONO}_2 \\ -\text{ONO}_2 \dots -\text{ONO}_2 \end{array}$ (положение 1,2; виц.)	+0,42	$\begin{array}{l} -\text{NHNO}_2 \dots -\text{NHNO}_2 \\ -\text{NHNO}_2 \dots >\text{NNO}_2 \\ >\text{NNO}_2 \dots >\text{NNO}_2 \\ =\text{NNO}_2 \dots -\text{NHNO}_2 \end{array}$ (положение 1,1; гем.)	+1,24

Окончание табл. 1.6

Фрагменты	$\delta_i$	Фрагменты	$\delta_i$
$\text{>NNO}_2 \dots \text{—N}_3$ (положение 1,1; гем.)	+1,78	$\text{=NNO}_2 \dots \text{>NNO}_2$ (положение 1,1; гем.)	+11,06
$\text{—NF}_2 \dots \text{—NO}_2$ (положение 1,1; гем.)	+1,38	$\text{—Cl} \dots \text{—Cl}$ $\text{—Cl} \dots \text{—NO}_2$ (положение 1,1; гем.)	+2,23
$\text{—OH} \dots \text{—C} \begin{smallmatrix} \text{O} \\ \text{OH} \end{smallmatrix}$ (положение 1,2; виц.)	+4,42	$\text{>C=O} \dots \text{>C=O}$ (положение 1,2; виц.)	+4,50

Пояснения к таблицам 1.5, 1.6.

Для алифатических соединений мольный объем включает сумму вкладов фрагментов (табл. 1.5) и поправки на их взаимодействие, приведенные в табл. 1.6.

Указанный в скобках атом не включен в мольный объем фрагмента. Если фрагмент не соединен с атомом в скобках, фрагмент соединяется с любым атомом.

Таблица 1.7

**Вклады фрагментов в мольный объем для алициклических  
и насыщенных гетероциклических соединений**

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>С, СН, СН<sub>2</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$(C_c)\text{—CH}_2\text{—}(C_c)$	16,60	14,03	$\begin{smallmatrix} (A_c) \\ (A_c) \end{smallmatrix} \text{—CH—}$	5,38	13,02
$(C_c)\text{—CH}_2\text{—}(N_c)$	17,00	14,03			
$(N_c)\text{—CH}_2\text{—}(N_c)$	19,92	14,03	$\begin{smallmatrix} (C_c) \\ (C_c) \\ (A_c) \end{smallmatrix} \text{—C—}$	-5,63 *	12,01
$(O_c)\text{—CH}_2\text{—}(C_c)$	17,30	14,03			
$(O_c)\text{—CH}_2\text{—}(N_c)$	17,77	14,03	$(A_c)\text{—CH=CH—}(A_c)$	27,89	26,04
$(O_c)\text{—CH}_2\text{—}(O_c)$	19,09	14,03	$(A_c)\text{—CH=C} \begin{smallmatrix} (C, A_c) \\ (A_c) \end{smallmatrix}$	13,98	25,03
$\begin{smallmatrix} (C_c) \\ (C_c) \end{smallmatrix} \text{—CH—}(C_c)$	5,47 *	13,02	$\begin{smallmatrix} (C_c) \\ (C_c) \end{smallmatrix} \text{—C=}$	-2,92	12,01

Продолжение табл. 1.7

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
$\begin{array}{c} (N_c) \\ (N_c) \end{array} \text{CH}-(C_c)$	14,34*	13,02	$\begin{array}{c} (C, A_c) \quad (C, A_c) \\ (A_c) - C = C - (A_c) \end{array}$	-1,75	24,02
$\begin{array}{c} (N_c) \\ (N_c) \end{array} \text{CH}-(N_c)$	17,06*	13,02	$\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C = C \begin{array}{c} \diagdown \\ \diagup \end{array}$	26,50	24,02
$\begin{array}{c} (O_c) \\ (O_c) \end{array} \text{CH}-(C_c)$	10,28*	13,02	$\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C \begin{array}{c} \diagdown \\ \diagup \end{array}$	-8,90	12,01
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{CH}-(N_c, O_c)$	10,01*	13,02	$\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C \begin{array}{c} \diagdown \\ \diagup \end{array}$	-5,52	12,01
$\begin{array}{c} (O_c) \\ (C_c) \end{array} \text{CH}-(N_c)$	12,76*	13,02	$\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C \begin{array}{c} (C_{ar,het}) \\ (C_{ar,het}) \end{array}$	26,61	12,01
NNO <sub>2</sub> , NHNO <sub>2</sub> , NNO-содержащие фрагменты					
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{NNO}_2$	21,22	60,00	$\begin{array}{c} (N_c) \\ (N_c) \end{array} C = \text{NNO}_2$	40,18	72,01
$(C_c) - \text{NHNO}_2$	31,05	61,01	$\begin{array}{c} (N_c^-) \\ (N_c^-) \end{array} C = \text{NNO}_2$	29,18	72,01
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{NNO}$	15,30	44,01			
N, NH, CN, NOH-содержащие фрагменты					
$(C_c) - \text{NH} - (C_c, N_c)$	7,26	15,02	$\begin{array}{c} (C, A_c) \\ (A_c) \end{array} C = \text{N} - (A_c)$	10,54	26,02
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{N} - (C_c)$	-3,92*	14,01	$(C_c) - \text{N} = \text{N} - (C_c)$	24,82	28,01
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{N} -$	-2,61	14,01	$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} C = \text{NOH}$	18,37	43,02
$(A_c) - \text{CH} = \text{N} - (A_c)$	20,48	27,03			
NO <sub>2</sub> , ONO <sub>2</sub> , NO-содержащие фрагменты					
$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} \text{CHNO}_2$	28,40	59,02	$\begin{array}{c} (C_c) \\ (C_c) \end{array} C(\text{NO}_2)_2$	44,47	104,00



Окончание табл. 1.7

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
$(C_c)-NO_2$	25,64	46,01	$\begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} CHONO_2$	38,27	75,01
$\begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} CNO_2$	23,25*	58,01	$\begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} CNO$	11,57*	42,01
O, CO-содержащие фрагменты					
$(C_c)-O-(C_c)$	5,05	15,99	$\begin{matrix} (O_c) \\ (O_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C=O$	16,69	28,01
$(C_c)-O-(O_c)$	6,52	15,99	$\begin{matrix} (N_c) \\ (N_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C=O$	13,34	28,01
$\begin{matrix} (C_c) \\ (A_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C=O$	12,41	28,01			
F, S-содержащие фрагменты					
$\begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C(NF_2)_2$	62,13	116,03	$\begin{matrix} (A_c) \\ (A_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} SO_2$	25,36	64,05

\* Для узловых атомов конденсированных и каркасных структур.

Таблица 1.8

**Поправки на взаимодействие фрагментов (на каждое)**  
**для алициклических и насыщенных гетероциклических соединений**

Фрагменты	$\delta_i$
$\begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C(NO_2)_2 \cdots \begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C(NO_2)_2$ (положение 2,4 в каркасных структурах)	+8,18
$\begin{matrix} (N_c) \\ (N_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C=O \cdots \begin{matrix} (C_c) \\ (C_c, N_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NH$ (положение виц.)	-2,35
$\begin{matrix} (N_c) \\ (N_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C=O \cdots \begin{matrix} (C_c) \\ (C_c) \end{matrix} \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NNO_2$ (положение виц.)	+2,29

Таблица 1.9

**Поправки на тип структуры для алициклических  
и насыщенных гетероциклических соединений**

Тип структуры	$\delta_i$	Тип структуры	$\delta_i$
3-членная	+11,55	10-членная	-15,12
4-членная	+7,13	11-членная	-15,86
5-членная	+3,54	12-членная	-16,34
6-членная	0,00	16-членная	-10,30
7-членная	-4,63	Адамантановая	+3,50
8-членная	-8,79	Кубановая	+38,24
9-членная	-12,54		







Пояснения к табл. 1.7–1.9.

1. Для алициклических и насыщенных гетероциклических соединений мольный объем включает сумму вкладов фрагментов цикла (табл. 1.7), поправки на их взаимодействие (табл. 1.8) и поправку на тип структуры (табл. 1.9). Для боковых цепей и фрагментов между циклами используются вклады для алифатических соединений (табл. 1.5). Для полициклических и каркасных структур мольный объем включает сумму поправок на тип структуры для всех циклов, входящих в соединение.


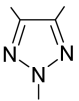

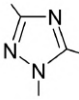

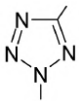



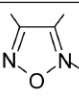
2. Указанный в скобках атом не включен в мольный объем фрагмента ( $A_c$  — любой атом цикла). Если фрагмент не соединен с атомом в скобках, фрагмент соединяется с любым атомом боковой цепи или любым другим циклом.

Таблица 1.10

**Вклады фрагментов в мольный объем  
для ароматических и гетероароматических соединений**

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>Циклы</b>					
	23,52	72,06		21,97	62,06
	28,06	74,06		22,79	64,05
	32,39	76,06		25,79	64,05

Продолжение табл. 1.10

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
	33,68	76,06		28,31	66,04
	34,80	76,06		28,68	66,04
	35,30	78,05		32,29	68,04
	37,81	80,05		33,94	68,03
	36,94	80,05		39,78	84,02
<b>Н, СН, СН<sub>2</sub>, СН<sub>3</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het})-H$	7,96	1,01	$(C_{ar,het})-CH_2-(C_{ar,het}, A_c)$	16,20	14,03
$(N_{het})-H$	5,63	1,01	$(C_{ar,het})-CH-$	-0,70	13,02
$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	15,03	$(C_{ar,het})-\overset{ }{\underset{ }{C}}-$	-16,03	12,01
$(C_{ar,het})-CH_2-$	10,19	14,03	$(C_{ar,het}, N_{het})-CH=$	12,60	13,02
$(N_{het})-CH_2-$	16,72	14,03	$(C_{ar,het})-\overset{ }{\underset{ }{C}}=$	-6,56	12,01
<b>Н, NH, NH<sub>2</sub>, N<sub>3</sub>, NF<sub>2</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$ (при наличии в цикле заместителя NO <sub>2</sub> )	14,96 11,74	16,02	$(C_{ar,het})-NF_2$	29,64	52,00
			$(C_{ar,het})-CH(NF_2)_2$	65,40	117,03
$(C_{ar,het})-NH-$	3,83	15,01	$(C_{ar,het})-NH-(C_{ar,het})$	12,22	15,01
$(C_{ar,het})-NHNH_2$	24,50	13,04	$(C_{ar,het})-NHNH-(C_{ar,het})$	28,49	30,03
$(C_{ar,het})-\overset{  }{\underset{NH}{C}}-(C_{ar,het})$	20,47	13,02	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$ для компланарной системы для некомпланар- ной системы	13,87	28,01
$(C_{ar,het})-N_3$	30,78	42,02		23,01	

Продолжение табл. 1.10

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
$(C_{ar,het})-N \begin{smallmatrix} (C, N) \\ (C) \end{smallmatrix}$	-7,73	14,01	$(C_{ar,het})=N-(C_{ar,het})$	8,67	14,01
$(C_{ar,het})-N \begin{smallmatrix} (C, C_{ar,het}) \\ (C_{ar,het}) \end{smallmatrix}$	2,14	14,01	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$ ↓ O	27,13	44,01
$(N_{het})-N=N-(N_{het})$	28,71	28,01	$(C_{ar,het})-C \equiv N$	25,27	26,02
<b>ОН, О, СО, СОО-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het})-OH$	12,49	17,00	$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-O-$	15,74	44,00
$(C_{ar,het})-O-$	4,82	15,99	$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-H$	21,31	29,01
$(C_{ar,het})-OCH_3$	26,99	31,03	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	15,99
$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-$	11,08	28,01	$(C_{ar,het})-O-(C_{ar,het})$	8,46	15,99
$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-OH$	25,80	45,00	$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{C}-(C_{ar,het})$	32,24	28,01
<b>NO<sub>2</sub>, ONO<sub>2</sub>, NO-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	46,01	$(C_{ar,het}, N_{het})-C(NO_2)_2F$	62,55	123,00
$(C_{ar,het})-NO$	10,96	30,00	$(C_{ar,het})-C(NO_2)_2Cl$	71,33	139,46
$(C_{ar,het}, N_{het})-CH(NO_2)_2$	56,72	105,01	$(N_{het})-C(NO_2)_2NF_2$	83,04	156,00
$(C_{ar,het}, N_{het})-C(NO_2)_3$	80,17	150,00	$(C_{het})-CH_2ONO_2$	48,11	76,02
$(C_{ar,het}, N_{het})-\overset{\overset{ }{\parallel}}{C}(NO_2)_2$	45,56	104,00	$(N_{het})-CH_2ONO_2$	43,39	76,02
<b>NNO<sub>2</sub>, NHNO<sub>2</sub>-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het})-NHNO_2$	27,69	61,01	$(C_{het})-N \begin{smallmatrix} NO_2 \\ \end{smallmatrix}$	27,67	60,00
$(C_{ar})-N \begin{smallmatrix} NO_2 \\ \end{smallmatrix}$	19,62	60,00	$(C_{ar,het})-\overset{\overset{O}{\parallel}}{N}=N-NO_2$	49,27	90,00

Окончание табл. 1.10

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
<b>F, Cl, Br, S-содержащие фрагменты</b>					
$(C_{ar,het})-F$	13,13	19,00	$(C_{ar,het})-Br$	26,53	79,90
$(N_{het})-F$	9,99	19,00	$(C_{ar,het})-I$	28,17	126,90
$(C_{ar,het})-Cl$	22,12	35,45	$(C_{ar,het})-CF_3$	38,00	69,01
$(N_{het})-Cl$	19,93	35,45	$(C_{ar,het})-S-(C_{ar,het})$	31,72	32,06
<b>Ионные фрагменты</b>					
$(C_{ar,het})-\bar{O}$	9,06	15,99	$(C_{het})-\bar{C}(NO_2)_2$	35,99	104,00
$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	15,99	$(N_{het})-\bar{C}(NO_2)_2$	41,33	104,00
$(N_{het})-\bar{N}NO_2$	22,61	60,00			

Таблица 1.11

**Поправки на связь между ароматическими  
(гетероароматическими) циклами**

Связь	$\delta_i$	Связь	$\delta_i$
$(C_{ar})-(C_{ar})$	+5,39	$(C_{ar})-(N_{het})$	+2,28
$(C_{ar,het})-(C_{het})$	+1,97	$(C_{het})-(N_{het})$	+1,16


Таблица 1.12

**Вклады атомов в молярный объем ароматических  
(гетероароматических) моноциклов**

Атом	$V_i$	Атом	$V_i$
$C_{ar,het}$	3,92	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24
$=N-$	7,89	$(N_{het})-O-(N_{het})$	10,54
$-N-$ 	5,27	$-S-$	21,30
$>C=O$	14,10		

Таблица 1.13

**Вклады атомов в мольный объем конденсированных ароматических  
(гетероароматических) циклов**

Атом	$V_i$	Атом	$V_i$
$C_{ar,het}$	4,00	$(C_{het}, N_{het})-N-(N_{het})$	6,42
$C_{ar,het(as)}$	6,86	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	10,00
$N_{het(as)}$	5,38	$(N_{het})-O-(N_{het})$	11,50
$(C_{het}, O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	$>C=O$	13,83
$(C_{het})-N=(N_{het})$	7,64	$-S-$	15,96
$(N_{het})-N=(N_{het})$	9,89		27,22
$(C_{het})-N-(C_{het})$	5,27		

*Пояснения к таблицам 1.10–1.13.*

1. Для ароматических и гетероароматических соединений мольный объем включает вклады циклов и заместителей (табл. 1.10), а также поправки на связь между циклами (табл. 1.11). Для боковых цепей, включая ионные фрагменты, используются вклады для алифатических соединений (табл. 1.5). При отсутствии вклада цикла в табл. 1.10 он может быть оценен по вкладам атомов (табл. 1.12). Вклад гетероцикла принимается независимым от наличия и знака заряда.

2. Указанный в скобках атом не включен в мольный объем фрагмента. Если фрагмент не соединен с атомом в скобках, фрагмент соединяется с любым атомом.

3. Для конденсированных ароматических (гетероароматических) соединений мольный объем циклов вычисляется по вкладам атомов (табл. 1.13).  $C_{(as)}$ ,  $N_{(as)}$  — общие атомы, принадлежащие соседним циклам.

4. Для полициклических соединений смешанного типа, состоящих из ароматических (гетероароматических) и алициклических (насыщенных гетероциклических) циклов, мольный объем включает:

- вклады для ароматических (гетероароматических) структур из табл. 1.10, 1.12 (для конденсированных соединений — табл. 1.13);
- вклады фрагментов для алициклических (насыщенных гетероциклических) структур (табл. 1.7), исключая атомы, входящие в ароматическую (гетероароматическую) структуру (для конденсированных соединений);
- сумму поправок на тип структуры для всех алициклов (насыщенных гетероциклов), входящих в соединение (табл. 1.9).

Таблица 1.14

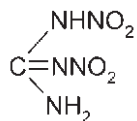
Вклады катионов металлов в мольный объем для органических солей, включая инициирующие взрывчатые вещества

Фрагмент	$V_i$	$M_i$	Фрагмент	$V_i$	$M_i$
$\text{Na}^+$	8,48	22,99	$\text{Sr}^{2+}$	18,33	87,62
$\text{K}^+$	15,91	39,10	$\text{Rb}^+$	21,10	85,47
$\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}$	3,56	55,85	$\text{Cs}^+$	24,80	132,91
$\text{Co}^{2+}, \text{Co}^{3+}$	2,41	58,93	$\text{Cd}^{2+}$	6,93	112,40
$\text{Cu}^+, \text{Cu}^{2+}$	8,22	63,54	$\text{Mn}^{2+}, \text{Mn}^{3+}$	4,44	54,94
$\text{Pb}^{2+}, \text{Pb}^{4+}$	10,56	207,19	$\text{Ni}^{2+}$	2,58	58,71
$\text{Ba}^{2+}$	20,32	137,34	$\text{Zr}^{3+}, \text{Zr}^{4+}$	12,62	91,22
$\text{Li}^+$	4,16	6,94	$\text{Ce}^{3+}, \text{Ce}^{4+}$	11,00	140,12
$\text{Ag}^+$	8,54	107,87	$\text{Hg}^+, \text{Hg}^{2+}$	15,47	200,59

### Примеры расчета

Ниже приведены примеры расчета плотности твёрдых и жидких энергетических органических соединений различного химического строения.

#### 1. Твёрдое алифатическое соединение: 1,2-динитрогуанидин, $\text{CH}_3\text{O}_4\text{N}_5$ , $M = 149,07$



Мольный объем 1,2-динитрогуанидина включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.5) и поправки на взаимодействие фрагментов (см. табл. 1.6):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$-\text{NHNO}_2$	30,44	1	$=\text{NNO}_2 \dots -\text{NHNO}_2$	+1,24	1
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{array} \text{C} = \text{NNO}_2$	36,24	1	(положение 1,1; гем.)		
$-\text{NH}_2$	11,96	1			
(в положении 1,2 с $-\text{NO}_2$ )					

Мольный объем соединения:

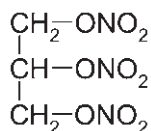
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 30,44 + 36,24 + 11,96 + 1,24 = 79,88 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла 1, 2-динитрогуанидина:

$$\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{149,07}{79,88} = 1,87 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение плотности монокристалла 1,2-динитрогуанидина составляет 1,88 г/см<sup>3</sup> [60].

**2. Жидкое алифатическое соединение:** глицеринтринитрат (нитро-глицерин),  $T_{\text{пл}} = 13,5^\circ\text{C}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_9\text{N}_3$ ,  $M = 227,09$ .



Мольный объем нитроглицерина включает следующие вклады фрагментов (табл. 1.5) и поправки на взаимодействие фрагментов (табл. 1.6):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$\text{—CH}_2\text{ONO}_2$	46,77	2	$\text{—ONO}_2 \dots \text{—ONO}_2$ (положение 1,2; виц.)	+0,42	2
$\text{>CHONO}_2$	39,24	1			

Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 46,77 \cdot 2 + 39,24 + 0,42 \cdot 2 = 133,62 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого нитроглицерина:

$$\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{227,09}{133,62} = 1,70 \text{ г/см}^3.$$

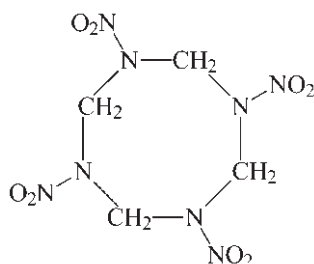
Опытное значение плотности кристаллического нитроглицерина составляет 1,73 г/см<sup>3</sup> [24].

Плотность жидкого нитроглицерина:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{МК}}$  (для алифатических соединений  $k = 0,92$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,92 \cdot 1,70 = 1,57 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности жидкого нитроглицерина составляет 1,60 г/см<sup>3</sup> [24].



**3. Твёрдое насыщенное гетероциклическое соединение: 1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетраазациклооктан (октоген),  $C_4H_8O_8N_8$ ,  $M = 296,16$**



Мольный объем октогена включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.7) и поправку на тип структуры (см. табл. 1.9):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2(N_c)$	19,92	4	8-членная	-8,79	1
$(C_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NNO_2$ $(C_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NNO_2$	21,22	4			

Мольный объем октогена:

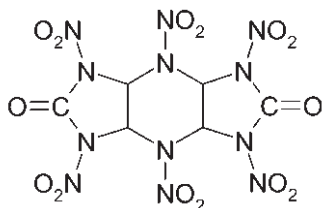
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 \cdot 4 + 21,22 \cdot 4 - 8,79 = 155,77 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла октогена:

$$\rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V} = \frac{296,16}{155,77} = 1,90 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение плотности монокристалла октогена составляет  $1,904 \text{ г/см}^3$  [61].

**4. Твёрдое конденсированное насыщенное гетероциклическое соединение: 2,6-диоксо-1,3,4,5,7,8-гексанитродекагидро-1Н,5Н-диимидазапиразин (гексанитрогликольурил),  $C_6H_4O_{14}N_{12}$ ,  $M = 468,18$ .**

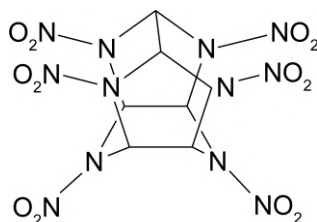


Мольный объем гексанитрогликольурила включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.7), поправки на взаимодействие фрагментов (см. табл. 1.8) и поправки на тип структуры (см. табл. 1.9):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} CH-(C_c)$	14,34	4	$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O \dots (C_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	+ 2,29	4
$(C_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	6	(положение виц.)		
$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O$	13,34	2	5-членная	+ 3,54	2
			6-членная	0,00	1

Мольный объем соединения:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,34 \cdot 4 + 21,22 \cdot 6 + 13,34 \cdot 2 + 2,29 \cdot 4 + 3,54 \cdot 2 = 227,60 \text{ см}^3/\text{моль}$ . Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{468,18}{227,60} = 2,06 \text{ г/см}^3$ . Опытное значение плотности монокристалла гексанитрогликольурила составляет  $2,07 \text{ г/см}^3$  [61].

**5. Твёрдое насыщенное гетероциклическое каркасное соединение:**  
2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан  
(CL-20),  $C_6H_6O_{12}N_{12}$ ,  $M = 438,19$



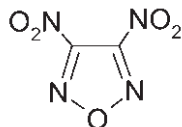
Мольный объем CL-20 включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.7) и поправки на тип структуры (табл. 1.9):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} CH-(C_c)$	14,34	6	5-членная	+3,54	2
$(C_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	6	6-членная	0,00	1
			7-членная	-4,63	2


Мольный объем CL-20:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,34 \cdot 6 + 21,22 \cdot 6 + 3,54 \cdot 2 - 4,63 \cdot 2 = 211,18 \text{ см}^3/\text{моль}$ . Плотность монокристалла CL-20:

$\rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V} = \frac{438,19}{211,18} = 2,07 \text{ г/см}^3$ . Опытное значение плотности монокристалла CL-20 составляет  $2,044 \text{ г/см}^3$  [61].

**6. Жидкое гетероароматическое соединение:** 2,3-динитрофуразан,  
 $T_{\text{пл}} = 15^\circ\text{C}$ ,  $\text{C}_2\text{O}_5\text{N}_4$ ,  $M = 160,05$ .



Мольный объем 2,3-динитрофуразана включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.10):

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	2

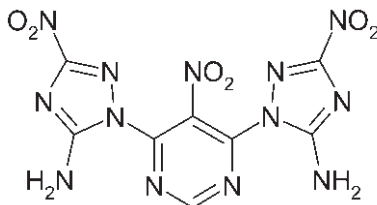
Мольный объем 2,3-динитрофуразана:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 \cdot 2 = 85,50 \text{ см}^3/\text{моль}$ . Плотность твердого 2,3-динитрофуразана:

$\rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V} = \frac{160,05}{85,50} = 1,87 \text{ г/см}^3$ .



Плотность жидкого 2,3-динитрофуразана:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для гетероароматических соединений  $k = 0,88$ ),  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,87 = 1,64 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности жидкого 2,3-динитрофуразана составляет  $1,62 \text{ г/см}^3$  [62].

**7. Твёрдое полициклическое гетероароматическое соединение:** бис-2,4-(3-нитро-5-аминотриазол-1-ил)-3-нитропиримидин (DANTNP),  $\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_6\text{N}_{13}$ ,  $M = 379,22$ .



Мольный объем DANTNP включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.10) и поправки на связь между циклами (см. табл. 1.11):

Фрагменты			Поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
	34,80	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$ (при наличии в цикле заместителя $NO_2$ )	11,74	2
	28,68	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{het})-(N_{het})$	1,16	2

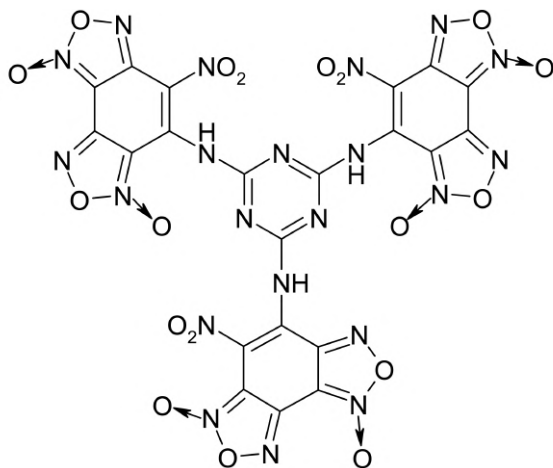
Мольный объем DANTNP:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 34,80 + 28,68 \cdot 2 + 25,78 \cdot 3 + 11,74 \cdot 2 + 7,96 + 1,16 \cdot 2 = 203,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла DANTNP:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{379,22}{203,26} = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 1,865 \text{ г/см}^3$  [61].

8. Твёрдое полициклическое гетероароматическое соединение с конденсированными структурами: N,N',N''-трис-(2-нитро-бензодифуроксанил)меламин,  $C_{21}H_3O_{18}N_{21}$ ,  $M = 837,40$



Мольный объем N,N',N''-трис-(2-нитро-бензодифуроксанил)меламина включает следующие вклады фрагментов (табл. 1.10, 1.13):

Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
	35,30	1	$C_{ar,hel}(as)$	6,86	12
$(C_{ar,hel})-NH-(C_{ar,hel})$	12,22	3	$(C_{het}'O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	12
$(C_{ar,hel},N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(N_{het})-O-(N_{het})$	11,50	6
$C_{ar,hel}$	4,00	6	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	6

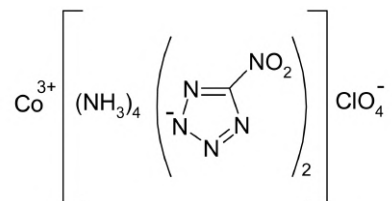
Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 35,30 + 12,22 \cdot 3 + 25,78 \cdot 3 + 4,00 \cdot 6 + 6,86 \cdot 12 + 6,40 \cdot 12 + 11,50 \cdot 6 + 5,41 \cdot 6 = 433,88 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


$$\text{Плотность монокристалла: } \rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{837,40}{433,88} = 1,93 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 1,90 \text{ г/см}^3$  [61].

**9. Органический металлокомплекс с катионом кобальта:** перхлорат тетрааммин-дис-бис(5-нитро-2Н-тетразолато-N<sup>2</sup>)кобальта (III) (BNCP),  $C_2H_{12}O_8N_{14}ClCo$ ,  $M = 454,60$ .



Мольный объем BNCP включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.5, 1.10, 1.14):

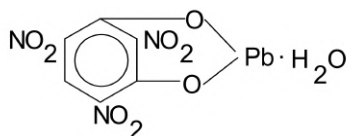
Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
$NH_3$	15,91	4		32,29	2
$Co^{3+}$	2,41	1	$(C_{ar,hel},N_{het})-NO_2$	25,78	2
$ClO_4^-$	41,83	1			

Мольный объем BNCP:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 15,91 \cdot 4 + 2,41 + 41,83 + 32,29 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 = 224,02 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла BNCP:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{454,60}{224,02} = 2,03 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 2,05 \text{ г/см}^3$  [63].

**10. Органическая соль с катионом свинца (кристаллогидрат):** тринитрорезорцинат свинца,  $\text{C}_6\text{H}_3\text{O}_9\text{N}_3\text{Pb}$ ,  $M = 468,29$ .



Мольный объем включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.5, 1.10, 1.14):

Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
	23,52	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \bar{\text{O}}$	9,06	2
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	3	$\text{Pb}^{2+}$	10,56	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{H}$	7,96	1	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	1

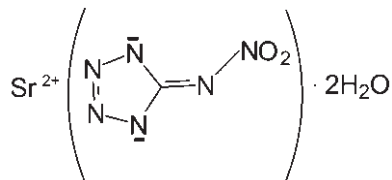
Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 + 9,06 \cdot 2 + 10,56 + 15,90 = 153,40 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{468,29}{153,40} = 3,05 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности монокристалла составляет  $3,02 \text{ г/см}^3$  [64].

**11. Органическая соль с катионом стронция (кристаллогидрат):** 5-нитроиминотетразолат стронция дигидрат,  $M = 251,70$ .



Мольный объем соединения включает следующие вклады фрагментов (табл. 1.5, 1.7, 1.12, 1.14):

Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
$=N-$	7,89	2	$(N_c) \diagup C=NNO_2$	29,18	1
$-N-$	5,27	2	$(N_c) \diagdown$	15,90	2
$Sr^{2+}$	18,33	1	$H_2O$		

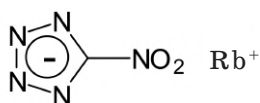
Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 29,18 + 18,33 + 15,90 \cdot 2 = 105,63 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{251,70}{105,63} = 2,38 \text{ г/см}^3.$

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 2,423 \text{ г/см}^3$  [65].

**12. Органическая соль с катионом рубидия:** 5-нитротетразолат рубидия,  $M = 199,51$ .



Мольный объем соединения включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.10, 1.14):

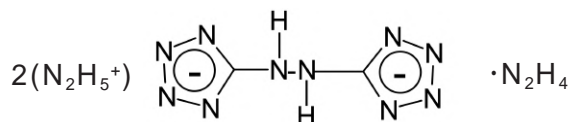
Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	32,29	1
$(C_{\text{ar,het}}, N_{\text{het}})-NO_2$	25,78	1
$Rb^+$	21,10	1

Мольный объем соединения:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 25,78 + 21,10 = 79,17 \text{ см}^3/\text{моль}.$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{199,51}{79,17} = 2,52 \text{ г/см}^3.$

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 2,489 \text{ г/см}^3$  [65].

**13. Органическая соль с катионом гидразина:** гидразиновая соль N,N'-бистетразолатогидразина,  $M = 264,26$ .



Мольный объем соединения включает следующие вклады фрагментов (табл. 1.5, 1.10):

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	32,29	2
$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{---}\text{NHNH}\text{---}(\text{C}_{\text{ar,het}})$	28,49	1
$\text{N}_2\text{H}_5^+$	30,36	2
$\text{N}_2\text{H}_4$	24,77	1

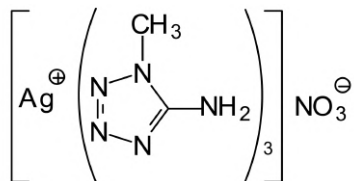
Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 28,49 + 30,36 \cdot 2 + 24,77 = 178,56 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{264,26}{178,56} = 1,48 \text{ г/см}^3$ .


Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 1,484 \text{ г/см}^3$  [65].

**14. Органический металлокомплекс с катионом серебра:** нитрат трис-(1-метил-5-амино-тетразол)серебра,  $M = 467,16$



Мольный объем соединения включает следующие вклады фрагментов (см. табл. 1.5, 1.10, 1.14):



Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
	32,29	3	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	3	$NO_3^-$	29,02	1
			$Ag^+$	8,54	1

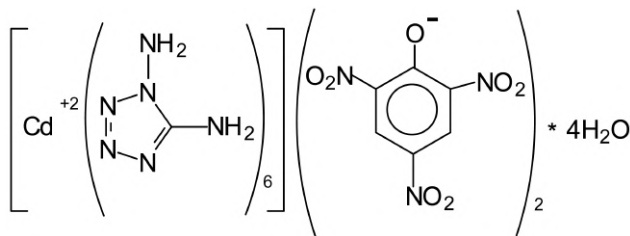
Молярный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 3 + 14,96 \cdot 3 + 22,04 \cdot 3 + 29,02 + 8,54 = 245,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$



Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = \frac{M}{V} = \frac{467,16}{245,43} = 1,90 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 1,882 \text{ г/см}^3$  [65].

**15 Органический металлокомплекс с катионом кадмия (кристаллогидрат):** пикрат гекса(1,5-диаминотетразол)кадмия(II) тетрагидрат,  $C_{18}H_{36}N_{42}O_{18}Cd$ ,  $M = 1241,16$



Молярный объем соединения включает следующие вклады фрагментов (табл. 1.5, 1.10, 1.14):

Фрагменты			Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i$	Число
	32,29	6		23,52	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	12	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	6
$H_2O$	15,90	4	$(C_{ar,het})-H$	7,96	4
$Cd^{2+}$	6,93	1	$(C_{ar,het})-O^-$	9,06	2

Мольный объем соединения:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 6 + 14,96 \cdot 12 + 15,90 \cdot 4 + 23,52 \cdot 2 + \\ + 25,78 \cdot 6 + 7,96 \cdot 4 + 9,06 \cdot 2 + 6,93 = 695,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

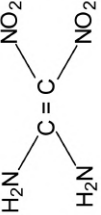

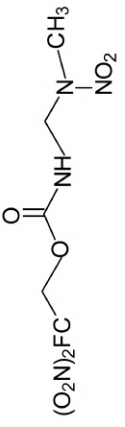

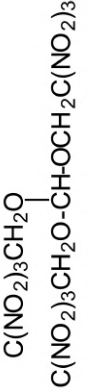
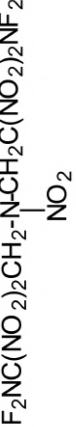
Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V} = \frac{1241,16}{695,47} = 1,79 \text{ г/см}^3.$

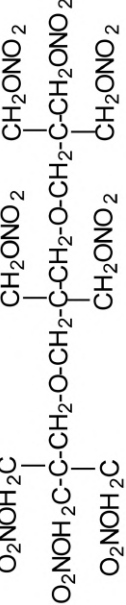
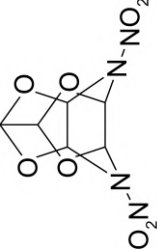
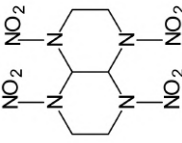

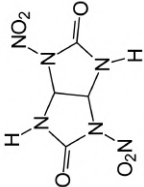
Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{\text{мк}} = 1,820 \text{ г/см}^3$  [65].

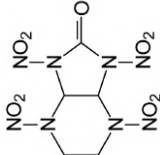
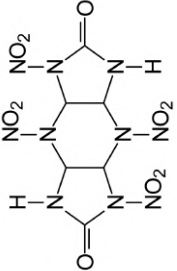
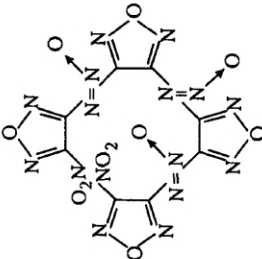
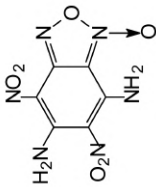
Экспериментальные и расчетные плотности монокристаллов различных взрывчатых веществ сопоставлены в табл. 1.15.

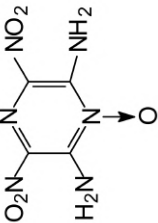
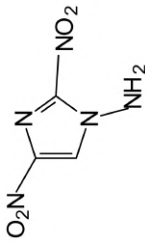
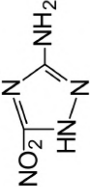
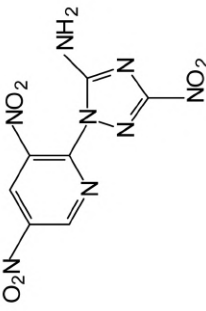
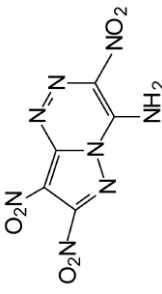
Таблица 1.15

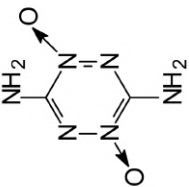
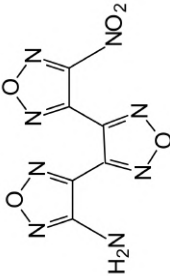
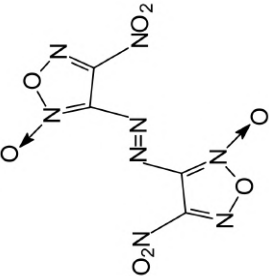
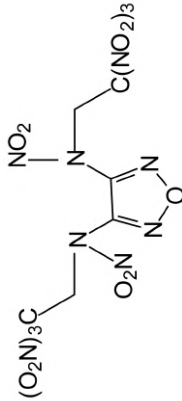
Экспериментальные и расчетные плотности монокристаллов энергетических веществ различной химической структуры

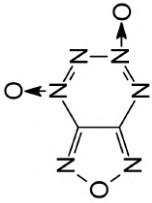
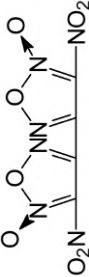
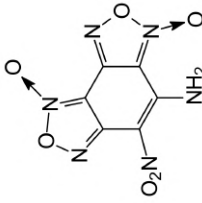
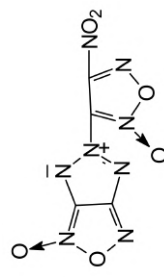
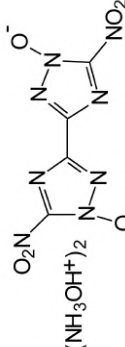
№	Вещество	Структурная формула	Плотность монокристалла, г/см <sup>3</sup>	
			экспериментальная	расчетная
1	1,1-Диамино-2,2-динитроэтилен, (FOX-7) $C_2H_4O_4N_4$		1,885 [66]	1,88
2	Тетракис-(оксо-2,2,2-тринитроэтил) метан (ТкТNECb) $C_9H_8O_{28}N_{12}$		1,810 [9]	1,84
3	О-2-Фторо-2,2-динитроэтил-N(3-нитро-3-азобутил)-карбамат $C_5H_8O_8N_5F$		1,71 [77]	1,70
4	Бис-(2,2,2-тринитроэтил) мочевины (BTNEU) $C_5H_6O_{13}N_8$		1,86 [67]	1,86
5	2,2,2-Тринитроэтилортоформат $C_7H_7O_{21}N_9$		1,80 [67]	1,81
6	Бис-(2-дифторамино-2,2-динитроэтил) нитроамин $C_4H_4O_{10}N_8F_4$		2,045 [62]	2,07

№	Вещество	Структурная формула	Плотность г/см <sup>3</sup>	
			монокристалл, эксперимен- тальная	расчетная
7	1,1,1,5,5,9,9-Окта- (нитратометил)-3,7- диоксанонан $C_{15}H_{24}O_{26}N_8$		1,58 [9]	1,58
8	4,10-Динитро-2,6,8,12- тетраокса-4,10-диаза- тетрацикло [5.5.0.0 <sup>5,9</sup> .0 <sup>3,11</sup> ]-до- декан, (ТЕХ) $C_6H_6O_8N_4$		1,985 [66]	1,98
9	Транс-1,4,5,8-тетранитро- 1,4,5,8-тетраазадекалин, (TNAD) $C_6H_{10}O_8N_8$		1,80 [67]	1,77
10	1,1,3,3-Тетранитро- циклобутан, (TNCB) $C_4H_4O_8N_4$		1,83 [62]	1,83
11	1,4-Динитрогликолурил, (DNGU) $C_4H_4O_6N_6$		1,98 [62]	1,95

№	Вещество	Структурная формула	Плотность монокристалла, г/см <sup>3</sup>	
			экспериментальная	расчетная
12	2,5,7,9-Тетранитро-2,5,7,9-тетраазабицикло [4,3,0]нонан-8-он, (К-56) $C_5H_6O_8N_8$		1,92 [67]	1,91
13	Цис-син-цис-2,6-диоксо-1,4,7,8-тетранитродекагидро-1Н,5Н-димидазо[4,5- <i>b</i> :4',5'- <i>e</i> ]пирозин $C_6H_6O_{10}N_{10}$		1,970 [62]	1,98
14	Азокси-бис-(нитрофуразанил-О, N, N-азокси)фуразан $C_8O_{11}N_{16}$		1,88 [67]	1,85
15	5,7-Диамино-4,6-динитробензфуроксан, (CL-14) $C_6H_4O_6N_6$		1,942 [66]	1,91

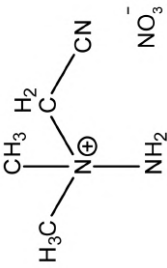
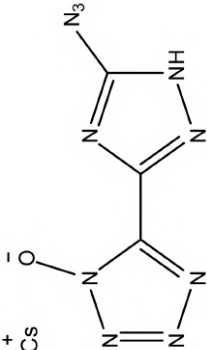
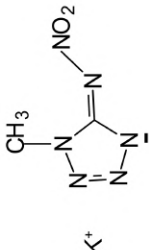
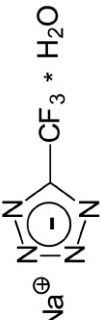
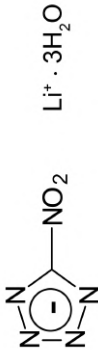
№	Вещество	Структурная формула	Плотность	
			монокристалла, г/см <sup>3</sup>	экспериментальная
16	2,6-Диамино-3,5-динитропиразин-1-оксид, (LLM-105) C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>5</sub> N <sub>6</sub>		1,918 [66]	1,92
17	1-Амино-2,4-динитроиммидазол, (ADNI) C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub> N <sub>5</sub>		1,75 [66]	1,78
18	3-Амино-5-нитро-1,2,4-триазол, (ANTA) C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub> N <sub>5</sub>		1,82 [66]	1,80
19	2-(5-Амино-3-нитро-1,2,4-триазол)-3,5-динитропиридин, (PRAN) C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> O <sub>6</sub> N <sub>8</sub>		1,815 [66]	1,82
20	4-Амино-3,7,8-тринитропразоло-[5,-1с1,2,4] триазин, (PTX) C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> O <sub>6</sub> N <sub>8</sub>		1,946 [67]	1,93


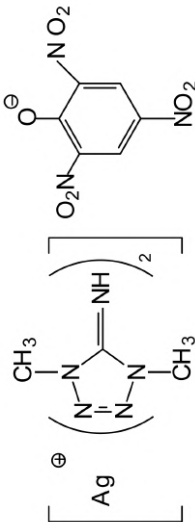
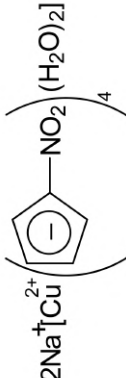
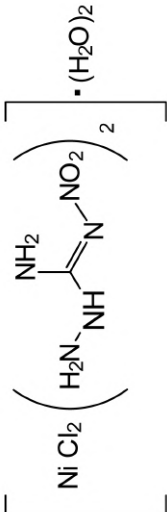
№	Вещество	Структурная формула	Плотность монокристалла, г/см <sup>3</sup>	
			монокристалла эксперимен- тальная	расчетная
21	3,6-Диамино-1,2,4,5-тетразин-1,4-диоксид, (LAX-112) $C_2H_4O_2N_6$		1,86 [66]	1,85
22	3-(4-Амино-1,2,5-оксадиазол-3-ил)-4-(4-нитро-1,2,5-оксадиазол-3-ил)-1,2,5-оксадиазол, (LLM-175) $C_6H_2O_5N_8$		1,782 [66]	1,81
23	4,4'-Динитроазофуруксан $C_4O_8N_8$		2,002 [68]	1,99
24	3,4-Бис(2,2,2-тринитроэтилнитроамино)фуразан (BTNEDNAF) $C_6H_4O_{17}N_{12}$		1,900 [9]	1,91

№	Вещество	Структурная формула	Плотность	
			монокристалла, г/см <sup>3</sup>	экспериментальная
25	Фуразанилтетразин -диоксид -1,3, (FTDO) $C_2O_8N_6$		1,85 [69]	1,86
26	4,4'-Динитро-3,3'-дифуроксан $C_4O_8N_6$		1,96 [68]	1,95
27	Аминитробензидифуроксан, (CL-18) $C_6H_2O_8N_6$		1,93 [67]	1,92
28	1,2,3-триазоло-N <sup>2</sup> -1',2',5'- фуроксан-4''-нитрофуроксан $C_4O_6N_8$		1,96 [69]	1,97
29	Ди-гидроксиламмониевая соль 3,3'-динитро-5,5'-бис-1,2,4- триазоло-1,1'-диолат, (MAD- 1X) $C_4H_8O_8N_{10}$		1,900 [9]	1,87

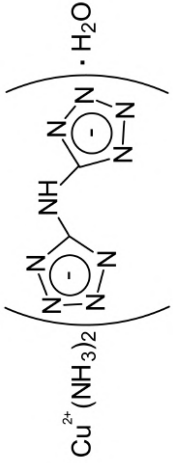
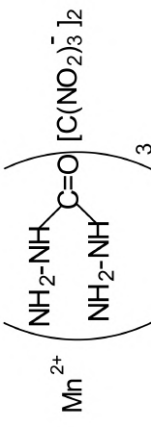
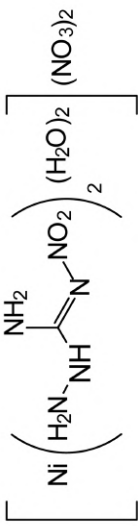
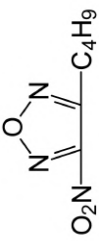


№	Вещество	Структурная формула	Плотность монокристалла, г/см <sup>3</sup>	
			экспериментальная	расчетная
30	Бис-(динитроамидат) 3,3'-бис-(4,5-диамино-1,2,4- триазолия) C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>8</sub> N <sub>16</sub>	<p>The structure shows two 1,2,4-triazolium rings linked at their 3-positions. Each ring has an amino group (-NH<sub>2</sub>) at position 4 and a dinitroamido group (-N(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>) at position 5. The triazole rings are shown with positive charges on the nitrogen atoms at positions 1 and 4.</p>	1,826 [70]	1,85
31	Нитрат 5-амино-3- метилтетразолия -N <sup>1</sup> C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> N <sub>6</sub>	<p>The structure shows a 1H-tetrazolium ring with a methyl group (-CH<sub>3</sub>) at position 3 and an amino group (-NH<sub>2</sub>) at position 5. A nitrate ion (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>) is shown as the counterion.</p>	1,620 [71]	1,61
32	Нитроформат гуанидиния C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>6</sub> N <sub>6</sub>	<p>The structure shows a guanidinium cation (C(NH<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>+</sup>) and a nitroformate anion (C(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>-</sup>).</p>	1,670 [72]	1,65
33	5-Азидотетразолат-N <sup>2</sup> -оксид аминогуанидиния C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> ON <sub>11</sub>	<p>The structure shows an amino-guanidinium cation (C(NH<sub>2</sub>)<sub>3</sub><sup>+</sup>) and a 5-azido-1H-tetrazolate-2-oxide anion. The tetrazolate ring has an azido group (-N<sub>3</sub>) at position 5 and an oxygen atom at position 2.</p>	1,578 [73]	1,57

№	Вещество	Структурная формула	Плотность	
			монокристалла, г/см <sup>3</sup>	экспериментальная
34	Нитрат 1,1-диметил-1-цианометилгидразиния C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub> N <sub>4</sub>		1,543 [71]	1,56
35	5-Азидо-1,2,4-триазоло-1Н-3-(5'-тетразолат-N <sup>1</sup> -оксид) цезия C <sub>3</sub> HON <sub>10</sub> Cs		2,501 [73]	2,49
36	1-Метил-5-нитроиминотетразолат калия C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>6</sub> O <sub>2</sub> K		1,948 [65]	1,95
37	5-Трифторметилтетразолат натрия моногидрат C <sub>2</sub> F <sub>3</sub> N <sub>4</sub> Na·H <sub>2</sub> O		1,911 [65]	1,88
38	5-Нитротетразолат лития тригидрат CH <sub>6</sub> N <sub>5</sub> O <sub>5</sub> Li		1,609 [65]	1,59

№	Вещество	Структурная формула	Плотность	
			монокристалла, г/см <sup>3</sup>	экспериментальная
39	(N,N'-гидразино-5,5'-бис-тетразолат) бария(II) тригидрат $C_2H_{14}N_{16}Ba$	 $Ba^{2+} \cdot 3(N_2H_4)$	2,109 [65]	2,13
40	Пикрат бис-(1,5-диметил-1Н-тетразолоимин) серебра(I) $C_{12}H_{16}N_{13}O_7Ag$		1,845 [65]	1,83
41	Ди-аква-тетра-(5-нитротетразолат) медь(II) ди-натрия $Na_2CuC_4H_4O_{10}N_{20}$	 $2Na^+ [Cu^{2+}(H_2O)_2(NO_2)]_4$	2,10 [65]	2,08
42	Дигидрат [бис-(3-амино-1-нитрогуанидино)-дихлоро] никеля(II) $NiC_2H_{14}O_6N_{10}Cl_2$	 $[NiCl_2(H_2N-C(=N-NO_2)-NH_2)_2] \cdot (H_2O)_2$	1,950 [74]	1,93

№	Вещество	Структурная формула	Плотность, г/см <sup>3</sup>	
			монокристаллическая	экспериментальная
43	Бис-динитроамидат диаква-бис-(3-амино-1-нитрогуанидино) кобальта(II) дигидрат $\text{CoC}_2\text{H}_{18}\text{O}_{16}\text{N}_{16}$		1,964 [74]	1,96
44	Перхлорат пентааммин(5-тринитрометил-2Н-тетразolato- N <sup>2</sup> ) кобальта(III) $\text{CoC}_2\text{H}_{15}\text{O}_{14}\text{N}_{12}\text{Cl}_2$		2,05 [75]	2,02
45	Перхлорат пентааммин(5-азидофуранано-2Н-тетразolato- N <sup>2</sup> ) кобальта(III) $\text{CoC}_3\text{H}_{15}\text{O}_9\text{N}_{14}\text{Cl}_2$		1,95 [75]	1,97

№	Вещество	Структурная формула	Плотность монокристалла, г/см <sup>3</sup>	
			экспериментальная	расчетная
46	Моногидрат диаммин-[амино- бис-5,5'-(тетразolato)]меди (II) $C_2N_{11}H_9O_3Cu$		1,953 [65]	1,94
47	Нитроформат трис- (карбогидразида) марганца(II) $C_5H_{18}N_{18}O_{15}Mn$		1,867 [65]	1,90
48	Нитрат диаква-бис-(3-амино- 1-нитрогуанидино) никеля(II) $NiC_2H_{14}O_{12}N_{12}$		2,011 [74]	1,97
49	2,2,2-Тринитроэтил-2'- нитроксизэтиловый эфир, (TNEN) (жидкость) $C_4H_6O_{10}N_4$	$C(NO_2)_3CH_2-O-CH_2CH_2ONO_2$	1,55 [67]	1,59
50	3-Бутил-4-нитрофуразан (жид- кость) $C_6H_9O_3N_3$		1,167 [76]	1,18

## 1.2. НЕКОТОРЫЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ УДАРНОГО СЖАТИЯ

Материал раздела изложен на основе работ И. М. Воскобойникова, А. Н. Афанасенкова, В. И. Богомолова, А. Ю. Долгобородова [151, 152, 216–219].

### 1.2.1. ОБОБЩЕННАЯ УДАРНАЯ АДИАБАТА ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

При решении целого ряда научных и технических задач физики высоких давлений необходимо знание ударных адиабат конденсированных веществ. Экспериментальное определение адиабат достаточно трудоемко, особенно для веществ, способных к физико-химическим превращениям под воздействием ударных волн. Отношение изученных соединений к неизученным в настоящее время достаточно мало, поэтому в целом ряде случаев используются различные способы априорного построения ударных адиабат с привлечением минимального объема сведений о начальном состоянии вещества. Для органических жидкостей наиболее часто используется обобщенная ударная адиабата:

$$D = C_0 + 2u - 0,1 \frac{u^2}{C_0}, \quad (1.11)$$

где  $D$  — скорость ударной волны;  $C_0$  — скорость звука в начальном состоянии вещества;  $u$  — массовая скорость за фронтом ударной волны до начала превращения.

Скорость звука не всегда известна, поэтому для ее нахождения используются различные эмпирические выражения. Одним из наиболее используемых является правило Рао:

$$C_0^{1/3} \frac{M}{\rho_0} = \sum z_i B_i, \quad (1.12)$$

где  $M$  — молекулярная масса;  $\rho_0$  — начальная плотность;  $z_i$  — число химических связей данного вида;  $B_i$  — инкременты этих связей.

В табл. 1.16 приведены некоторые значения инкрементов.

Таблица 1.16

Значения инкрементов связей

Связь	Величина инкремента	Связь	Величина инкремента
C – H	95,20	C – Cl	230,0
C – C	4,25	C – Br	232,4

Окончание табл. 1.16

Связь	Величина инкремента	Связь	Величина инкремента
C – C	129,00	C – F	113,0
C – C аромат.	67,2	N – H	90,7
C – O	34,50	C – NO <sub>2</sub>	302,5
C = O	186,00	O – NO <sub>2</sub>	360,0
C – N	20,70	N – NO <sub>2</sub>	330,0
O – H	99,00		

### 1.2.2. УДАРНАЯ АДИАБАТА РАСТВОРОВ

Раствор представляет собой гомогенную систему с молекулярным распределением компонентов. Ввиду этого раствор всегда рассматривается как некоторое новое жидкое вещество. Однако в растворе компоненты не всегда распределяются однородно и изотропно. Часто молекулу одного вещества окружает целая группа молекул другого, образуя так называемые ассоциативные группировки. Вследствие образования таких группировок свойства раствора зачастую отличаются от тех, которые ожидалось бы исходя из условия аддитивности.

Тем не менее, динамическую сжимаемость растворов с точностью до 10 % можно предсказывать заранее, используя обобщенную зависимость и известное значение скорости звука. Если экспериментальное значение  $C_0$  отсутствует, то его можно рассчитать по ряду эмпирических зависимостей, используя значения скоростей звука компонентов.

Скорость звука в растворах нормальных жидкостей можно рассчитать с точностью 2–3 % в предположении аддитивности скоростей звука каждого компонента:

$$C_{\text{см}} = \alpha C_1 + (1 - \alpha) C_2, \quad (1.13)$$

либо по формуле

$$(\rho_{\text{см}} C_{\text{см}})^{-1} = \alpha (\rho_1 C_1)^{-1} + (1 - \alpha) (\rho_2 C_2)^{-1}, \quad (1.14)$$

где  $\alpha$  — массовая доля первого компонента.

### 1.2.3. РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ И СКОРОСТИ ЗВУКА УДАРНО-СЖАТОГО ВЕЩЕСТВА

Расчет базируется на модели уравнения состояния молекулярного кристалла. В рамках этой модели выражения для давления  $p$  и внутренней энергии  $E$  записывается в виде:

$$p = p_x(V) + C_{v1}\Gamma \frac{T}{V}, \quad E = -\int_{\infty}^V p_x(V) dV + \int_0^T C_v dT, \quad (1.15)$$

где  $p_x(V)$  — упругая составляющая давления;  $\Gamma$  — коэффициент Грюнхайзена;  $T$  — температура;  $C_v$  — полная теплоемкость;  $C_{v1}$  — теплоемкость межмолекулярного взаимодействия;  $V$  — удельный объем.

Сравнение теплоемкостей  $C_v$  органических веществ в газовом и конденсированном состоянии показывает, что молярная теплоемкость в конденсированном состоянии обычно на 1,5–3,0  $R$  больше, чем в газовом (исключение составляют ассоциированные жидкости с О–Н и N–Н связями в молекуле). В практических расчетах оказывается полезной эмпирическая формула для молярной теплоемкости газового состояния, где каждой химической связи приписываются две колебательные степени свободы:

$$C_v = C_{v1} + R \sum_{v=1}^n \frac{\left(\frac{\theta_v^{(1)}}{2T}\right)^2}{sh^2\left(\frac{\theta_v^{(1)}}{2T}\right)} + \frac{(3g - n - s)}{n} R \sum_{v=1}^n \frac{\left(\frac{\theta_v^{(2)}}{2T}\right)^2}{sh^2\left(\frac{\theta_v^{(2)}}{2T}\right)}, \quad (1.16)$$

где  $n$  — число химических связей в молекуле;  $g$  — число атомов в молекуле;  $\theta_v^{(1)}$ ,  $\theta_v^{(2)}$  — характеристические температуры химических связей;  $s = 5$  для линейных и  $s = 6$  для нелинейных молекул.

Ударные адиабаты конденсированных веществ часто записываются в виде зависимостей скорости ударной волны  $D$  от массовой скорости  $u$ :

$$D = C_0 + bu - au^2. \quad (1.17)$$

В случае одномерного течения уравнения непрерывности и сохранения количества движения:

$$\rho_0 D = \rho(D - u); \quad p_H = \rho_0 Du, \quad (1.18)$$

где  $\rho_0$ ,  $\rho$  — плотности вещества в начальном и конечном состояниях;  $p_H$  — давление на фронте ударной волны.

Уравнение сохранения энергии примет вид:

$$0,5 p_H (V_0 - V) = -\int_{V_0}^V p_x(V) dV + \int_{T_0}^T C_v dT. \quad (1.19)$$



После необходимых преобразований и использования термодинамических тождеств были получены уравнения для определения температуры на ударном фронте (при  $u = 0$ ,  $T_H = T_0$ ) и скорости звука за ударным фронтом:

$$\frac{C_v dT}{du} = u - \frac{u(C_v + au^2)}{D} + \frac{C_{v1}\Gamma T_H (C_0 + au^2)}{(D - u)D}; \quad (1.20)$$

$$C_1^2 = \frac{(D - u)^2 \left( D + bu - 2au^2 - \frac{C_{v1}\Gamma}{C_v} u \frac{bu - 2au^2}{D - u} \right)}{C_0 + au^2}. \quad (1.21)$$

#### 1.2.4. РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ УДАРНОГО СЖАТИЯ РАСТВОРОВ

В случае известных ударных адиабат компонентов и зависимостей их температур от давления в некоторых предположениях можно рассчитать параметры ударного сжатия растворов. Приведем известный способ расчета. Начальный объем растворов и их объем при ударном сжатии и отсутствии межмолекулярного взаимодействия можно рассчитать аддитивно:

$$V_0 = \sum_i \alpha_i V_{0i}, \quad V = \sum_i \alpha_i V_i, \quad (1.22)$$

где  $V_{0i}$  и  $\alpha_i$  — удельный объем и массовое содержание  $i$ -го компонента;  $V_i$  — удельный объем  $i$ -го компонента при его сжатии в растворе.

При этом давление и температура в компонентах раствора одинаковы. По известным зависимостям для ударного сжатия компонентов можно рассчитать удельный объем  $V_i$  при  $P$  и  $T$  в растворе.

Изменение внутренней энергии при ударном нагружении можно представить как сумму холодной (упругой), зависящей только от удельного объема, и тепловой составляющих:

$$\Delta E = \Delta E_x + \Delta E_T, \quad (1.23)$$

где  $\Delta E_T = \int_{T_0}^T C_v dT$ .

$$\text{При ударном сжатии } \Delta E = \frac{P(V_0 - V)}{2},$$

тогда для раствора и компонентов:

$$\frac{P(V_0 - V)}{2} = \Delta E_x + \int_{T_0}^T C_v dT; \quad \frac{P_{Hi}(V_{0i} - V_i)}{2} = \Delta E_{xi} + \int_{T_0}^{T_i} C_{vi} dT, \quad (1.24)$$

где индекс  $H$  означает сжатие компонента по своей ударной адиабате.

Преобразования выражений приводят к формулам:

$$\left( PV_0 - \sum_i \alpha_i P_{Hi} V_{Oi} \right) - \left( PV - \sum_i \alpha_i P_{Hi} V_i \right) = 2 \sum_i \alpha_i \int_{T_i}^T C_{vi} dT; \quad (1.25)$$

$$P = P_{Hi} \left( 1 - C_{v1i} \frac{\Gamma_i}{V_i} \right) + (T - T_{1i}) C_{v1i} \frac{\Gamma_i}{V_i}. \quad (1.26)$$

Полученные уравнения образуют систему, которая при задании одного из параметров (например, температуры  $T$  раствора), позволяет получить давление и удельный объем, а используя соотношения на ударном скачке — скорость ударной волны и массовую скорость.

### 1.3. РАЗЛОЖЕНИЕ РЯДА ЖИДКИХ ВВ И ИХ РАСТВОРОВ В ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЕ

В данном разделе кратко изложены результаты совместных работ И. М. Воскобойникова, С. А. Душенка, А. А. Котомина по критическим диаметрам детонации ЖВВ и их растворов друг в друге и в инертных органических растворителях [78–83].

Исследования критических диаметров детонации индивидуальных жидких взрывчатых веществ (ЖВВ) и их растворов, помимо решения некоторых практических задач, связанных с изготовлением, хранением и транспортировкой продуктов, могут дать дополнительные сведения о макрокинетике превращений в детонационной волне и состояниях вещества за ударными фронтами. Из-за однородности жидкости превращения за ударным фронтом детонационной волны в ЖВВ и их растворах протекают в форме адиабатического взрыва, времена развития которого определяются разогревами в объеме вещества. При этом исключаются из рассмотрения низкоскоростные режимы детонации, для распространения которых существенно образование и схлопывание кавитационных полостей, возникающих на стадии инициирования и последующих стадиях и обусловленных некоторыми характеристиками материалов оболочек.

По изменению критических диаметров детонации возможно оценить эффективные кинетические величины, определяющие разложение исходного соединения за фронтом волны, однако во многих исследованиях изменения критических диаметров не превышают порядок. Этому соответствуют относительно небольшие изменения температур за фронтом волны до 20 %, которые к тому же не измеряются, а рассчитываются.

Неоднозначен переход от величин критических диаметров детонации ко времени превращения за фронтом, что вносит некоторую неопределенность в конечный результат. Правильнее ставить задачу не столько о нахождении кинетических величин по изменениям критических диаметров детонации одного ЖВВ при его разбавлении другим ЖВВ или инертным растворителем, сколько о проверке допустимости (возможности) использования при температурах и давлениях вещества за ударным фронтом детонационной волны (в рамках той или иной схемы расчета) кинетических величин, найденных при совершенно других состояниях вещества. Такая проверка необходима для соединений различных классов, поскольку заранее нельзя предсказать поведение веществ различного химического строения. Например, при оценке критического диаметра детонации нитрометана нельзя использовать энергию активации, найденную для термораспада в газовой фазе из-за разложения его при больших плотностях и давлениях в аци-форме с существенно меньшей энергией активации.

Изменение критического диаметра детонации ( $d_c$ ) ЖВВ при их разбавлении различными инертными жидкостями удается с удовлетворительной точностью предвидеть в предположении пропорциональности величины  $d_c$  и протяженности ( $L$ ) зоны химической реакции за ударным фронтом волны  $L \sim D_1 \cdot \tau$ , где  $\tau$  — задержка адиабатического взрыва вещества при температуре  $T_1$  (температура ударно-сжатого неразложившегося ВВ во фронте детонационной волны),  $D_1$  — скорость детонации. При нахождении  $\tau$  использовались константы мономолекулярного распада вещества, полученные в условиях обычного кинетического эксперимента при нормальных давлениях и значительно более низких температурах (обычно до 420 К), чем за фронтом детонационной волны.

Впервые это соотношение в виде  $d_c \sim C \cdot \tau$ , где  $C$  — скорость звука в веществе за фронтом детонационной волны, не сильно отличающаяся по величине от  $D$ , было предложено Ю. Б. Харитонов. Хотя в количественном отношении, по крайней мере для ЖВВ, предположение о близости характерных времен реакции за фронтом волны и разброса вещества с боковой поверхности не выполняется, качественная сторона зависимости не вызывает сомнения.

Соотношение  $d_c \sim D_1 \cdot \tau$  было получено И. М. Воскобойниковым при рассмотрении упрощенной модели распространения детонационной волны с плоским фронтом, на поддержание которой идет энергия, выделяющаяся за фронтом волны во всем сечении, кроме тонкого слоя толщиной  $\tau \cdot D_1$  у боковой поверхности цилиндрического заряда диаметром  $d$ .

В наших работах [78–83, 215] соотношение  $d_c \sim D_1 \cdot \tau$  постулируется, и с его использованием строится корреляционная схема оценки критических диаметров детонации ЖВВ и их растворов.

### 1.3.1. ИССЛЕДОВАНИЕ НИТРАТОВ СПИРТОВ И ИХ РАСТВОРОВ

Были проведены исследования критических диаметров детонации нитратов спиртов (нитроэфиров) и их растворов. При нормальных давлениях константы мономолекулярного распада нитроэфиров мало изменяются от соединения к соединению, а при значениях предэкспоненциального множителя  $\sim 10^{14} \text{с}^{-1}$  в уравнении Аррениуса энергии активации  $E$  находятся в диапазоне 146–167 кДж/моль.

Из обычного выражения для задержки адиабатического взрыва имеем:

$$d_c / D_1 \sim (C_v R T_1^2 / Q E) \exp(E / R T_1), \quad (1.27)$$

где  $C_v$  — теплоемкость ударно-сжатого ВВ при температуре  $T_1$ ,  $R$  — газовая постоянная;  $Q$  — теплота взрыва.

Чтобы на начальном этапе расчетов привлекать меньше величин, требующих дополнительного определения, используем соотношение  $D_1^2 \sim Q$ , с учетом которого выражение (1.27) примет вид:

$$d_c \sim (C_v T_1 / D_1) (R T_1 / E) \exp(E / R T_1). \quad (1.28)$$

Ударные адиабаты рассматриваемых ниже нитроэфиров записывали в соответствии с обобщенной зависимостью для органических жидкостей. Ударные адиабаты растворов, температуру ударного сжатия  $T_1$  для ЖВВ и растворов рассчитывали по известным методам.

Скорости детонации большинства исследованных нами нитроэфиров измерялись по непрерывной развертке свечения процесса детонации на СФР с возможной погрешностью 0,1 мм/мкс. Критические диаметры детонации ЖВВ и их растворов определялись в бумажных трубках толщиной 0,15–0,20 мм; внутренняя поверхность трубок была покрыта тонким слоем нерастворимого в жидкости полимера. Длина заряда была не менее 10 диаметров. Инициирование проводилось с применением промежуточного заряда. Испытуемый заряд помещался с небольшим воздушным зазором над металлической пластиной — «свидетелем», по отпечатку на которой судили о полноте детонации. Ошибка измерения  $d_c$  при величинах меньше 5 мм составляла 0,2 мм, при  $5 \text{ мм} < d_c < 10 \text{ мм}$  — 0,3 мм и при  $d_c > 10 \text{ мм}$  — 0,5 мм.

Для диэтиленгликольдинитрата, глицидилнитрата, хлоргидриндинитрата и глицериндинитрата приведены значения, полученные Г. Д. Козаком, Б. Н. Кондриковым и А. В. Старшиновым (МХТИ им. Д. И. Менделеева) в тонкостенных стеклянных трубках, которые подтверждены в контрольных экспериментах, проведенных в бумажных трубках. В остальных случаях указаны только собственные значения.

Зависимость экспериментальных значений критических диаметров детонации нитроэфиров и их растворов от температуры ударного сжатия приведена на рис. 1.5. Рассчитанные и измеренные значения критических диаметров детонации и других параметров представлены в табл. 1.17.

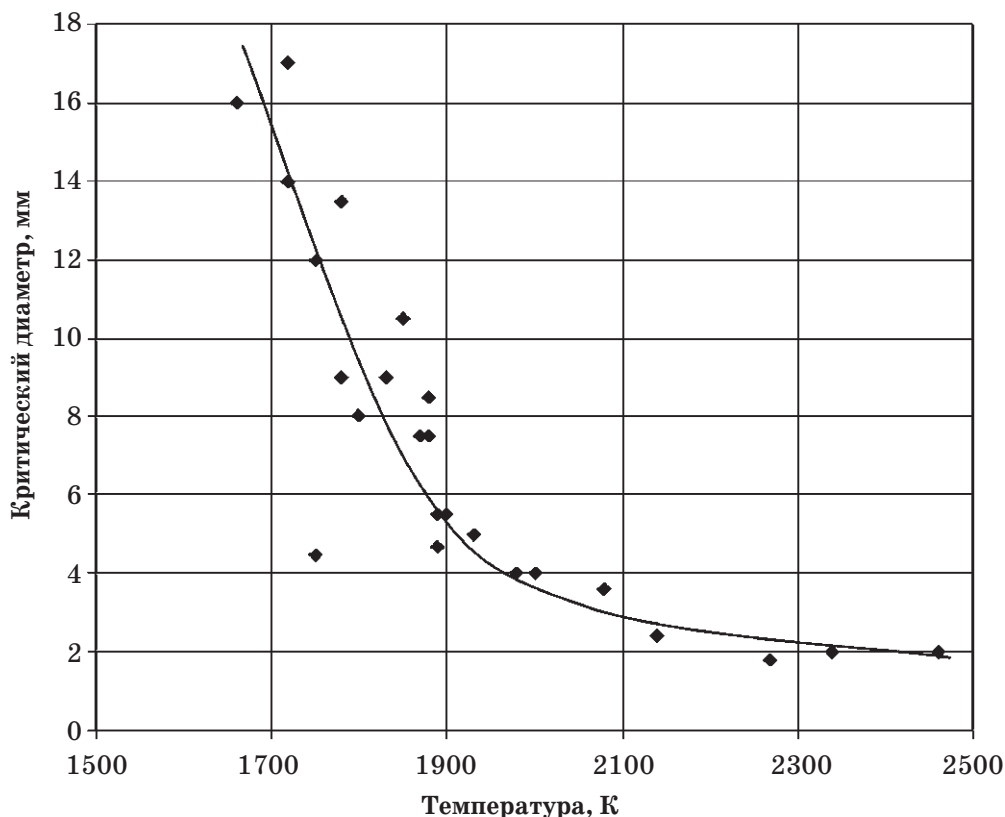


Рис. 1.5. Зависимость экспериментальных величин  $d_c$  нитратов спиртов и их растворов от температуры ударного сжатия

Следует отметить, что для более точной оценки критических диаметров детонации нитроэфиров и их растворов потребовалась корректировка полученной при нормальных условиях (термораспад) энергии активации. Возможно, это связано с выбранной схемой расчета температур ударного сжатия и предположением о пропорциональности величин критического диаметра и задержек адиабатического взрыва. Однако обращает на себя внимание тот факт, что возможно использование для различных по химическому строению нитроэфиров одного значения  $E$  в рамках выбранной схемы расчета.

Таблица 1.17

**Расчетные ( $d_c^{130}$ ,  $d_c^{154,6}$ ) и измеренные критические диаметры детонации ряда нитратов спиртов и их растворов**

Вещество	$M$	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$C_0$ , мм/ мкс	$D_1$ , мм/ мкс	Эксп. $d_c$ , мм	$T_1$ , К	$C_V$ , Дж/ К·г	Расчет	
								$d_c^{130}$ , мм	$d_c^{154,6}$ , мм
Глицеринтринитрат, НГЦ	227	1,60	1,71	7,65	2,0	2340	2,09	1,6	1,6
Этиленгликольдинитрат	152	1,48	1,57	7,40	1,8	2270	2,18	2,0	2,0
Диэтиленгликольдинитрат, ДЭ	196	1,38	1,64	6,80	16,0	1660	2,46	15,9	22,4
Триэтиленгликольдинитрат, ТЭ	240	1,32	1,64	6,40	—	1410	2,50	65,3	89,9
Пропиленгликольдинитрат, ПГ	166	1,38	1,52	6,95	5,5	1900	2,39	6,3	7,4
Метилнитрат	77	1,21	1,27	6,75	2,4	2140	2,43	3,3	3,5
Глицериндинитрат	182	1,51	1,70	7,40	3,6	2080	2,30	3,3	3,6
Хлоргидриндинитрат	200	1,54	1,61	6,70	4,7	1890	2,00	5,6	6,6
Глицидилнитрат	119	1,33	1,31	6,30	4,5	1750	2,40	11,7	15,2
Этилнитрат, ЭН	91	1,10	1,22	6,00	—	1570	2,67	29,5	32,5
ТЭН	316	1,77	2,42	8,28	5,0	1930	2,14	4,3	5,0
Нитроизобутилглицерин тринитрат	286	1,64	1,78	8,00	2,0	2460	2,09	1,2	1,2
ПГ/ДЭ 80/20		1,38	—	6,90	7,5	1870	2,42	7,1	8,4
ПГ/ДЭ 50/50		1,38	—	6,90	9,0	1780	2,44	9,7	12,4
ПГ/ТЭ 90/10		1,37	—	6,90	7,5	1880	2,45	6,9	8,2
ПГ/ТЭ 80/20		1,36	—	6,85	9,0	1830	2,48	8,3	10,2
ПГ/ТЭ 70/30		1,36	—	6,80	12,0	1750	2,50	11,3	14,8
ПГ/ТЭ 60/40		1,35	—	6,75	17,0	1720	2,60	13,3	17,8
ПГ/НГЦ 75/25		1,42	—	7,10	4,0	2000	2,30	4,4	4,8
НГЦ/ТЭ 70/30		1,50	—	7,25	4,0	1980	2,30	4,5	5,1
НГЦ/ТЭ 60/40		1,48	—	7,15	5,5	1890	2,35	6,2	7,3
НГЦ/ТЭ 50/50		1,44	—	7,00	8,0	1800	2,40	8,8	11,0
НГЦ/ТЭ 40/60		1,42	—	6,90	14,0	1720	2,46	12,3	16,4
ПГ/ЭН 75/25		1,30	—	6,70	8,5	1880	2,50	7,3	8,6
ПГ/ЭН 65/35		1,27	—	6,60	10,5	1850	2,53	8,2	10,0
ПГ/ЭН 50/50		1,22	—	6,50	13,5	1780	2,60	11,1	14,0

При сравнении рассчитанных и экспериментальных значений  $d_c$  следует иметь в виду, что неопределенность значений  $D_1$  ( $\Delta D_1 = 0,1$  мм/мкс) ведет к неопределенности  $T_1$  около 70 К, а неопределенность расчетных значений  $C_0$  ( $\Delta C_0 = 0,1$  мм/мкс) — к неопределенности  $T_1$  около 80 К. Указанные ошибки для скоростей  $D_1$  и  $C_0$  вполне возможны, а изменению  $T_1 \approx 2000$  К на 150 К отвечает изменение рассчитанного значения  $d_c$  в 1,5–1,7 раза.

Заметное различие рассчитанных и экспериментальных значений отмечено только для глицидилнитрата, что, по-видимому, вызвано изменением кинетики распада нитроэфира вследствие наличия в молекуле эпоксигруппы. Во всех остальных случаях расхождение экстраполяции не превосходило априорной погрешности расчета  $d_c$  и только в трех примерах из 23 превышало 20 %.

В табл. 1.17 приведены расчетные значения  $d_c$ , соответствующие энергиям активации 130 кДж/моль и 154,6 кДж/моль. В случае энергии активации 154,6 кДж/моль согласие хуже, чем при энергии активации 130 кДж/моль. Однако в целом подтверждается возможность использования при оценке  $d_c$  ЖВВ и их растворов констант, найденных в кинетических исследованиях при нормальных давлениях. В ряду жидких нитратов спиртов удается с той же точностью рассчитать критический диаметр детонации монокристаллического ТЭНа.

### 1.3.2. ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ЖВВ РАЗЛИЧНОГО ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ И ИХ РАСТВОРОВ

Нами проводились исследования критических диаметров детонации растворов нескольких ЖВВ в целях получения данных об отношении времен разложения соединений различного химического строения при температурах около 2000 К, которые, судя по проведенным расчетам, реализуются за ударными фронтами детонационных волн. Объектами исследования были выбраны растворы бис(фтординитроэтил)формалья  $\text{CH}_2(\text{OCH}_2\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F})_2$  (далее — ФЭФО), 1,6-диазидо-2-ацетоксигексана  $\text{N}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{OCOCH}_3)\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{N}_3$  (далее — диазид), нитрометана  $\text{CH}_3\text{NO}_2$  (НМ), изопропилнитрата  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{ONO}_2)\text{CH}_3$  (ИПН), глицеринтринитрата  $\text{CH}_2(\text{ONO}_2)\text{CH}(\text{ONO}_2)\text{CH}_2(\text{ONO}_2)$  (НГЦ) и пропиленгликольдинитрата  $\text{CH}_2(\text{ONO}_2)\text{CH}(\text{ONO}_2)\text{CH}_3$  (ПГДН). Чистота ФЭФО — 0,99, диазида — 0,988 по данным жидкостной хроматографии, нитрометана — 0,99 по данным газовой хроматографии.

Проверялась возможность оценки критических диаметров детонации растворов (смесей) указанных выше соединений, а также растворов ФЭФО в инертных растворителях: этаноле, дибутилфталате, ацетоне и циклогексанолу при использовании энергий активации мономолекулярного

распада, полученных по результатам исследований термического разложения полинитросоединений и нитратов спиртов в газовой фазе при существенно более низких температурах (400–500 К), чем температура вещества за ударными фронтами детонационной волны (~ 2000 К).

Экспериментальные результаты по измерению критических диаметров и скоростей детонации растворов приведены в табл. 1.18, где указаны плотности зарядов  $\rho_0$  и массовое содержание компонентов  $m_i$  в смеси. Для каждого раствора были рассчитаны зависимости *температура — давление на ударном фронте детонационной волны*.

В табл. 1.18 указаны значения температур ударного сжатия  $T_1$ , соответствующие экспериментальным значениям скоростей детонации растворов, и удельные теплоемкости растворов ( $C_v$ ) при этих температурах.

Прежде всего следует отметить, что близким значениям  $d_c$  бинарных растворов ФЭФО с нитрометаном, НГЦ с нитрометаном и ПГДН с нитрометаном, а также растворов ФЭФО с изопропилнитратом отвечают близкие рассчитанные значения  $T_1$ . Тем же величинам  $d_c$  для растворов ФЭФО с диазидом, а также этанолом, дибутилфталатом, ацетоном и циклогексанолом соответствуют несколько большие температуры  $T_1$ , которые для этой группы растворов хорошо согласуются между собой (рис. 1.6).

Таблица 1.18

**Экспериментальные критические диаметры ( $d_c$ ), скорости детонации ( $D$ ) и расчетные критические диаметры детонации ( $d_c^*$ ) растворов ЖВВ**

Растворы ЖВВ	$d_c$ , мм	$D$ , мм/мкс	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$T_1$ , К	$C_v$ , Дж/К·г	$d_c^*$ , мм	
ФЭФО/этанол							
100/0	4,0	7,50	1,60	2640	2,094	(4,0)	
97,5/2,5	4,5	7,36	1,56	2480	2,163	5,7	4,4
96,2/3,8	5,5	7,28	1,54	2420	2,199	7,0	5,4
94,8/5,2	7,0	7,21	1,52	2370	2,238	8,5	6,6
93,4/6,6	8,0	7,13	1,50	2320	2,277	9,4	8,1
92,0/8,0	11,0	7,06	1,48	2270	2,315	12,9	10,0
90,2/9,8	16,0	6,97	1,45	2210	2,365	16,9	13,0
89,0/11,0	19,0	6,91	1,44	2170	2,398	20,4	15,7
87,5/12,5	25,0	6,84	1,42	2070	2,42	32,5	(25,0)
87,2/12,8	28,0	6,82	1,41	2050	2,42	36,0	27,6



Продолжение табл. 1.18

Растворы ЖВВ	$d_c$ , мм	$D$ , мм/мкс	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$T_1$ , К	$C_v$ , Дж/К·г	$d_c^*$ , мм	
ФЭФО/дибутилфталат							
98,0/2,0	5,0	7,41	1,58	2450	2,127	6,0	
96,7/3,3	6,0	7,36	1,57	2440	2,149	6,4	
96,0/4,0	7,0	7,33	1,57	2410	2,160	7,1	
95,3/4,7	8,0	7,30	1,56	2390	2,172	7,7	
94,6/5,4	10,0	7,25	1,55	2340	2,183	9,2	
94,3/6,7	12,0	7,16	1,54	2280	2,205	11,6	
91,5/8,5	14,0	7,07	1,53	2200	2,234	16,3	
90,7/9,3	18,0	7,04	1,52	2180	2,247	17,9	
89,3/10,7	25,0	6,97	1,51	2120	2,271	23,8	
ФЭФО/ацетон							
98,24/1,76	5,0	7,41	1,57	2520	2,132	4,9	
97,20/2,80	6,0	7,36	1,56	2490	2,155	5,5	
96,67/3,33	7,0	7,33	1,55	2470	2,168	5,9	
95,33/4,67	8,0	7,27	1,53	2430	2,196	6,8	
ФЭФО/циклогексанол							
96,6/3,4	5,0	7,33	1,56	2390	2,185	7,7	
95,7/4,3	6,0	7,29	1,56	2350	2,207	8,9	
95,0/5,0	7,0	7,25	1,55	2320	2,225	10,0	
93,1/6,9	10,0	7,16	1,53	2220	2,276	15,2	
ФЭФО/диазид							
100/0	4,0	7,50	1,60	2640	2,094	4,0	3,5
89,9/10,1	6,0	7,26	1,55	2370	2,19	9,9	6,2
87,5/12,5	7,2	7,21	1,54	2330	2,21	11,6	7,2
84,2/15,8	10,0	7,14	1,52	2270	2,245	14,9	9,2
82,6/17,4	11,0	7,10	1,51	2230	2,26	17,6	10,9
80,9/19,1	13,0	7,06	1,50	2210	2,28	19,3	11,9
79,2/20,8	14,0	7,03	1,50	2190	2,29	21,2	13,0
77,5/22,5	16,0	6,99	1,49	2150	2,31	25,4	16,4
74,0/26,0	20,0	6,92	1,47	2100	2,34	32,5	(20,0)

Продолжение табл. 1.18

Растворы ЖВВ	$d_c$ , мм	$D$ , мм/мкс	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$T_1$ , К	$C_v$ , Дж/К·г	$d_c^*$ , мм	
69,5/30,5	25,0	6,83	1,45	2030	2,39	46,7	28,6
0/100		5,68	1,20	1300			
ФЭФО/нитрометан (НМ)							
89,6/10,4	5,0	7,34	1,54	2450	2,15	6,0	
82,4/17,6	5,5	7,24	1,49	2380	2,18	6,8	
70,5/29,5	6,5	7,08	1,43	2260	2,24	7,2	
66,0/34,0	7,5	7,02	1,41	2200	2,26	8,0	
56,4/43,6	8,0	6,91	1,36	2110	2,30	8,2	
33,0/67,0	11,0	6,66	1,26	1920	2,42	11,0	
16,1/83,9	15,0	6,51	1,20	1820	2,50	13,4	
0/100	18,0	6,37	1,14	1730	2,58	(18,0)	
ФЭФО/изопропилнитрат (ИПН)							
69,8/30,2	6,0	6,66	1,37	2000	2,27	8,0	
66,3/33,7	7,0	6,57	1,35	1950	2,29	9,0	
60,7/39,3	10,0	6,45	1,32	1870	2,32	11,0	
57,8/42,2	11,0	6,39	1,30	1860	2,34	11,0	
54,8/45,,2	14,0	6,32	1,28	1790	2,36	14,0	
51,8/48,2	17,0	6,26	1,27	1760	2,37	15,4	
48,6/51,4	20,,0	6,19	1,25	1700	2,39	20,0	
45,4/54,6	25,0	6,13	1,23	1670	2,41	22,4	
0/100		5,40	1,04	1280	2,68		
ФЭФО/пропиленгликольдинитрат (ПГДН)							
63,5/36,5	5,0	7,25	1,26	2440	2,68	5,2	
Нитроглицерин (НГЦ)/нитрометан							
100/0	2,0	7,65	1,60	2350	2,09	1,8	
58,4/41,6	4,5	7,01	1,37	2020	2,30	5,0	
50,4/49,6	6,0	6,91	1,33	1980	2,33	5,8	
37,6/62,4	7,5	6,75	1,28	1890	2,40	8,4	
26,0/74,0	10,0	6,63	1,23	1860	2,41	9,4	
16,0/84,0	14,0	6,50	1,19	1800	2,50	12,5	

Окончание табл. 1.18

Растворы ЖВВ	$d_c$ , мм	$D$ , мм/мкс	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$T_1$ , К	$C_v$ , Дж/К·г	$d_c^*$ , мм	
6,9/93,1	16,0	6,43	1,16	1760	2,55	15,5	
0/100	18,0	6,37	1,14	1730	2,58	(18,0)	
ПГДН/нитрометан							
100/0	5,5	6,95	1,38	2080	2,39	(5,5)	
82,9/17,1	7,5	6,83	1,33	2020	2,42	7,0	
54,8/45,2	11,0	6,66	1,26	1900	2,48	9,6	
23,2/76,8	14,0	6,49	1,19	1790	2,53	13,5	
0/100	18,0	6,37	1,14	1730	2,58	(18,0)	

*Примечание.* Указанные в скобках значения ( $d_c^*$ ) взяты за исходные при проведении расчетов.

Это указывает на то, что ведущей стадией протекания реакции за фронтом волны при уменьшении содержания ФЭФО в растворах с нитрометаном и изопропилнитратом становится разложение нитрометана и изопропилнитрата. Разложение ФЭФО является определяющим только при его малом разбавлении. С уменьшением температуры за фронтом волны происходит как бы смена ведущей реакции превращения в целом. Для растворов ФЭФО с невзрывчатыми разбавителями и диазидом ведущая стадия реакции связана с разложением ФЭФО.

Разложение нитрометана при высоких давлениях, как указывалось выше, происходит, по-видимому, в аци-форме с макрокинетикой, близкой к макрокинетике разложения нитратов спиртов. В жидких нитратах спиртов и нитрометане при инициировании их с близкими задержками адиабатического взрыва менее микросекунды рассчитанные температуры за ударным фронтом (около 1000 К) в пределах погрешности расчета из-за неопределенности исходных данных не различаются, а критические диаметры детонации нитрометана ( $\rho = 1,14$  г/см<sup>3</sup>,  $D = 6,3$  мм/мкс) и раствора пропиленгликольдинитрата с этилнитратом с тем же элементарным составом ( $\rho = 1,17$  г/см<sup>3</sup>,  $D = 6,3$  мм/мкс) совпадают. При стационарном режиме детонации рассчитанные температуры  $T_1$  за ударными фронтами детонационной волны в нитрометане и растворе нитратов (~1700 К) также совпадают.

Любой известный вариант количественного пересчета величин  $d_c$  на времена превращения в волне имеет недостатки, но нет сомнений в том, что времена превращения за фронтом детонационной волны ЖВВ с одинаковым элементарным составом при мало отличающихся начальных

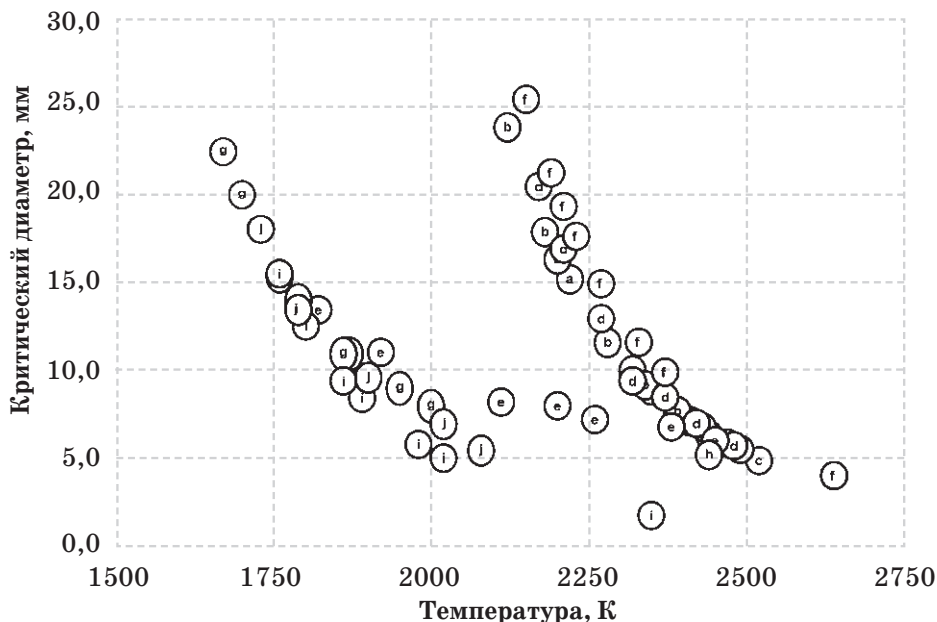


Рис. 1.6. Зависимость  $d_c$  от  $T_1$ : правая группа точек — растворы ФЭФО с циклогексанолам, дибутилфталатом, ацетоном, этанолом, диазидом; левая группа точек — растворы ФЭФО с НМ, ИПН и растворы НМ с НГЦ, ПГДН

плотностях и скоростях детонации близки. Следовательно, времена превращений нитрометана и нитратов спиртов при температурах 1000–1700 К практически равны, что позволяет предполагать близкую макрокинетику их разложения.

Известно, что кинетические величины термического разложения тринитроалканов для газовой и жидкой фаз близки и слабо зависят от химического строения алкильного радикала. В ряду  $(\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_n \text{C}(\text{NO}_2)_3$  при  $n = 0, 1, 2$  энергии активации  $E$  и логарифмы предэкспоненты  $Z$  равны соответственно 43,2; 42,3; 43,6 ккал/моль и 17,18; 16,86 и 17,17. Замена одной группы  $\text{NO}_2$  на F приводит к увеличению энергии активации соединения на 4–6 ккал/моль, и, например, для  $\text{CH}_3\text{CF}(\text{NO}_2)_2$  имеем  $E = 47,7$  ккал/моль и  $Z = 17,0$ . Экстраполируя сказанное на ФЭФО, следует ожидать энергию активации  $E$  около 48 ккал/моль при логарифме предэкспоненты  $Z = 17$ .

В табл. 1.18 и на рис. 1.7 (точки около кривых) экспериментальные значения критических диаметров детонации  $d_c$  растворов ФЭФО с этанолом, дибутилфталатом, ацетоном и циклогексанолам сравниваются со значениями  $d_c^*$ , рассчитанными в соответствии с выражением (1.28).

Удастся в первом приближении правильно отразить изменения критических диаметров детонации при разбавлении дибутилфталатом,

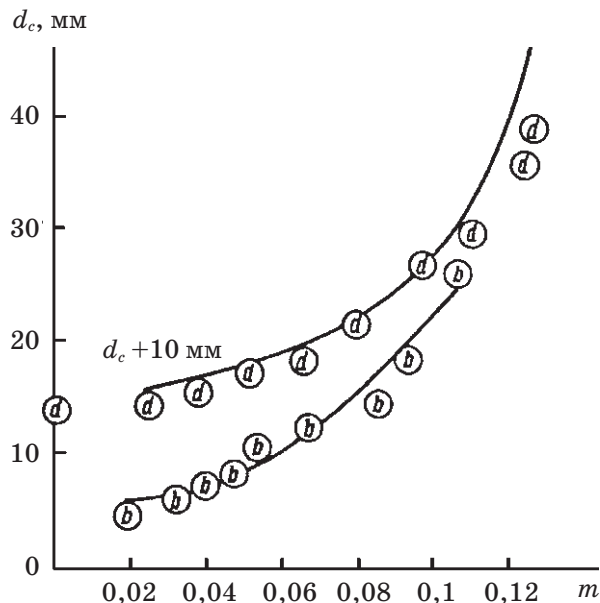


Рис. 1.7. Зависимость критических диаметров детонации растворов ФЭФО от содержания в них этанола ( $d$ ) и дибутилфталата ( $b$ )

ацетоном и при не слишком малых долях этанолом. Хуже предсказываются изменения критических диаметров при малом разбавлении ФЭФО циклогексанолом и этанолом.

На рис. 1.8 с использованием экспериментальных данных и результатов расчета температур за ударным фронтом  $T$  построены графики зависимостей:

$$Y = \ln \frac{d_c D T_1^2 C_{v1}}{d_{c1} D_1 T^2 C_v} = \frac{E}{RT_1} \left( \frac{T_1}{T} - 1 \right), \quad (1.29)$$

где индексом «1» отмечены величины для исходного соединения.

Вблизи точек, относящихся к разным разбавителям, проведены для ориентировки прямые с наклоном, соответствующим энергии активации 48 ккал/моль, полученной по данным о термическом распаде полинитросоединений при существенно меньших температурах в газовой и жидкой фазах. Обращает на себя внимание возможность описания критических диаметров детонации растворов ФЭФО со всеми растворителями при одной величине энергии активации с несколько меняющейся для каждого растворителя температурой за ударным фронтом детонационной волны, например, из-за каталитического действия разбавителей при малых концентрациях последних.

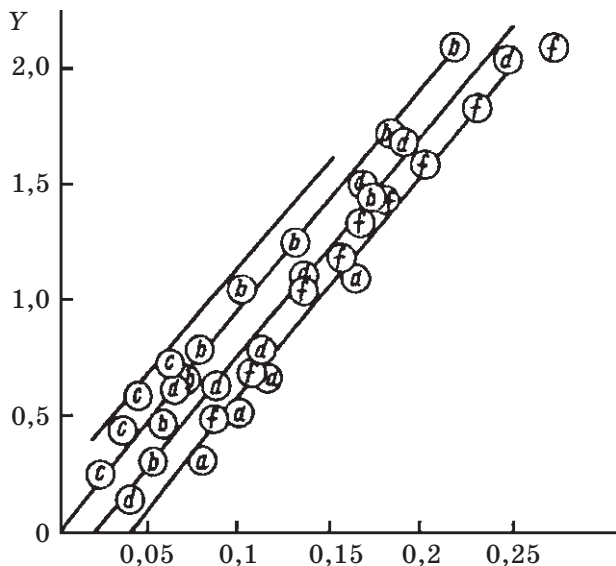


Рис. 1.8. Зависимость  $Y$  от  $[(T_1/T) - 1]$  для растворов ФЭФО с инертными растворителями ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ ) и диазидом ( $f$ )

Так, известно каталитическое влияние аминов и соединений с двойными связями на критические диаметры нитрометана и нитратов. Не исключая вероятности экспериментальных ошибок, можно допустить, что при разбавлении ФЭФО малыми количествами инертных жидкостей возможно образование молекулярных комплексов, которые могут оказывать влияние на процесс разложения. Нами, например, было выявлено снижение критических диаметров детонации ФЭФО, нитрометана и ПГДН при разбавлении их диметилсульфоксидом (ДМСО) (рис. 1.9).

Таким образом, возможность катализа процессов разложения ФЭФО невзрывчатыми растворителями кажется вполне вероятной. По-видимому, молекулярные комплексы разлагаются с большей скоростью, чем ФЭФО. Их разложение в независимой от мономолекулярного распада ФЭФО более быстрой реакции увеличивает температуру  $T$  на небольшую величину за сравнительно малые времена, а основное превращение как бы начинается при большей, чем предполагалось в расчете, начальной температуре.

В связи с рассчитанными значениями температур вещества за ударными фронтами следует обратить внимание на то, что известные экспериментальные ударные адиабаты жидкостей, выбранных в качестве разбавителей, имеют четко выраженные особенности, указывающие на химические превращения исходных соединений за фронтом волны с изменением удельного объема.

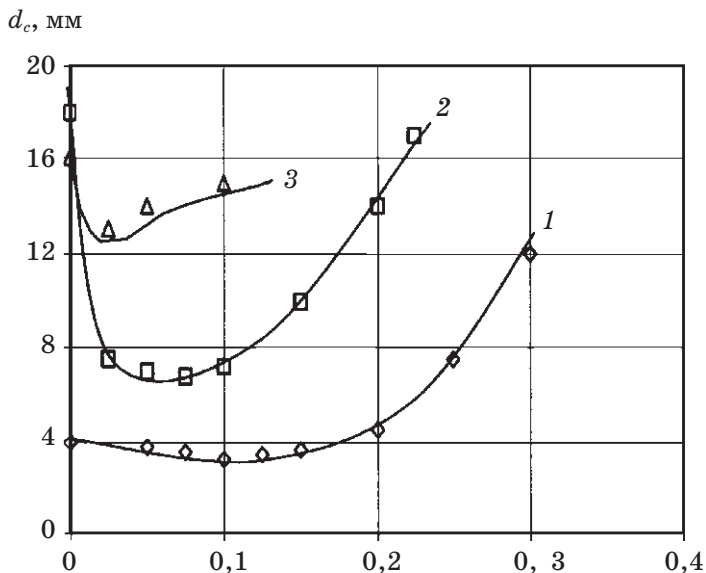


Рис. 1.9. Зависимость опытных величин  $d_c$  от объемной доли растворителя ДМСО:  
1 — ФЭФО; 2 — нитрометан; 3 — ПГДН

Так, деструкция ацетона за фронтом волны проявляется в ходе ударной адиабаты при массовых скоростях более 2,5 мм/мкс, чему соответствуют разогревы исходного соединения до 1100 К. Дибутилфталат, как ароматическое соединение, разлагается при температурах выше 1300 К. Возможно, что этанол, судя по виду ударной адиабаты, и аналогично циклогексанол претерпевают превращения за фронтом волны при температурах выше 1600 К.

Макрокинетика деструкции жидких ацетона, дибутилфталата и спиртов за фронтами ударных волн не исследовалась, но существенно, что рассчитанная температура за ударными фронтами детонационной волны в растворах ФЭФО выше температур, приводящих к деструкции использованных разбавителей за ударными фронтами. Особенно это относится к ударно-волновому сжатию ацетона и дибутилфталата, что могло найти отражение в макрокинетике превращения за фронтом ударной волны в растворах ФЭФО в целом. Иными словами, заранее нельзя исключить, что превращение за ударным фронтом детонационной волны в некоторых растворах может протекать с большей скоростью, чем ожидалось при мономолекулярном распаде ФЭФО как ведущей стадии. По приведенным выше данным об изменении критических диаметров детонации растворов ФЭФО с инертными разбавителями нельзя проследить заметный вклад разложения ацетона и дибутилфталата во времена превращения за фронтом детонационной волны в целом.

При проведении оценок задержек адиабатического взрыва раствора двух взрывчатых компонентов с различающейся, но независимой кинетикой разложения, вообще говоря, следовало решать систему дифференциальных уравнений типа

$$\frac{d \ln m_2}{dt} = Z_2 \exp \left( \frac{E_2}{RT} \right),$$

$$\frac{d \ln m_1}{dt} = Z_1 \exp \left( \frac{E_1}{RT} \right),$$

$$Q_1 dm_1 + Q_2 dm_2 = c_v dT,$$

где  $m_1, m_2$  — массовые доли компонентов;  $Q_1, Q_2$  — удельные теплоты превращения компонентов;  $c_v$  — теплоемкость раствора в целом, которая может меняться со степенью превращения вещества за фронтом волны;  $E_1, E_2$  — энергии активации разложения компонентов;  $Z_1, Z_2$  — соответствующие предэкспоненты.

Однако целесообразность решения такой системы определяется достоверностью используемых величин, оно оправдано только при близких временах разложения отдельных компонентов.

При анализе пределов ударно-волнового инициирования и распространения детонации жидких взрывчатых веществ кинетические параметры, найденные для газовой фазы при 400–450 К, экстраполируются до 1000–2000 К. Это порождает известную неопределенность в описании разложения каждого из компонентов раствора двух взрывчатых веществ. Для уменьшения ее в расчетах для растворов ФЭФО с нитрометаном и изопропилнитратом, а также для растворов нитратов спиртов с нитрометаном была проведена нормировка величин предэкспонентов для ФЭФО и других компонентов. Для ФЭФО энергия активации была взята равной 48 ккал/моль, для нитрометана — 38 ккал/моль и для нитратов спиртов — 38–40 ккал/моль. Предполагалось, что равным критическим диаметрам детонации при близких скоростях детонации соответствуют равные задержки адиабатического взрыва.

Поскольку при температурах выше 2000 К для растворов рассматриваемых взрывчатых веществ превращение за фронтом волны протекает в форме вырожденного адиабатического взрыва, за характерные времена превращения растворов двух взрывчатых веществ за ударным фронтом волны выбраны те, за которые производная температуры по времени возрастает в  $e$  раз. За эти времена температура увеличивается от значения непосредственно за фронтом волны на 200–400 К. Величина



критического диаметра детонации принималась пропорциональной произведению скорости детонации на характерное время превращения за ударным фронтом.

Результаты расчетов критических диаметров детонации  $d_c^*$  представлены в табл. 1.18 и на рис. 1.10 (сплошными линиями).

Имеется неплохое согласие с экспериментальными значениями (точки около кривых), что является доводом в пользу выбранного подхода и целесообразности использования его в практических расчетах. При содержании ведущего разложение компонента выше одной трети (например, нитрометана или нитратов спиртов в растворах с ФЭФО) приемлемая точность расчета достигается в пренебрежении на начальной стадии разложением второго компонента.

Следует отметить, что к увеличению скорости превращения в  $e$  раз при использовании аррениусовской зависимости ведет увеличение температуры  $\Delta T \approx RT^2/E$ . Если это происходит из-за разложения исходного соединения, то  $dT = dmQ/c_v = RT^2/E$  при степени превращения  $dm = c_v RT^2/(QE)$ . Для начальной температуры 2000 К,  $c_v = 0,5$  кал/г·К,  $Q = 1$  ккал/г и  $E = 40$  ккал/моль увеличение скорости превращения в  $e$  раз происходит при разложении 5 % исходного соединения и увеличении температуры на 100 К.

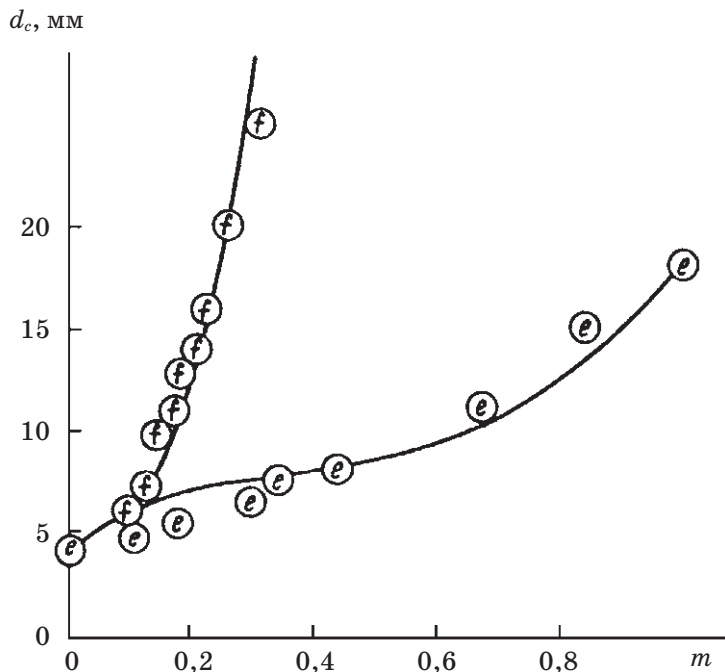


Рис. 1.10. Зависимость критических диаметров детонации растворов ФЭФО от содержания в них диазида (f) и нитрометана (e)

Выбранный критерий оказался более удобным при проведении оценок для растворов двух взрывчатых веществ, чем отслеживание степени превращения.

То, что ведущей стадией превращения за ударным фронтом детонационной волны в растворах ФЭФО с диазидом является разложение ФЭФО, согласуется с данными о кинетике разложения компонентов в газовой фазе. При температурах около 2000 К рассчитанные величины задержек адиабатического взрыва ФЭФО при использовании кинетических параметров, найденных для газовой фазы ( $E = 48$  ккал/моль,  $Z = 10^{17} \text{с}^{-1}$ ), почти на 2 порядка меньше рассчитанных величин задержек взрыва диазида ( $E = 40$  ккал/моль,  $Z = 10^{14} \text{с}^{-1}$ ). Несколько неожиданно более быстрое разложение в детонационной волне растворов с ФЭФО нитратов спиртов и нитрометана, поскольку рассчитанные при тех же температурах величины задержки адиабатического взрыва ФЭФО на 1–2 порядка меньше величин задержек взрыва нитратов спиртов ( $E = 38\text{--}40$  ккал/моль,  $Z = 10^{14}\text{--}10^{15} \text{с}^{-1}$ ).

Чтобы избежать такого соотношения рассчитанных задержек адиабатического взрыва отдельных компонентов раствора, необходимо изменить при переходе к столь высоким температурам и давлениям величины  $Z$  и  $E$  хотя бы для некоторых из компонентов. Поскольку найденные для газовой фазы значения энергий активации мономолекулярного разложения рассматриваемых взрывчатых веществ (ФЭФО, нитратов спиртов и нитрометана) вполне соответствуют наблюдаемым изменениям критических диаметров детонации при разбавлении их невзрывчатыми компонентами, то более вероятным представляется уменьшение величины  $Z$ . Для ФЭФО оно будет на 1–2 порядка большим, чем для нитратов спиртов. Возможно также уменьшение величины  $E$  для нитратов спиртов, как было показано выше, до величины около 31 ккал/моль ( $130 \pm 10$  кДж/моль).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ ПО РАЗДЕЛУ 1.3

Таким образом, на примере растворов нитратов спиртов и растворов ФЭФО показана допустимость использования в прогнозах критических диаметров детонации энергий активации термического распада, найденных при существенно меньших температурах в газовой фазе. Можно надеяться, что развитый подход к оценкам критических диаметров детонации будет полезен при исследовании макрокинетики превращения других соединений за фронтом детонационной волны. Показана также возможность выявления компонента, ведущего разложение за фронтом детонационной волны, в растворах двух взрывчатых веществ и сравнения на основании этого относительных времен разложения компонентов при температурах за ударным фронтом волны.

## 1.4. КРИТИЧЕСКИЕ ДИАМЕТРЫ И СКОРОСТЬ ДЕТОНАЦИИ РАСТВОРОВ ЖВВ В ИНЕРТНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

В данном разделе кратко изложены результаты исследований, проведенных И. В. Васильевой, С. А. Душенком и А. А. Котоминым [84].

Анализ литературных данных по методам расчета критического диаметра детонации растворов жидких ВВ (ЖВВ) в инертных органических растворителях свидетельствует о серьезных проблемах в точной оценке величины критического диаметра таких систем. Подход, изложенный в разделе 1.3, требует достаточно сложных расчетов и знания кинетических параметров разложения ВВ. Поэтому была предпринята попытка создания эмпирического метода расчета, позволяющего достаточно просто рассчитывать критический диаметр и скорость детонации растворов ЖВВ, содержащих практически любые инертные органические растворители, не оказывающие каталитического влияния на процессы разложения ВВ в детонационных волнах.

### 1.4.1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МЕТОД РАСЧЕТА КРИТИЧЕСКИХ ДИАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ РАСТВОРОВ ЖВВ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

Для изучения влияния степени разбавления ЖВВ и свойств органической добавки на детонационную способность растворов было выбрано жидкое взрывчатое вещество ФЭФО — бис(2-фтор-2,2-динитроэтил)формаль и ряд растворителей различного химического строения, существенно различающихся по физическим характеристикам и химическим свойствам: бромформ, четыреххлористый углерод, хлороформ, йодистый пропилен, этиловый спирт, дибутилфталат, циклогексанол, ацетон, бромистый этилен.

На рис. 1.11 показано влияние степени разбавления ФЭФО различными растворителями на его критический диаметр детонации.

Следует отметить, что все полученные кривые исходят из одной точки, соответствующей критическому диаметру детонации чистого ФЭФО ( $4 \pm 0,2$  мм), и имеют общий характер для различных растворителей.

Результаты экспериментов по определению критического диаметра растворов ЖВВ показывают, что введение всех исследованных органических растворителей в ФЭФО увеличивает критический диаметр последнего. Однако влияние различных по природе растворителей не одинаково.

Полученные графические зависимости могут быть аппроксимированы предложенным уравнением:

$$d_k = \frac{d_{k0}}{V_{\text{ВВ}}^n}, \quad (1.30)$$

где  $d_k$  — критический диаметр детонации раствора ВВ;  $d_{k0}$  — критический диаметр индивидуального (чистого) ВВ;  $V_{\text{ВВ}}$  — объемная доля ВВ;  $n$  — параметр, зависящий от свойств растворителя.

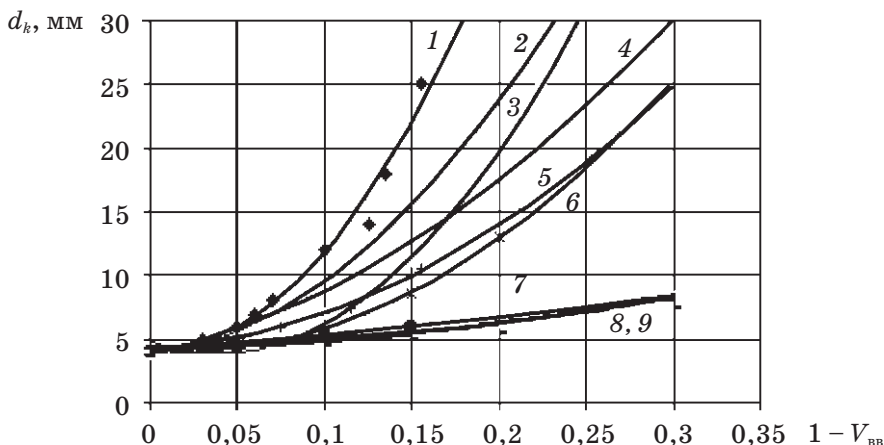


Рис. 1.11. Зависимость критических диаметров детонации растворов ФЭФО от объемной доли и вида растворителя:

1 — дифенилфталат; 2 — ацетон; 3 — циклогексанол; 4 — этиловый спирт; 5 — йодистый пропилен; 6 — бромформ; 7 — хлороформ; 8 — тетрахлористый углерод; 9 — бромистый этилен

Из свойств растворителей, влияющих на состояние растворов ВВ за ударным фронтом, были выбраны: акустическая жесткость (произведение плотности растворителя  $\rho_d$  и объемной скорости звука в нем  $C_0$ ), связанная с ударной сжимаемостью, и теплоемкость  $C_d$ , учитывающая прогрев инертного растворителя в детонационной волне.

Графическая обработка полученных экспериментальных данных в логарифмических координатах по уравнению (1.30) представлена на рис. 1.12. Зависимость параметра  $n$  уравнения (1.30) для растворов ФЭФО от характеристик растворителей приведена в табл. 1.19 и на рис. 1.13.

В результате математической обработки полученных данных было показано, что зависимость параметра  $n$  для растворов ФЭФО от характеристик растворителей описывается уравнением

$$n = A_1 - 1,05\rho_d \frac{C_0}{C_d}, \quad (1.31)$$

где  $\rho_d$  — плотность растворителя, г/см<sup>3</sup>;  $C_0$  — объемная скорость звука в растворителе, м/с;  $C_d$  — теплоемкость растворителя, Дж/моль·К;  $A_1$  — коэффициент, для ФЭФО равный 15,24.

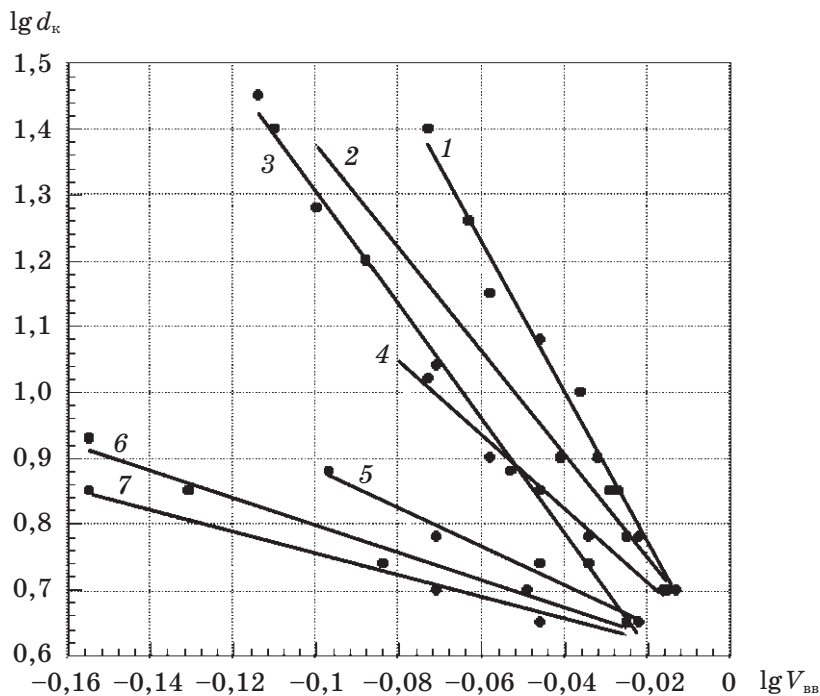


Рис. 1.12. Влияние степени разбавления и химической природы растворителя на критический диаметр ФЭФО:

1 — дибутилфталат; 2 — ацетон; 3 — этиловый спирт; 4 — этилен бромистый; 5 — бромформ; 6 — хлороформ; 7 — четыреххлористый углерод

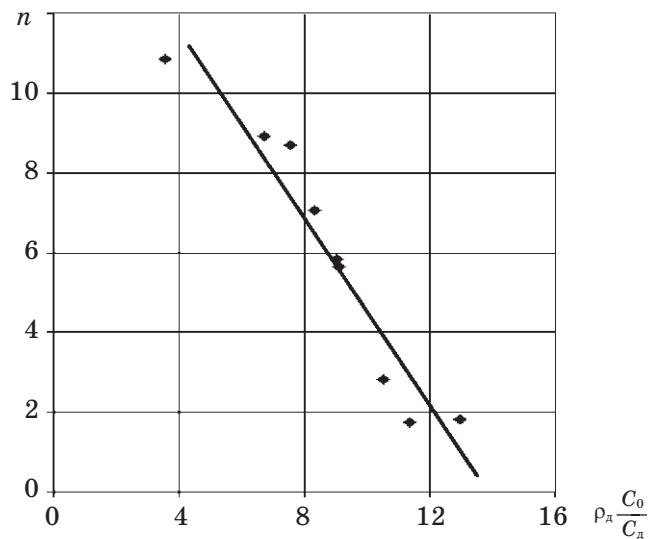


Рис. 1.13. Зависимость параметра  $n$  уравнения (1.30) от физических характеристик инертных растворителей

Таблица 1.19

**Характеристики некоторых органических растворителей  
и значения параметра  $n$  для соответствующих растворов ФЭФО**

Растворитель	$\rho_d$ , г/см <sup>3</sup>	$C_0$ , м/с	$C_d$ , Дж/моль·К	$n_{\text{эксп.}}$
Дибутилфталат	1,047	1366*	399,5	10,83
Циклогексанол	0,962	1493*	214,7	8,93
Ацетон	0,792	1192	124,7	8,69
Этиловый спирт	0,789	1180	111,5	7,06
Четыреххлористый углерод	1,595	938	131,8	1,75
Хлороформ	1,498	1005	116,3	1,83
Йодистый пропилен	1,743	929*	179,7	5,84
Бромистый этилен	2,179	1058*	253,3	5,65
Бромформ	2,890	928	225,4	2,83

\* Скорость звука определялась экспериментально.

Влияние химической природы ВВ на параметр  $n$  изучалось на ряде ЖВВ различных классов: из фторнитросоединений — ФЭФО; из нитросоединений — нитрометан (НМ); из нитратов спиртов — нитроглицерин (НГЦ) и этиленгликольдинитрат (ДНЭГ); из соединений, содержащих нитро- и нитратные группы — нитроизобутилглицеринтринитрат (НИБГТН); из азидосоединений — формальдиазидоглицерин (ФДАГ).

В качестве растворителя был выбран бромистый этилен (ЭБ). Для этих систем, а также растворов нитрометан — хлороформ, были определены концентрационные зависимости критического диаметра детонации, представленные на рис. 1.14.

Результаты математической обработки полученных экспериментальных данных по уравнению (1.30) см. на рис. 1.15 и в табл. 1.20.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что параметр  $n$  слабо зависит от химической природы ВВ, и для практических расчетов значение коэффициента  $A_1$  уравнения (1.31) можно принять постоянным, усреднив его по данным табл. 1.20:  $A_1 = 14,10$ .

В результате уравнение (1.31) принимает следующий вид:

$$n = 14,10 - 1,05\rho_d \frac{C_0}{C_d}. \quad (1.32)$$

Таким образом, зная критический диаметр ЖВВ и свойства растворителя (теплоемкость, плотность и скорость звука), можно вычислить критический диаметр детонации раствора ВВ заданной концентрации.

При отсутствии экспериментальных (справочных) данных по теплоте и скорости звука в растворителе они могут быть рассчитаны по известным методам.

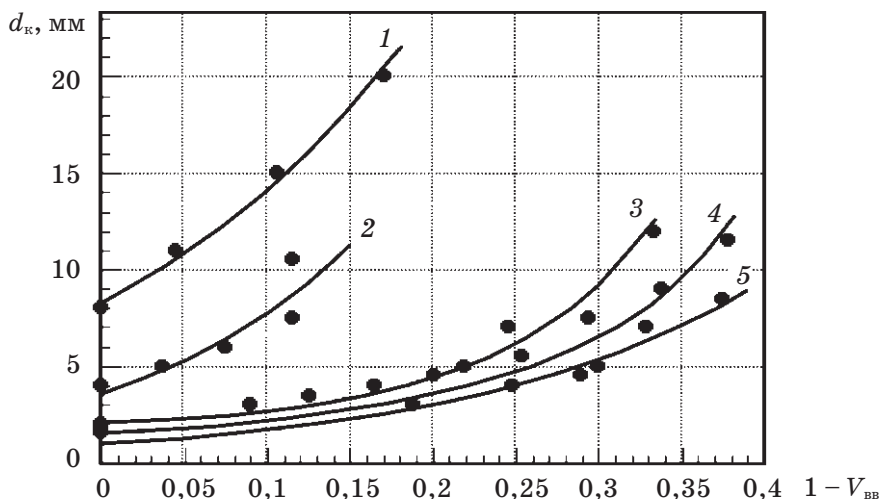


Рис. 1.14. Влияние степени разбавления различных ЖВВ бромистым этиленом на их детонационную способность:

1 — ФДАГ; 2 — ФЭФО; 3 — НИБГТН; 4 — ДНЭГ; 5 — НГЦ

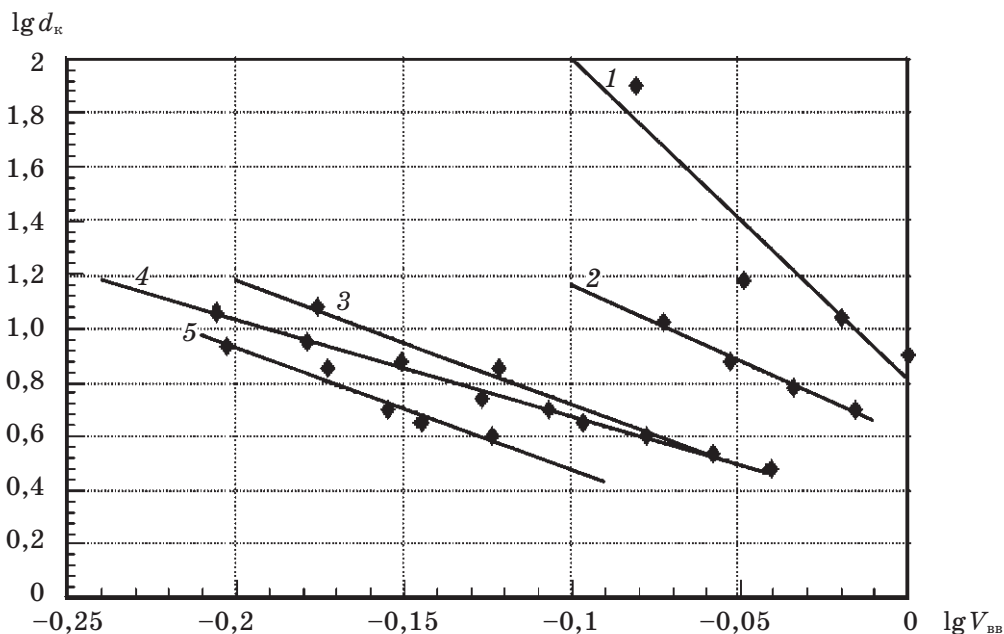


Рис. 1.15. Логарифмическая зависимость критического диаметра детонации ряда растворов ЖВВ с бромистым этиленом от объемной доли ВВ:

1 — ФДАГ; 2 — ФЭФО; 3 — НИБГТН; 4 — ДНЭГ; 5 — НГЦ

Т а б л и ц а 1.20

**Значения коэффициента  $A_1$  уравнения (1.31)  
для ряда растворов различных ЖВВ**

ЖВВ	Растворитель	$A_1$
ФЭФО	ЭБ	15,24
НГЦ	ЭБ	13,18
ДНЭГ	ЭБ	13,16
НИБГТН	ЭБ	14,12
ФДАГ	ЭБ	13,98
НМ	Хлороформ	14,84

Проведенные исследования позволили предложить эмпирический метод расчета критического диаметра детонации растворов ЖВВ в инертных органических растворителях.

#### Схема расчета

Критический диаметр детонации растворов ЖВВ ( $d_k$ ) рассчитывается по формуле:

$$d_k = \frac{d_{k0}}{V_{ВВ}^n} \text{ (мм)}$$

Объемная доля ВВ в растворе

$$V_{ВВ} = \alpha \frac{\rho_{р-ра}}{\rho_{ВВ}},$$

где  $d_{k0}$  — критический диаметр индивидуального ЖВВ, мм;  $\alpha$  — массовая доля ВВ в растворе;  $\rho_{р-ра}$  — плотность раствора, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{ВВ}$  — плотность жидкого ВВ, г/см<sup>3</sup>;  $n$  — параметр, определяемый характеристиками растворителя:

$$n = 14,10 - 1,05\rho_d \frac{C_0}{C_d},$$

где  $\rho_d$ ,  $C_d$ ,  $C_0$  — плотность (г/см<sup>3</sup>); теплоемкость (Дж/моль·К) растворителя (добавки) и объемная скорость звука (м/с) в нем.

В табл. 1.21 сопоставлены опытные [84, 85, 86] и расчетные значения критических диаметров детонации ряда растворов ЖВВ, подтверждающие корректность предложенного метода расчета.



Т а б л и ц а 1.21

**Опытные и расчетные значения критического диаметра детонации ряда растворов ЖВВ в инертных органических растворителях**

Состав, % об.	$d_{к0}$ ЖВВ, мм	$d_k$ раствора, мм	
		Опыт	Расчет
Нитрогликоль/этилен бромистый	1,8		
87,5/12,5		3,5	3,3
80/20		4,5	5,0
74,7/25,3		5,5	6,7
70,6/29,4		7,5	8,7
ФЭФО/бромформ	4,0		
95/5		4,5	4,3
90/10		5,5	4,7
85/15		6,0	5,2
ФЭФО/этилен бромистый	4,0		
96,3/3,7		5,0	4,7
92,5/7,5		6,0	5,7
88,5/11,5		7,5	7,0
84,5/15,5		10,5	8,6
ФЭФО/четырёххлористый углерод	4,0		
95/5		4,5	4,4
90/10		4,5	5,0
85/15		5,0	5,7
ФЭФО/хлороформ	4,0		
94,5/5,5		4,5	4,1
89,4/10,6		5,0	4,2
ФЭФО/йодистый пропилен	4,0		
95/5		4,5	5,0
85/15		8,5	8,5
80/20		13,0	11,3
Нитрометан/хлороформ	18,0		
96/4		19,0	18,4
86/14		22,0	19,4
76,5/23,5		25,0	21,0

Продолжение табл. 1.21

Состав, % об.	$d_{\kappa_0}$ ЖВВ, мм	$d_{\kappa}$ раствора, мм	
		Опыт	Расчет
Нитроизобутилглицерин- тринитрат/ этилен бромистый	2,0		
91/9		3,0	3,1
83,5/16,5		4,0	4,5
78,1/21,9		5,0	6,0
75,5/24,5		7,0	7,2
66,7/33,3		12,0	12,6
ФЭФО/этиловый спирт	4,0		
95/5		4,5	5,2
92,5/7,5		5,5	6,1
90/10		7,0	7,0
87,5/12,5		8,0	8,1
85,0/15,0		11,0	9,5
ФЭФО/дибутилфталат	4,0		
97/3		5,0	5,5
95/5		6,0	6,8
94/6		7,0	7,6
93/7		8,0	8,5
92/8		10,0	9,5
ФЭФО/циклогексанол	4,0		
94,5/5,5		5,0	6,0
93/7		6,0	6,7
92/8		7,0	7,2
89/11		10,0	9,1
ФЭФО/ацетон	4,0		
96,5/3,5		5,0	5,0
94,5/5,5		6,0	5,7
93,5/6,5		7,0	6,0
91/9		8,0	7,1
Нитрогликоль/метиловый спирт [85, 86]	2,5		
82,6/17,4		3,4	4,2

Окончание табл. 1.21

Состав, % об.	$d_{к0}$ ЖВВ, мм	$d_{к}$ раствора, мм	
		Опыт	Расчет
74,9/25,1		4,5	5,4
67,9/32,1		8,5	7,0
Нитрогликоль/хлороформ [85]	2,5		
85/15		2,5	2,7
70/30		2,6	3,0
60/40		3,3	3,2
Нитрогликоль/бромформ [85]	2,5		
91,6/8,4		2,5	2,9
Нитрометан/четыреххлористый углерод [86]	20		
92,7/7,3		23,0	23,6
78,4/21,6		34,5	34,0
Нитрометан/бромформ [86]	20		
85,7/14,3		24,0	25,6
Нитроглицерин/хлороформ [86]	2,7		
68,6/31,4		2,7	3,3
48,4/51,6		4,3	3,9

### Пример расчета критических диаметров детонации растворов ЖВВ

Рассчитать критический диаметр детонации 90 %-го и 72 %-го (по массе) растворов нитрометана в четыреххлористом углероде. Критический диаметр чистого нитрометана 20 мм [86].

Критический диаметр детонации раствора ЖВВ в органическом растворителе:

$$d_{к} = \frac{d_{к0}}{V_{ВВ}^n}, \quad d_{к0} = 20 \text{ мм.}$$

$$\text{Объемная доля ЖВВ: } V_{ВВ} = \alpha \frac{\rho_{р-ра}}{\rho_{ВВ}}.$$

Плотность раствора:

$$\rho_{р-ра} = \frac{1}{\sum \frac{\alpha_i}{\rho_i}}; \quad \alpha_1 = 0,90; \quad \alpha_2 = 0,72.$$

$$\text{Для 90 \% мас. раствора: } \rho_{\text{р-ра}} = \frac{1}{\frac{0,90}{1,144} + \frac{0,10}{1,595}} = 1,177 \text{ г/см}^3;$$

$$V_{\text{ВВ}} = \frac{0,90 \cdot 1,177}{1,144} = 0,926.$$

$$\text{Для 72 \% мас. раствора: } \rho_{\text{р-ра}} = \frac{1}{\frac{0,72}{1,144} + \frac{0,28}{1,595}} = 1,242 \text{ г/см}^3;$$

$$V_{\text{ВВ}} = \frac{0,72 \cdot 1,242}{1,144} = 0,782$$

(плотность нитрометана 1,144 г/см<sup>3</sup>; плотность четыреххлористого углерода 1,595 г/см<sup>3</sup>).

Для раствора ЖВВ в четыреххлористом углероде:

$$n = 14,10 - 1,05\rho_{\text{д}} \frac{C_0}{C_{\text{д}}}$$

(для четыреххлористого углерода  $C_0 = 938$  м/с,  $C_{\text{д}} = 131,75$  Дж/моль·К);

$$n = 14,10 - 1,05 \frac{1,595 \cdot 938}{131,75} = 2,18$$

$$\text{Для 90 \% мас. раствора } d_{\text{к}} = \frac{20}{0,926^{2,18}} = 23,6 \text{ мм.}$$

Экспериментальное значение 23,0 мм [86].

$$\text{Для 72 \% мас. раствора } d_{\text{к}} \frac{20}{0,782^{2,18}} = 34,2 \text{ мм.}$$

Экспериментальное значение 34,5 мм [86].

#### 1.4.2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МЕТОД РАСЧЕТА СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИИ РАСТВОРОВ ЖВВ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

Для растворов ЖВВ в инертных растворителях кроме критического диаметра детонации, важнейшей характеристикой является скорость детонации, знание которой необходимо как для оценки их эффективности, так и для расчета  $d_{\text{к}}$  растворов по методу, изложенному в разделе 1.3.

В связи с этим было проведено систематическое исследование идеальных скоростей детонации ряда растворов ЖВВ в инертных растворителях в целях разработки эмпирического метода расчета скорости детонации таких взрывчатых композиций [84].

Скорость детонации ( $D$ ) растворов определялась в толстостенных стальных трубах с помощью осциллографа ОК-15М. Экспериментально подтверждалась идеальная детонация (максимальное значение  $D$ ).

В табл. 1.22 приведены примеры определения максимального значения скорости детонации.

Т а б л и ц а 1.22

## Определение идеальной скорости детонации растворов ЖВВ

Состав	Диаметр заряда, мм	Материал оболочки	$D$ , м/с
ФЭФО	4,5	Бумага	6930
	6	— » —	7280
	7	— » —	7415
	8	— » —	7490
	10	— » —	7495
	14	— » —	7500
	18	Сталь	7500
ФЭФО/четырёххлористый углерод $V_d = 0,1^*$	4,5	Бумага	6740
	6	— » —	7020
	7	— » —	7110
	8	— » —	7280
	10	— » —	7280
	18	Сталь	7280
ФЭФО/четырёххлористый углерод $V_d = 0,3$	9	Бумага	6580
	10	— » —	6650
	12	— » —	6720
	14	— » —	6840
	18	— » —	6840
	18	Сталь	6840

\*  $V_d$  — объемная доля растворителя (добавки).

Исследование влияния степени разбавления ЖВВ и химической природы растворителя на идеальную скорость детонации растворов проводилось на ФЭФО со следующими растворителями: хлороформом, углеродом четыреххлористым, ацетоном, дибутилфталатом, этиленом бромистым, бромформом, циклогексаноном, пропилом йодистым. Результаты исследований представлены в табл. 1.23 и на рис. 1.16 [84].

Таблица 1.23

**Идеальные скорости детонации ряда растворов ФЭФО**

Растворитель	$V_d$	$\rho_{p-ра}, \text{г/см}^3$	$D_{p-ра}, \text{м/с}^*$
Хлороформ	0,1	1,589	7330
	0,2	1,580	7200
	0,3	1,569	6980
Углерод четыреххлористый	0,1	1,600	7280
	0,2	1,600	7080
	0,3	1,600	6840
Ацетон	0,03	1,576	7480
	0,05	1,559	7410
	0,10	1,519	7270
	0,15	1,478	7110
Дибутилфталат	0,05	1,572	7350
	0,10	1,545	7160
	0,15	1,517	7000
Этилен бромистый	0,05	1,629	7290
	0,12	1,669	6940
	0,16	1,693	6780
	0,20	1,716	6670
Бромоформ	0,10	1,729	7040
	0,15	1,794	6780
	0,30	1,987	6110
Циклогексанол	0,05	1,568	7300
	0,10	1,536	7190
	0,15	1,504	7020
Пропил йодистый	0,10	1,614	7040
	0,15	1,621	6920
	0,20	1,629	6640

\* Приведено среднее значение из 5 параллельных опытов, погрешность определения 0,5 %.

Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что скорость детонации ФЭФО линейно снижается с увеличением объемной доли растворителя в исследованном диапазоне концентраций растворов. Влияние химической природы растворителя при этом проявляется в изменении угла наклона прямых. Таким образом, идеальная скорость

детонации растворов ЖВВ в инертных растворителях ( $D_{\text{р-ра}}$ ) описывается следующим линейным уравнением:

$$D_{\text{р-ра}} = D_{\text{вв}} - KV_{\text{д}}, \quad (1.33)$$

где  $D_{\text{вв}}$  — идеальная скорость детонации индивидуального (чистого) ЖВВ, м/с;  $K$  — коэффициент, зависящий от химической природы растворителя.

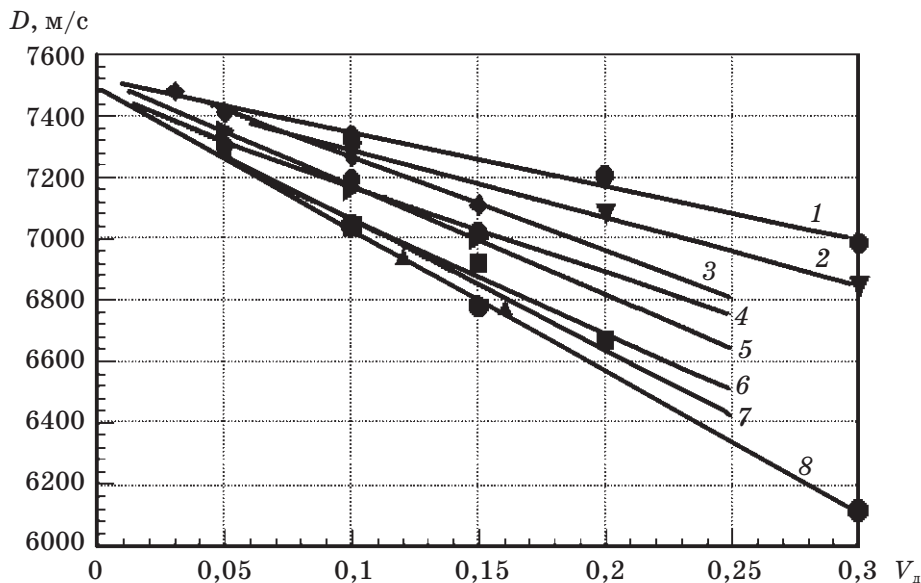


Рис. 1.16. Зависимость скорости детонации ФЭФО от степени его разбавления и химической природы растворителя ( $V_{\text{д}}$  — объемная доля растворителя):

1 — хлороформ; 2 — углерод четыреххлористый; 3 — ацетон; 4 — циклогексанол; 5 — дибутилфталат; 6 — пропиловый йодистый; 7 — этилен бромистый; 8 — бромформ

Влияние свойств растворителей для расчета скорости детонации растворов ЖВВ предложено учитывать через параметр  $A$  добавки ( $A_{\text{д}}$ ), используемый для расчета скорости детонации гетерогенных взрывчатых композиций с инертными органическими добавками [87, 88]. Параметр  $A_{\text{д}}$  определяется ударной сжимаемостью добавок, коррелирует со скоростью ударной волны в материале добавок и рассчитывается для растворителей ЖВВ по формуле:

$$A_{\text{д}} = 10^4 \frac{\sum n_i \delta_i}{M} \rho_{\text{д}}, \quad (1.34)$$

где  $M$  — молекулярная масса растворителя (добавки);  $n_i$  — число атомов  $i$ -го элемента в молекуле растворителя;  $\delta_i$  — вклад  $i$ -го элемента;  $\rho_{\text{д}}$  — плотность добавки, г/см<sup>3</sup>.

Для всех исследованных растворителей были определены значения коэффициента  $K$  уравнения (1.33), приведенные в табл. 1.24.

Таблица 1.24

Параметр  $A_d$  и коэффициент  $K$  исследованных растворителей

Растворитель	Элементный состав	Молекулярная масса	$\rho_d$ , г/см <sup>3</sup>	$K$	$A_d$
Ацетон	$C_3H_6O$	58,08	0,792	2600	2590
Дибутилфталат	$C_{16}H_{22}O_4$	278,35	1,047	2750	3055
Циклогексанол	$C_6H_{12}O$	100,16	0,962	3150	3559
Бромформ	$CHBr_3$	252,75	2,890	4730	6850
Хлороформ	$CHCl_3$	119,38	1,498	1800	990
Углерод четыреххлористый	$CCl_4$	153,82	1,595	1870	764
Этилен бромистый	$C_2H_4Br_2$	187,87	2,179	4520	5693
Пропил йодистый	$C_2H_7I$	169,99	1,743	4175	5740
Метиловый спирт	$CH_4O$	32,04	0,792	2641	2672
Этиловый спирт	$C_2H_6O$	46,07	0,789	2741	2872
Вода	$H_2O$	18,02	1,0	2662	2714

Зависимость коэффициента  $K$  от параметра  $A_d$  показана на рис. 1.17.

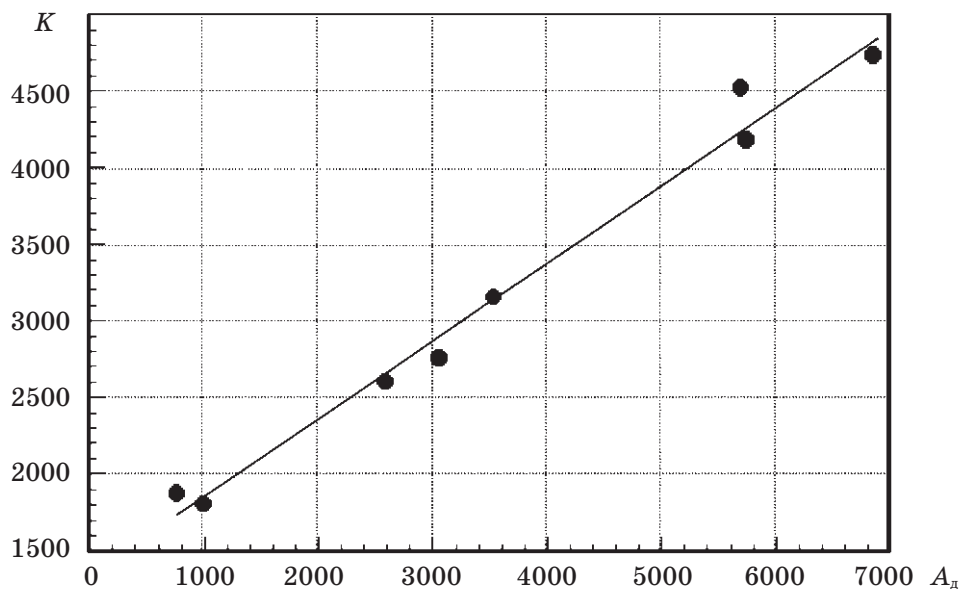


Рис. 1.17. Зависимость коэффициента  $K$  уравнения (1.33) от параметра  $A_d$



Полученная зависимость описывается уравнением

$$K = 0,5(2610 + A_d). \quad (1.35)$$

### Схема расчета

На основе анализа и обобщения полученных результатов предложен эмпирический метод расчета скорости детонации растворов ЖВВ в инертных растворителях [84].

Идеальная скорость детонации раствора ЖВВ ( $D_{p-ра}$ ) рассчитывается по формуле

$$D_{p-ра} = D_{вв} - 0,5(2610 + A_d)V_d, \quad (1.36)$$

где  $D_{вв}$  — скорость детонации ЖВВ, м/с;  $V_d$  — объемная доля растворителя ( $V_d = 1 - V_{вв}$ );  $V_{вв}$  — объемная доля ЖВВ в растворе вычисляется по формуле  $V_{вв} = \alpha \frac{\rho_{p-ра}}{\rho_{вв}}$  ( $\alpha$  — массовая доля ЖВВ); параметр  $A_d$  рассчитывается по формуле (1.34).

Значения вкладов элементов для растворителей ЖВВ приведены в табл. 1.25.

Таблица 1.25

Вклады элементов для расчета параметра  $A_d$

Элемент	$\delta_i$
C	2,231
H	1,855
N	1,984
O	1,175
F	1,563
Cl	1,284
Br	18,604
I	36,171

*Примечание.* Погрешность расчета скорости детонации растворов ЖВВ составляет 0,5–1,5 %.

В табл. 1.26 сопоставлены опытные [86, 89, 90] и рассчитанные по данному методу скорости детонации ряда растворов ЖВВ. Как видно из

таблицы, расчетные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Таблица 1.26

## Опытные и расчетные скорости детонации ряда растворов ЖВВ

Раствор ЖВВ, об. %	$D_{вв}$ , м/с	$D_{р-ра}$ , м/с	
		Опыт	Расчет
Нитрометан/углерод четыреххлористый [89]	6260		
90/10		6100	6090
80/20		5930	5920
70/30		5780	5750
60/40		5650	5590
50/50		5520	5420
40/60		5280	5250
Нитрометан/хлороформ [89]	6260		
90/10		6100	6080
80/20		5900	5900
65/35		5600	5630
50/50		5300	5360
Нитрометан/ацетон [89]	6260		
95/5		6110	6130
90/10		5980	6000
85/15		5840	5870
Нитрометан/углерод четыреххлористый [86]	6300		
92,7/7,3		6130	6180
78,4/21,6		5940	5940
Нитрометан/бромформ [86]	6300		
85,7/14,3		5600	5620
Азотистоводородная кислота/вода [90]	7570		
98,1/1,9		7540	7520
66,8/33,2		6630	6690
56,8/43,2		6340	6420

**Примеры расчета скорости детонации растворов ЖВВ**

**Пример 1.** Рассчитать скорость детонации раствора нитрометана в ацетоне 85/15 об. %. Скорость детонации нитрометана 6260 м/с [89].

Скорость детонации раствора ЖВВ:

$$D_{\text{р-ра}} = D_{\text{вв}} - 0,5(2610 + A_{\text{д}})V_{\text{д}}.$$

Вычисляем параметр  $A_{\text{д}}$  для ацетона:

$$A_{\text{д}} = 10^4 \frac{\sum n_i \delta_i}{M} \rho_{\text{д}}.$$

Для ацетона  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ :  $M = 58,08$ ;  $\rho_{\text{д}} = 0,792$  г/см<sup>3</sup>.

$n_{\text{с}} = 3$	$n_{\text{н}} = 6$	$n_{\text{о}} = 1$
$\delta_{\text{с}} = 2,231$	$\delta_{\text{н}} = 1,855$	$\delta_{\text{о}} = 1,175$

$$A_{\text{д}} = 10^4 (3 \cdot 2,231 + 6 \cdot 1,855 + 1,175) \cdot 0,792 / 58,08 = 2590;$$

$$D_{\text{р-ра}} = 6260 - 0,5(2610 + 2590) \cdot 0,15 = 5870 \text{ м/с}$$

Экспериментальное значение 5840 м/с [89].

**Пример 2.** Рассчитать скорость детонации раствора ФЭФО в бромформе 70/30 об. %. Скорость детонации ФЭФО 7500 м/с [84].

Вычисляем параметр  $A_{\text{д}}$  для бромформа  $\text{CHBr}_3$ :

$$M = 252,75; \rho_{\text{д}} = 2,890 \text{ г/см}^3$$

$n_{\text{с}} = 1$	$n_{\text{н}} = 1$	$n_{\text{Br}} = 3$
$\delta_{\text{с}} = 2,231$	$\delta_{\text{н}} = 1,855$	$\delta_{\text{Br}} = 18,604$

$$A_{\text{д}} = 10^4 (2,231 + 1,855 + 3 \cdot 18,604) \cdot 2,890 / 252,75 = 6850;$$

$$D_{\text{р-ра}} = 7500 - 0,5(2610 + 6850) \cdot 0,3 = 6080 \text{ м/с}$$

Экспериментальное значение 6110 м/с [84].

## 2.1. ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВВ

### 2.1.1. НЕКОТОРЫЕ ЭКСПРЕСС-МЕТОДЫ РАСЧЕТА

В настоящее время на практике используются различные эмпирические методы расчета параметров детонации индивидуальных взрывчатых веществ. Приведем наиболее известные из них [91–95].

#### Метод Авакяна Г. А. [91]

Скорость детонации ( $D$ , м/с) рассчитывается по формуле:

$$D = 643 \sqrt{\frac{T_d}{\mu_{\text{ср}}}} + M(\rho_0 - 1,6), \quad (2.1)$$

где  $\rho_0$  — плотность заряда ВВ, г/см<sup>3</sup>;  $T_d$  — температура детонации, К;  $\mu_{\text{ср}}$  — средняя молекулярная масса газообразных продуктов взрыва (вычисляется по составу продуктов взрыва, рассчитанному по [91]);  $M$  — коэффициент, м/с / г/см<sup>3</sup>:  $M = 4000$  при  $\rho_0 > 1,6$  г/см<sup>3</sup> и  $3600$  при  $\rho_0 < 1,6$  г/см<sup>3</sup>.

$$T_d = \frac{Q_{v_{\text{вп}}}}{\sum c'}, \quad (2.2)$$

где  $Q_{v_{\text{вп}}}$  — теплота взрыва, ккал/моль;  $\sum c'$  — кажущаяся теплоемкость продуктов взрыва, ккал/моль·К.

#### Метод Камлета М. [92]

Скорость детонации ( $D$ , км/с) вычисляется по формуле:

$$D = 1,01\varphi^{1/2}(1 + 1,30\rho_0), \quad (2.3)$$

где  $\varphi = NM^{1/2} Q^{1/2}$  — управляющий фактор;  $N$  — число молей газообразных продуктов взрыва на 1 г ВВ, моль/г;  $M$  — средняя молекулярная масса газообразных продуктов взрыва, г/моль;  $Q$  — теплота взрыва, кал/г;  $\rho_0$  — плотность заряда, г/см<sup>3</sup>.

Для расчета указанных характеристик используется идеализированная схема реакции взрывчатого превращения

$$C_a H_b O_c N_d = \frac{d}{2} N_2 + \frac{b}{2} H_2O + \left( \frac{c}{2} - \frac{b}{4} \right) CO_2 + \left( a + \frac{b}{4} - \frac{c}{2} \right) C. \quad (2.4)$$

### Метод Айзенштадта И. Н. [93]

Приведем факторы, входящие в конечную формулу для расчета скорости детонации:

1. Фактор  $B$  — число грамм-атомов элементов в 1 кг ВВ

Для  $C_a H_b O_c N_d F_e$

$$B = \frac{a + b + c + d + e}{M_{ВВ}} 10^3. \quad (2.5)$$

2. Кислородный баланс в абсолютном значении

$$|КБ| = \frac{16 \left( c + \frac{e}{2} - 2a - \frac{b}{2} \right) 10^2}{M_{ВВ}}. \quad (2.6)$$

3. Теплота образования ВВ

$$Q_{Vобр} = \frac{[-\Delta H_f^\circ - 0,3(b + c + d + e)] 10^3}{M_{ВВ}}, \text{ ккал/кг} \quad (2.7)$$

$$D_{1,60} = \sqrt{0,73B - 0,24|КБ| - 0,073Q_{Vобр}}, \text{ км/с} \quad (2.8)$$

### Метод Пепекина В.И. [94]

Для взрывчатого вещества общей формулы  $C_a H_b O_c N_d$  в качестве определяющих факторов используются:

- фактор горючего  $A = (0,135a^2 + 0,185b^2) / (a + b)$ ;
- фактор кислорода  $B = [1,05 - 0,63c / (c + d)] c^2 / (c + d)$ ;
- фактор азота  $C = [1,375 - 0,9d / (c + d)] d^2 / (c + d)$ .

$$D_{p0} = 4,2 + 2,0\varphi\rho_0, \text{ км/с} \quad (2.9)$$

$$P_J = 40 + 75\varphi\rho_0^2 \quad (2.10) \quad \alpha = \frac{c}{2a + b/2} \quad (2.11)$$

$$\varphi = n_{эф} Q_{ВП}^{0,5} \quad (2.12) \quad n_{эф} = K_{ВВ} \cdot \rho_0^{0,5} \quad (2.13)$$

$$K_{ВВ} = \frac{A + B + C}{12a + b + 16c + 14d} \quad (2.14)$$

$$Q_{\text{ВП}} = Q_{\text{ВПmax}} \left\{ 1 - (0,528 - 0,165\rho_0)(1,4 - \alpha)^{1,4} \left[ 1 - \left( \frac{b}{a+b} \right)^{\frac{5,73-2,28\rho_0}{(1,4-\alpha)^3}} \right] \right\}, \quad (2.15)$$

где  $\rho_0$  — плотность заряда, г/см<sup>3</sup>;  $\alpha$  — кислородный коэффициент ВВ;  $Q_{\text{ВП}}$ ,  $Q_{\text{ВПmax}}$  — реальная и максимальная теплоты взрыва ВВ, ккал/кг,  $P_J$  — давление детонации.

### 2.1.2. АДДИТИВНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ ВВ ПО ВКЛАДАМ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ И ГРУПП. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

Данный метод, предложенный А. А. Котоминим [96], уточнен на основе опубликованного в последние годы большого экспериментального материала по ВВ различного химического строения [97–100]. Он основан на аддитивном принципе расчета идеальной скорости детонации ВВ при плотности монокристалла по вкладам химических связей и групп в молекулах ВВ, содержащих С, Н, N, О, F, Cl, S элементы. Эта скорость детонации максимальна для данного ВВ, является его константой и полностью определяется составом и строением вещества. По элементному составу ВВ рассчитываются также показатель политропы продуктов взрыва и угловой коэффициент линейной зависимости скорости детонации от плотности заряда. Далее находятся параметры детонации ВВ при заданной плотности заряда. В отличие от известных методов, этот метод непосредственно связывает скорость детонации с составом и строением ВВ и не требует знания энтальпии его образования, корректный расчет которой для новых ВВ затруднен. Метод разработан на основе систематизированных экспериментальных данных для 500 ВВ различных классов, содержащих С, Н, N, О, F, Cl, S элементы. Средняя погрешность расчета скорости детонации составила при этом 80 м/с.

а) Расчет идеальной скорости детонации ВВ при плотности монокристалла

Идеальная скорость детонации ВВ состава  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_fS_g$  при плотности монокристалла  $D_{\rho_{\text{МК}}}$  (км/с) рассчитывается по формуле

$$D_{\rho_{\text{МК}}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{МК}}}{M_{\text{ВВ}}} (\sum n_i F_i + \sum n_j N_j), \quad (2.16)$$

где  $\sum n_i F_i$  — сумма вкладов групп в молекуле ВВ ( $F_i$  — значение вклада группы,  $n_i$  — число групп данного вида);  $\sum n_j N_j$  — сумма вкладов химических связей между группами (связи внутри групп учтены в  $F_i$ )

( $N_j$  — значение вклада связи,  $n_j$  — число связей данного вида);  $\rho_{\text{МК}}$  — плотность монокристалла ВВ, г/см<sup>3</sup>;  $M_{\text{ВВ}}$  — молекулярная масса ВВ.

Если плотность монокристалла ВВ неизвестна, она рассчитывается по методу, описанному в разделе 1.1.2

Идеальная скорость детонации смеси взрывчатых веществ  $D_{\text{см}}$  при ее максимальной плотности  $\rho_{\text{см}}$  рассчитывается аддитивно:

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} \left( \sum m_i \delta_i \right), \quad (2.17)$$

где  $m_i$  — число молей  $i$ -го компонента в 1000 г смеси;  $\delta_i$  — сумма вкладов химических связей и групп для соответствующего ВВ ( $\sum n_i F_i + \sum n_j N_j$ ).

Если смесь содержит ВВ — окислитель, то вклады групп  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$  для каждого компонента смеси берутся или вычисляются по кислородному коэффициенту смеси.

Значения вкладов групп и связей приведены в табл. 2.1.

Таблица 2.1

Вклады химических связей и групп

№	Группа	Вклад $F_i$	№	Связь**	Вклад $N_j$
1	C*	6,6	1	C—C	13,4
2	CH	−8,4	2	C=C	−1,6
3	CH <sub>2</sub>	−0,9	3	C—N	4,4
4	CH <sub>3</sub>		4	C=N	39,6
	при $H \geq 3,8\%$	11,5	5	C—O	15,5
	при $H < 3,8\%$	1,5	6	C=O	5,5
5	N*	8,8	7	N—O	29,3
6	NH	12,5	8	N=O	94,0
7	NH <sub>2</sub>	21,4		при $\alpha < 1,0$	
8	<sup>+</sup> NH <sub>3</sub>	34,8		при $\alpha > 1,0$	
9	<sup>+</sup> NH <sub>4</sub>	43,2	9	N→O	38,6
10	O*	15,0	10	N—N	52,1
11	OH	19,6	11	N=N	49,8
12	F* при $\alpha < 1,0$ при $\alpha > 1,0$	7,5 1,0	12	$\text{—}\overset{\oplus}{\text{N}}\text{—}\overset{\ominus}{\text{NO}_3}$	30,8
13	Cl*	7,5	13	$\text{—}\overset{\oplus}{\text{N}}\text{—}\overset{\ominus}{\text{C(NO}_2)_3}$	28,8

Окончание табл. 2.1

№	Группа	Вклад $F_i$	№	Связь**	Вклад $N_j$
14	S*	15,0	14		20,1
15	N=N	163,9			
16		166,2	15		23,0
17	C≡N	169,7	16		-11,1
18		144,6			
19	N <sub>3</sub>		17	C-F	34,5
	при $\alpha > 0,35$ при $\alpha < 0,35$	167,0 190,3	18	N-F при $b \geq e$ и $\alpha > 0,2$ при $b \geq e$ и $\alpha < 0,2$ при $b < e$ ( $b = 0$ )	74,8 90,7 $30,8 + 44 \frac{b}{e}$
20	NO <sub>2</sub> при $\alpha < 0,35$ $0,35 \leq \alpha \leq 1,0$ $1,0 < \alpha \leq 1,45$	185,1 175,8 $175,8 - 66 \times$ $\times (\alpha - 1,0)$			
	$1,45 < \alpha \leq 1,55$	$146,1 - 229 \times$ $\times (\alpha - 1,45)$	20	C-S	15,8
	$1,55 < \alpha \leq 3,5$ $\alpha > 3,5$	123,2 101,6	21	S-O	89,3
			22	S=O	64,6
21	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> при $\alpha \leq 1,0$ при $\alpha > 1,0$ Для аммиачно-селитренных ВВ:	209,2 206,7	23		32,7
	при $\alpha \leq 1,0$ при $\alpha > 1,0$	86,5 $86,5 - 321(\alpha - 1,0)$			
22	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup> при $\alpha \leq 0,2$ $0,2 < \alpha \leq 0,5$ $0,5 < \alpha \leq 1,0$ $1,0 < \alpha \leq 1,5$ $\alpha > 1,5$	514,7 309,8 278,7 269,2 227,2			



*Примечания.* \* Для всех структур атом считается группой; \*\* вклады относятся непосредственно к химическим связям между атомами без включения самих атомов;  $\alpha$  — кислородный коэффициент ВВ

$$\alpha = \frac{c + e/2 + f/2}{2a + b/2} \quad (2.18)$$

б) Расчет скорости детонации ВВ при реальной плотности заряда

Многочисленные экспериментальные данные и ряд работ показывают, что с достаточной для практики точностью зависимость идеальной скорости детонации от плотности ВВ при  $\rho_0 \geq 1,0$  г/см<sup>3</sup> является линейной:

$$D_{\rho_0} = D_{1,0} + M(\rho_0 - 1,0), \quad (2.19)$$

где  $M$  — коэффициент, зависящий от характеристик ВВ.

Для различных ВВ значение коэффициента  $M$  колеблется от 2 до 5 км/с / г/см<sup>3</sup>.

В общем виде коэффициент  $M$  должен зависеть от сжимаемости продуктов взрыва в зоне химической реакции детонационной волны и в первую очередь — от состава продуктов взрыва до точки Жуге.

Так как состав продуктов взрыва в основном определяется составом ВВ, то для практических расчетов коэффициент  $M$  можно связать корреляционной зависимостью с элементарным составом ВВ [96]:

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2e}{0,1M_{\text{ВВ}}} \quad (2.20)$$

(при содержании Н  $\leq 3,5\%$   $k_2 = 3,0$ ; при Н  $> 3,5\%$   $k_2 = 1,3$ ).

Скорость детонации ВВ при его максимальной плотности, рассчитанная по формуле (2.16), приводится к реальной плотности заряда  $\rho_0$  с использованием значения коэффициента  $M$ , вычисленного по формуле (2.20):

$$D_{\rho_0} = D_{\rho_{\text{МК}}} - M(\rho_{\text{МК}} - \rho_0). \quad (2.21)$$

В табл. 2.2 приведены экспериментальные и рассчитанные по формуле (2.20) величины коэффициента  $M$  для ВВ различного состава. Как видно из таблицы, максимальная погрешность расчета составляет  $\pm 0,25$  км/с / г/см<sup>3</sup>, что дает ошибку в расчете скорости детонации  $\pm 0,15$  км/с при  $\Delta\rho_0 = 0,6$  г/см<sup>3</sup>. В табл. 2.3 сопоставлены опытные и рассчитанные по формулам (2.20), (2.21) значения скорости детонации для ряда ВВ различной плотности.

Таблица 2.2

Опытные и расчетные значения коэффициента  $M$  для ряда ВВ

ВВ	Формула	Коэффициент $M$ , км/с / г/см <sup>3</sup>	
		Опыт	Расчет
ДИНА	$C_4H_8N_4O_8$	2,90 [101]	3,06
Тротил	$C_7H_5N_3O_6$	3,01 [102]	2,76
Пикриновая кислота	$C_6H_3N_3O_7$	3,05 [103]	3,28
Тетрил	$C_7H_5N_5O_8$	3,22 [103]	3,27
ТЭН	$C_5H_8N_4O_{12}$	3,25 [104]	3,32
Тринитробензол	$C_6H_3N_3O_6$	3,26 [96]	3,17
Гексоген	$C_3H_6N_6O_6$	3,33 [105, 106]	3,58
Октоген	$C_4H_8N_8O_8$	3,34 [107]	3,58
Диаминотринитробензол	$C_6H_5N_5O_6$	3,40 [108]	3,20
Тринитроэтилтринитробутират	$C_6H_6N_6O_{14}$	3,83 [109]	3,72
ЭДНА	$C_2H_6N_4O_4$	3,94 [91]	3,81
Нитрогуанидин	$CH_4N_4O_2$	4,02 [110]	4,18
Азид гидразина	$H_5N_5$	4,60 [111]	4,53

Таблица 2.3

## Опытные и расчетные значения скорости детонации для ряда ВВ различной плотности

ВВ	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
		Опыт	Расчет
Тротил	1,60	6,97 [93]	—
	1,45	6,50 [101]	6,55
	1,36	6,20 [101]	6,30
	1,00	5,10 [101]	5,30
Гексоген	1,80	8,75 [108]	—
	1,60	8,01 [93]	8,03
	1,46	7,60 [101]	7,53
	1,29	7,00 [101]	6,92
	1,10	6,18 [101]	6,24
	0,95	5,80 [101]	5,71

Окончание табл. 2.3

ВВ	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
		Опыт	Расчет
Октоген	1,90	9,10 [108]	—
	1,60	8,08 [93]	8,03
	1,00	6,09 [107]	5,88
ТЭН	1,77	8,27 [112]	—
	1,67	7,98 [108]	7,94
	1,60	7,78 [93]	7,71
	1,00	5,90 [104]	5,71
	1,00	5,55 [103]	5,71
Тетрил	1,70	7,56 [108]	—
	1,60	7,27 [93]	7,23
Пикриновая кислота	1,71	7,35 [92]	—
	1,60	7,01 [93]	6,99
	1,00	5,26 [108]	5,02
Нитрогуанидин	1,62	7,94 [110]	—
	1,55	7,66 [110]	7,65
	1,00	5,46 [108]	5,35
ДИНА	1,67	8,00 [92]	—
	1,60	7,68 [101]	7,78
	1,36	7,00 [101]	7,05
	1,00	5,95 [103]	5,95
	0,95	5,80 [101]	5,80
Азид гидразина	1,26	7,60 [111]	—
	0,68	4,95 [111]	4,97
	0,48	4,10 [111]	4,07

в) Расчет показателя политропы продуктов взрыва

Показатель политропы продуктов взрыва  $n$  так же, как и коэффициент  $M$ , определяется их сжимаемостью и может быть связан с элементарным составом и плотностью ВВ корреляционной зависимостью [96]:

$$n_{1,5} = \frac{3,5a + k_2b + 4,8c + 3,6d + 5,9e + 10,3f}{0,1M_{\text{ВВ}}} \quad (2.22)$$

(при содержании Н  $\leq 5,8\%$   $k_2 = -0,5$ ; при содержании Н  $> 5,8\%$   $k_2 = +0,5$ )

$$n = n_{1,5} + 0,4(\rho_0 - 1,5), \quad (2.23)$$

где  $n_{1,5}$  — показатель политропы при плотности ВВ  $\rho_0 = 1,5$  г/см<sup>3</sup>;  $n$  — показатель политропы при заданной плотности  $\rho_0$ .

Показатель политропы смеси ВВ рассчитывается по брутто-формуле смеси. Приведение показателя политропы продуктов взрыва различных ВВ к одной плотности ( $\rho_0 = 1,50$  г/см<sup>3</sup>) выявляет его зависимость от состава ВВ — формула (2.22). С понижением плотности ВВ показатель политропы несколько уменьшается — формула (2.23). Опытные значения показателя политропы для ВВ различного химического состава и плотности, определенные методами преград, откола, аквариума и электроннооптическим, колеблются от 2,4 до 3,0.

В табл. 2.4 сопоставлены рассчитанные по формулам (2.22), (2.23) и опытные значения показателя политропы продуктов взрыва некоторых ВВ. Погрешность расчета  $n$  не превышает 0,1.

Таблица 2.4

**Экспериментальные и расчетные показатели политропы некоторых ВВ различного состава и плотности**

ВВ	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Показатель политропы	
		Опыт	Расчет
Нитрометан	1,14	2,40 [113]	2,35
Гексоген	1,80	2,70 [114]	2,73
	1,50	2,60 [114]	2,61
Октоген	1,87	2,70 [115]	2,75
Нитроглицерин	1,60	2,71 [105,106]	2,77
ДИНА	1,67	2,73 [116]	2,68
1,8-Дифтор-1,1,3,6,8,8-гексанитро-3,6-диазаоктан	1,82	2,77 [116]	2,85
Тротил	1,60	2,80 [102]	2,75
ТЭН	1,77	2,80 [108]	2,82
Тетрил	1,70	2,85 [108]	2,81

## г) Расчет параметров детонации

Параметры идеальной детонации ВВ (смеси ВВ) в точке Жуге рассчитываются с учетом вычисленных значений скорости детонации и показателя политропы  $n$  по известным формулам:

$$P_J = \frac{\rho_0 D^2}{n+1} \quad (2.24)$$

$$U_J = \frac{D}{n+1} \quad (2.25)$$

$$\rho_J = \frac{n+1}{n} \rho_0 \quad (2.26)$$

$$C_J = D - U_J, \quad (2.27)$$

где  $P_J$  — детонационное давление, ГПа;  $U_J$  — массовая скорость продуктов детонации, км/с;  $\rho_J$  — плотность продуктов детонации, г/см<sup>3</sup>;  $C_J$  — скорость звука в продуктах детонации, км/с;  $\rho_0$  — плотность заряда, г/см<sup>3</sup>;  $D$  — скорость детонации при плотности  $\rho_0$ , рассчитанная по формулам (2.16), (2.17), (2.21), км/с.

## д) Общая схема расчета

Расчет параметров детонации ВВ по предложенному методу проводится следующим образом:

1) составляются эмпирическая и структурная формулы ВВ, вычисляются молекулярная масса и кислородный коэффициент по формуле (2.18), при необходимости рассчитывается плотность монокристалла ВВ по разделу 1.1.2;

2) молекула ВВ расщепляется на группы и химические связи между ними, указанные в табл. 2.1, вычисляется сумма вкладов групп и связей;

3) рассчитывается идеальная скорость детонации ВВ при плотности монокристалла по формуле (2.16);

4) рассчитывается коэффициент  $M$  для ВВ по формуле (2.20);

5) рассчитывается скорость детонации ВВ при реальной плотности заряда  $\rho_0$  по формуле (2.21);

6) рассчитывается показатель политропы продуктов взрыва ВВ по формулам (2.22), (2.23);

7) рассчитываются параметры идеальной детонации ВВ по (2.24) — (2.27).

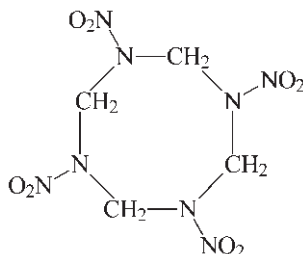
8) для смеси ВВ расчет аналогичен (2.17), при этом сумма вкладов групп и связей вычисляется для каждого компонента смеси.

### Примеры вычисления параметров детонации ВВ различного химического состава и строения

**Пример 1.** Параметры детонации октогена при плотностях 1,90 и 1,60 г/см<sup>3</sup>.

1. Октонген  $C_4H_8N_8O_8$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 296,16$ ; плотность монокристалла  $\rho_{\text{МК}} = 1,90 \text{ г/см}^3$ ; кислородный коэффициент  $\alpha = c / (2a + b/2) = 0,67$ .

2. Расчленим структурную формулу октогена



на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
CH <sub>2</sub>	4	C-N	8
N	4	N-N	4
NO <sub>2</sub>	4		

Вычисляем сумму вкладов групп и связей по табл. 2.1:

$$\begin{aligned} \sum n_i F_i + \sum n_j N_j &= 4F_{\text{CH}_2} + 4F_{\text{N}} + 4F_{\text{NO}_2} + 8N_{\text{C-N}} + 4N_{\text{N-N}} = \\ &= 4(-0,9) + 4 \cdot 8,8 + 4 \cdot 175,8 + 8 \cdot 4,4 + 4 \cdot 52,1 = 978,4. \end{aligned}$$

Вклад NO<sub>2</sub> группы ( $F_{\text{NO}_2}$ ) взят при  $\alpha = 0,67$ .

3. Рассчитываем идеальную скорость детонации октогена при плотности монокристалла по формуле (2.16):

$$D_{\rho_{\text{МК}}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{МК}}}{M_{\text{ВВ}}} (\sum n_i F_i + \sum n_j N_j) = 2,77 + \frac{1,90 \cdot 978,4}{296,16} = 9,05 \text{ км/с}$$

Опытное значение 9,10 км/с [108].

4. Рассчитываем коэффициент  $M$  по формуле (2.20):

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2e}{0,1M_{\text{ВВ}}}$$

(содержание Н в октогене  $\frac{1,008 \cdot 8}{296,16} \cdot 100 = 2,7\%$ , следовательно,  $k_2 = 3,0$ );

$$M = \frac{1,1 \cdot 4 - 3,0 \cdot 8 + 7,6 \cdot 8 + 8,1 \cdot 8}{0,1 \cdot 296,16} = 3,58.$$

Опытное значение  $M = 3,34$  [107].

5. Рассчитываем скорость детонации октогена при плотности 1,60 г/см<sup>3</sup> по формуле (2.21):

$$D_{\rho_0} = D_{\rho_{\text{МК}}} - M(\rho_{\text{МК}} - \rho_0);$$

$$D_{1,60} = 9,05 - 3,58(1,90 - 1,60) = 7,98 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 8,08 км/с [93].

6. Рассчитываем показатель политропы продуктов взрыва октогена:  
а) при плотности ВВ 1,50 г/см<sup>3</sup> — по формуле (2.22)

$$n_{1,5} = \frac{3,5a + k_2b + 4,8c + 3,6d + 5,9e + 10,3f}{0,1M_{\text{ВВ}}}$$

(содержание Н в октогене 2,7 %, следовательно,  $k_2 = -0,5$ ),

$$n_{1,5} = \frac{3,5 \cdot 4 - 0,5 \cdot 8 + 4,8 \cdot 8 + 3,6 \cdot 8}{0,1 \cdot 296,16} = 2,60;$$

б) при плотности ВВ 1,60 и 1,90 г/см<sup>3</sup> — по формуле (2.23)

$$n = n_{1,5} + 0,4(\rho_0 - 1,5)$$

$$n_{1,60} = 2,60 + 0,4(1,60 - 1,50) = 2,64$$

$$n_{1,90} = 2,60 + 0,4(1,90 - 1,50) = 2,76$$

Опытное значение  $n_{1,87} = 2,70$  [115].

7. Рассчитываем параметры идеальной детонации октогена:  
а) при плотности 1,90 г/см<sup>3</sup>:

$$P_J = \frac{\rho_0 D^2}{n+1} = \frac{1,90 \cdot 9,05^2}{2,76+1} = 41,4 \text{ ГПа}$$

(при плотности 1,89 г/см<sup>3</sup>: расчет — 40,8 ГПа, опыт — 39,0 ГПа [117]),

$$U_J = \frac{D}{n+1} = \frac{9,05}{2,76+1} = 2,41 \text{ км/с;}$$

$$\rho_J = \frac{n+1}{n} \rho_0 = \frac{2,76+1}{2,76} \cdot 1,90 = 2,59 \text{ г/см}^3;$$

$$C_J = D - U_J = 9,05 - 2,41 = 6,64 \text{ км/с;}$$

б) при плотности 1,60 г/см<sup>3</sup>:

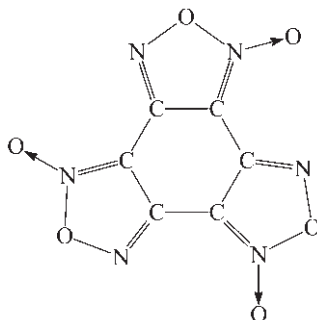
$$P_J = \frac{1,60 \cdot 7,98^2}{2,64+1} = 28,0 \text{ ГПа;} \quad U_J = \frac{7,98}{2,64+1} = 2,19 \text{ км/с;}$$

$$\rho_J = \frac{2,64+1}{2,64} \cdot 1,60 = 2,21 \text{ г/см}^3; \quad C_J = 7,98 - 2,19 = 5,79 \text{ км/с.}$$

**Пример 2.** Максимальная скорость детонации бензотрифуросана (БТФ)

1. Бензотрифуросан  $C_6N_6O_6$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 252,10$ ;  $\rho_{\text{МК}} = 1,901$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 6/12 = 0,5$ .

2. Расчленим структурную формулу БТФ



на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
C	6	C-C	6
N	6	C=N	6
O	6	N-O	6
		N→O	3

Вычисляем сумму вкладов групп и связей по табл. 2.1:

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 6F_C + 6F_N + 6F_O + 6N_{C-C} + 6N_{C=N} + 6N_{N-O} + 3N_{N \rightarrow O} = 6 \cdot 6,6 + 6 \cdot 8,8 + 6 \cdot 15,0 + 6 \cdot 13,4 + 6 \cdot 39,6 + 6 \cdot 29,3 + 3 \cdot 38,6 = 792,0.$$

3. Рассчитываем максимальную скорость детонации БТФ по (2.16):

$$D_{\rho_{\text{МК}}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{МК}}}{M_{\text{ВВ}}} \left( \sum n_i F_i + n_j N_j \right) = 2,77 + \frac{1,901 \cdot 792,0}{252,10} = 8,74 \text{ км/с.}$$

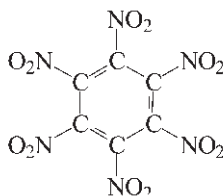
Опытное значение 8,62 км/с [118].

**Пример 3.** Скорость детонации гексанитробензола (ГНБ) при плотности монокристалла

1. Гексанитробензол  $C_6N_6O_{12}$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 348,10$ ;  $\rho_{\text{МК}} = 2,00$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 12/12 = 1,00$ .



## 2. Расчленим структурную формулу ГНБ



на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
C	6	C-C	3
NO <sub>2</sub>	6	C=C	3
		C-N	6

Вычисляем сумму вкладов групп и связей по табл. 2.1:

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 6F_C + 6F_{NO_2} + 3N_{C-C} + 3N_{C=C} + 6N_{C-N} = \\ = 6 \cdot 6,6 + 6 \cdot 175,8 + 3 \cdot 13,4 + 3 \cdot (-1,6) + 6 \cdot 4,4 = 1156,2.$$

Вклад NO<sub>2</sub> группы ( $F_{NO_2}$ ) взят при  $\alpha = 1,00$ .

3. Рассчитываем скорость детонации ГНБ при плотности монокристалла:

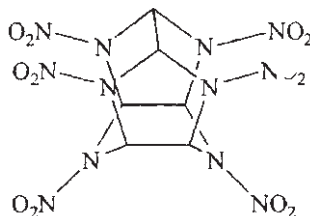
$$D_{\rho_{\text{МК}}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{МК}}}{M_{\text{ВВ}}} (\sum n_i F_i + \sum n_j N_j) = 2,77 + \frac{2,00 \cdot 1156,2}{348,10} = 9,42 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 9,50 км/с [109].

**Пример 4.** Максимальная скорость детонации взрывчатого вещества CL-20

1. CL-20 C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>12</sub>O<sub>12</sub>,  $M_{\text{ВВ}} = 438,20$ ;  $\rho_{\text{МК}} = 2,04 \text{ г/см}^3$ ;  $\alpha = 12/15 = 0,80$ .

2. Расчленим структурную формулу CL-20



на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
CH	6	C-C	3
N	6	C-N	12
NO <sub>2</sub>	6	N-N	6

Вычисляем сумму вкладов групп и связей по табл. 2.1:

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 6F_{\text{CH}} + 6F_{\text{N}} + 6F_{\text{NO}_2} + 3N_{\text{C-C}} + 12N_{\text{C-N}} + 6N_{\text{N-N}} = \\ = 6 \cdot (-8,4) + 6 \cdot 8,8 + 6 \cdot 175,8 + 3 \cdot 13,4 + 12 \cdot 4,4 + 6 \cdot 52,1 = 1462,8.$$

3. Рассчитываем максимальную скорость детонации CL-20 по (2.16):

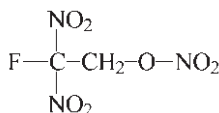
$$D_{\rho_{\text{МК}}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{МК}}}{M_{\text{ВВ}}} (\sum n_i F_i + \sum n_j N_j) = 2,77 + \frac{2,04 \cdot 1462,8}{438,20} = 9,58 \text{ км/с.}$$

Опытное значение скорости детонации смеси CL-20/ТНТ (97/3) % мас. при плотности 1,99 г/см<sup>3</sup> — 9,37 км/с. Отсюда для CL-20  $D_{\rho_{\text{МК}}} \sim 9,60$  км/с.

**Пример 5.** Скорость детонации жидкого ВВ 2-фтор-2,2-динитроэтилнитрата

1. 2-фтор-2,2-динитроэтилнитрат  $\text{C}_2\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_7\text{F}$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 199,06$ ;  
 $\rho = 1,642$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 7,5/5 = 1,50$ .

2. Расчленяем структурную формулу ЖВВ на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:



Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
C	1	C-C	1
CH <sub>2</sub>	1	C-N	2
O	1	C-O	1
F	1	N-O	1
NO <sub>2</sub>	3	C-F	1

и рассчитываем сумму вкладов с учетом  $\alpha = 1,50$ :

$$\begin{aligned} \sum n_i F_i + \sum n_j N_j &= F_C + F_{CH_2} + F_O + F_F + 3F_{NO_2} + N_{C-C} + 2N_{C-N} + N_{C-O} + \\ &+ N_{N-O} + N_{C-F} = 6,6 - 0,9 + 15,0 + 1,0 + 3 \cdot 134,65 + 13,4 + 2 \cdot 4,4 + \\ &+ 15,5 + 29,3 + 34,5 = 527,1 \end{aligned}$$

(при  $\alpha > 1$   $F_F = 1,0$ ; при  $1,45 < \alpha \leq 1,55$   $F_{NO_2} = 146,1 - 229(1,50 + 1,45) = 134,65$ ).

### 3. Скорость детонации ЖВВ

$$D_{\rho_{\text{мк}}} = 2,77 + \frac{1,642 \cdot 527,1}{199,06} = 7,11 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 7,12 км/с [116].

**Пример 6.** Максимальная скорость детонации нитрата гидразина

1. Нитрат гидразина  $H_5N_3O_3$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 95,06$ ;  $\rho_{\text{мк}} = 1,63 \text{ г/см}^3$ ;  
 $\alpha = 3/2,5 = 1,20$ .

2. Расчленим структурную формулу нитрата гидразина на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:



Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
NH <sub>2</sub>	1	N-N	1
<sup>+</sup> NH <sub>3</sub>	1	$\begin{array}{c}   \\ -N^{\oplus}- \\   \end{array} \overset{\ominus}{NO_3}$	1
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1		

$$\begin{aligned} \sum n_i F_i + \sum n_j N_j &= F_{NH_2} + F_{+NH_3} + F_{NO_3} + N_{N-N} + N_{+N-N^{\ominus}} = \\ &= 21,4 + 34,8 + 206,7 + 52,1 + 30,8 = 345,8. \end{aligned}$$

3. Скорость детонации нитрата гидразина при плотности монокристалла

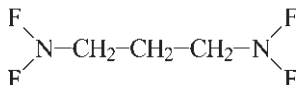
$$D_{\rho_{\text{мк}}} = 2,77 + \frac{1,63 \cdot 345,8}{95,06} = 8,70 \text{ км/с}$$

Опытное значение 8,69 км/с [108].

**Пример 7.** Максимальная скорость детонации 1,3-дифтораминопропана

1 1,3-Дифтораминопропан  $C_3H_6N_2F_4$ ,  $M_{BB} = 146,08$ ;  $\rho_{mk} = 1,26$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 2/9 = 0,22$ .

2 Расчленим структурную формулу 1,3-дифтораминопропана:



Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
CH <sub>2</sub>	3	C-C	2
N	2	C-N	2
F	4	N-F	4

$$\begin{aligned} \sum n_i F_i + \sum n_j N_j &= 3F_{CH_2} + 2F_N + 4F_F + 2N_{C-C} + 2N_{C-N} + 4N_{N-F} = \\ &= 3 \cdot (-0,9) + 2 \cdot 8,8 + 4 \cdot 7,5 + 2 \cdot 13,4 + 2 \cdot 4,4 + 4 \cdot 74,8 = 379,7 \end{aligned}$$

(при  $\alpha < 1$   $F_F = 7,5$ ; при  $b \geq e$  и  $\alpha > 0,2$   $N_{N-F} = 74,8$ ).

3. Скорость детонации

$$D_{\rho_{mk}} = 2,77 + \frac{1,26 \cdot 379,7}{146,08} = 6,04 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 5,96 км/с [117].

**Пример 8.** Скорость детонации смеси (раствора) тетрани-трометана (ТНМ) с нитрометаном (НМ) 67/33 % мас.

1. ТНМ  $CN_4O_8$ ,  $M_{BB} = 196,04$ ;  $\rho = 1,64$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 8/2 = 4,00$ ;

НМ  $CH_3NO_2$ ,  $M_{BB} = 61,04$ ;  $\rho = 1,14$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 2/3,5 = 0,57$ .

В 1000 г смеси:

$$m_1 = \frac{670}{196,04} = 3,418 \text{ молей ТНМ,}$$

$$m_2 = \frac{330}{61,04} = 5,406 \text{ молей НМ}$$

Плотность смеси:

$$\frac{1}{\rho_{см}} = \frac{0,67}{1,64} + \frac{0,33}{1,14}, \text{ отсюда } \rho_{см} = 1,433 \text{ г/см}^3$$

Кислородный коэффициент смеси:

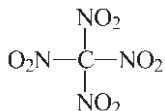
$$\alpha_{\text{см}} = \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} =$$

$$= \frac{8 \cdot 3,418 + 2 \cdot 5,406}{2(1 \cdot 3,418 + 1 \cdot 5,406) + \frac{1}{2} \cdot 3 \cdot 5,406} = 1,48.$$

2. Скорость детонации смеси по формуле (2.17)

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} (\sum m_i \delta_i).$$

а) ТНМ

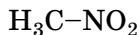


$$\delta_1 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = F_{\text{C}} + 4F_{\text{NO}_2} + 4N_{\text{C-N}} =$$

$$= 6,6 + 4 \cdot 139,2 + 4 \cdot 4,4 = 581,0$$

(так как смесь содержит ВВ — окислитель, вклад  $\text{NO}_2$  группы для каждого компонента смеси вычисляется по кислородному коэффициенту смеси — по табл. 2.1:  $F_{\text{NO}_2} = 146,1 - 229(1,48 - 1,45) = 139,2$ ).

б) НМ



$$\delta_2 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = F_{\text{CH}_3} + F_{\text{NO}_2} + N_{\text{C-N}} =$$

$$= 11,5 + 139,2 + 4,4 = 155,1$$

(содержание водорода в НМ  $\frac{3,024}{61,04} \cdot 100 = 4,9\%$ , следовательно,  $F_{\text{CH}_3} = 11,5$ ).

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{1,433}{1000} (3,418 \cdot 581,0 + 5,406 \cdot 155,1) = 6,82 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 6,86 км/с [116].

В табл. 2.5 приведены экспериментальные и рассчитанные по вышеизложенному методу скорости детонации ряда ВВ.

Таблица 2.5

## Опытные и расчетные значения скорости детонации ряда ВВ

ВВ	Формула	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
			Опыт	Расчет
Нитрометан	$\text{CH}_3\text{NO}_2$	1,14	6,30 [86]	6,35
		1,14	6,37 [119]	6,35
Тротил	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$	1,60	6,97 [93,102]	6,95
		1,63	6,94 [117]	7,03
Гексоген	$\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$	1,60	8,01 [93]	7,98
		1,60	8,03 [104]	7,98
		1,80	8,75 [108]	8,72
		1,80	8,70 [96]	8,72
Октоген	$\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_8\text{O}_8$	1,60	8,08 [93]	7,98
		1,90	9,10 [108]	9,05
		1,90	9,11 [117]	9,05
ТЭН	$\text{C}_5\text{H}_8\text{N}_4\text{O}_{12}$	1,60	7,78 [93]	7,79
		1,60	7,85 [104]	7,79
		1,77	8,27 [117]	8,36
		1,773	8,30 [120]	8,37
Тетрил	$\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_5\text{O}_8$	1,60	7,27 [93]	7,32
		1,68	7,50 [121]	7,60
		1,70	7,56 [108]	7,66
Тринитроанилин	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_6$	1,60	7,01 [93]	6,93
		1,72	7,30 [92]	7,32
ЭДНА	$\text{C}_2\text{H}_6\text{N}_4\text{O}_4$	1,66	8,24 [93]	8,31
Пикриновая кислота	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_7$	1,60	7,01 [93]	6,98
		1,71	7,35 [92]	7,35
Нитроглицерин	$\text{C}_3\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_9$	1,60	7,66 [86]	7,76
		1,60	7,70 [91,92]	7,76
		1,596	7,65 [116,120]	7,75
Тринитробензол	$\text{C}_6\text{H}_3\text{N}_3\text{O}_6$	1,60	7,02 [93]	6,92
		1,69	7,35 [93]	7,22
Тетранитрометан	$\text{CN}_4\text{O}_8$	1,639	6,37 [116]	6,37
Изопропилнитрат	$\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_3$	1,04	5,40 [108]	5,57
Диаминотринитро-бензол	$\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_5\text{O}_6$	1,79	7,52 [108]	7,54
		1,84	7,69 [118]	7,68
Триаминотринитро-бензол	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$	1,94	8,00 [108]	7,98
		1,938	7,99 [118]	7,97
Метилнитрат	$\text{CH}_3\text{NO}_3$	1,208	6,58 [116]	6,64
		1,21	6,70 [122]	6,65
Триазидотринитро-бензол	$\text{C}_6\text{N}_{12}\text{O}_6$	1,74	8,58 [108]	8,62

Продолжение табл. 2.5

ВВ	Формула	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
			Опыт	Расчет
Нитрогуанидин	$\text{CH}_4\text{N}_4\text{O}_2$	1,55	7,66 [110]	7,59
		1,62	7,94 [110]	7,89
		1,70	8,20 [108]	8,24
Пикрат аммония	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_4\text{O}_7$	1,63	7,15 [123]	7,22
ДИНА	$\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_4\text{O}_8$	1,36	7,00 [121]	7,06
		1,60	7,68 [101]	7,70
		1,64	7,80 [121]	7,82
		1,67	8,00 [92]	7,92
2,2,2-Тринитроэтил- 4,4,4-тринитробути- рат	$\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_{14}$	1,763	8,20 [92]	8,33
		1,78	8,30 [109]	8,39
Этиленгликоль- динитрат	$\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_6$	1,48	7,30 [109]	7,47
		1,49	7,33 [86]	7,50
		1,50	7,40 [91]	7,53
Бис(2,2,2-тринитро- этил)нитроамин	$\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_8\text{O}_{14}$	1,96	8,85 [92]	8,73
3, 3'-Диамино- 2,2'-4,4'-6,6'- гексаниродифенил- амин	$\text{C}_{12}\text{H}_7\text{N}_9\text{O}_{12}$	1,79	7,50 [109]	7,60
2,2'-4,4'-6,6'-Гекса- нитrostильбен	$\text{C}_{14}\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_{12}$	1,74	7,12 [109]	7,24
		1,74	7,13 [118]	7,24
Бис(2-фтор-2,2- динитроэтил)формаль	$\text{C}_5\text{H}_6\text{N}_4\text{O}_{10}\text{F}_2$	1,59	7,50 [117]	7,41
		1,60	7,46 [116]	7,44
		1,60	7,50 [84]	7,44
Тринитрохлорбензол	$\text{C}_6\text{H}_2\text{N}_3\text{O}_6\text{Cl}$	1,74	7,10 [91]	7,07
Гексаниродифенил- сульфид	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_6\text{O}_{12}\text{S}$	1,65	7,00 [109]	7,12
		1,66	7,15 [114]	7,15
		1,72	7,16 [91]	7,31
Динитробензол	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_4$	1,492	6,10 [91]	6,13
Дипентаэритрит- гексанитрат	$\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_6\text{O}_{19}$	1,59	7,41 [91]	7,54
		1,63	7,53 [109]	7,66
2,2'-4,4'-6,6'-Гекса- нитродифенил	$\text{C}_{12}\text{H}_4\text{N}_6\text{O}_{12}$	1,60	7,10 [91]	7,18
Тринитрофенетол	$\text{C}_8\text{H}_7\text{N}_3\text{O}_7$	1,60	6,80 [109]	6,74
1,8-Дифтор- 1,1,3,6,8,8-гекса- нитро-3,6-азаоктан	$\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_8\text{O}_{12}\text{F}_2$	1,82	8,50 [116]	8,57
2-Фтор-2,2-динитро- пропиловый эфир	$\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4\text{O}_9\text{F}_2$	1,645	7,67 [116]	7,81

Продолжение табл. 2.5

ВВ	Формула	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
			Опыт	Расчет
2-Фтор-2,2-динитро-этилнитрат	$C_2H_2N_3O_7F$	1,642	7,12 [116]	7,11
Диэтиленгликоль-динитрат	$C_4H_8N_2O_7$	1,384	6,60 [120]	6,58
Циклотриметилен-тринитрозоамин	$C_3H_6N_6O_3$	1,585 1,59	7,95 [120] 7,80 [94]	7,87 7,88
Этиленгликоль-динитрит	$C_2H_4N_2O_4$	1,22	6,50 [120]	6,50
2,4-Динитрофенок-сиэтилнитрат	$C_8H_7N_3O_8$	1,60 1,60	6,80 [91] 6,82 [120]	6,71 6,71
Гексанитродифенил-амин	$C_{12}H_5N_7O_{12}$	1,60	7,14 [120]	7,06
Этиленгликоль-тринитробутират	$C_{10}H_{12}N_6O_{16}$	1,63	7,34 [109]	7,36
Бис(2,2-динитро-пропил)нитрамин	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	1,73	8,10 [109]	8,26
Трис-( $\beta,\beta,\beta$ -тринитро-этиламино)-1,3,5-триазин	$C_9H_9N_{15}O_{18}$	1,54	7,70 [127]	7,58
Тетранитрат-2,2,5,5-тетраметилолцикло-пентанон	$C_9H_{12}N_4O_{13}$	1,59	7,20 [109]	7,29
Маннитгексанитрат	$C_6H_{12}N_6O_{18}$	1,75	8,26 [120]	8,29
Тетранитрогликоль-урил	$C_4H_2N_8O_{10}$	2,01	9,15 [109]	9,00
Нитроизобутил-глицеринтринитрат	$C_4H_6N_4O_{11}$	1,64	8,19 [93]	8,11
Динитропропил-тринитробутират	$C_7H_9N_5O_{12}$	1,68	7,63 [109]	7,75
Пропиленгликоль-динитрат	$C_3H_6N_2O_6$	1,37	6,75 [122]	6,78
Динитрогликольурил	$C_4H_4N_6O_6$	1,94	8,15 [109]	8,29
Тринитроанизол	$C_7H_5N_3O_7$	1,61	6,80 [120]	6,91
Динитродиметил-оксамид	$C_4H_6N_4O_6$	1,52	7,10 [120]	6,92
Этилендиамин-динитрат	$C_2H_{10}N_4O_6$	1,60	7,67 [109]	7,67
Бистринитроэтил-мочевина	$C_5H_6N_8O_{13}$	1,86	9,00 [92]	8,90



Продолжение табл. 2.5

ВВ	Формула	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
			Опыт	Расчет
1,3-Дифторамино-пропан	$C_3H_6N_2F_4$	1,26	5,96 [117]	6,04
1,4-Дифторамино-бутен	$C_4H_6N_2F_4$	1,22	6,00 [125]	6,01
Метилдинитрамин	$CH_3N_3O_4$	1,40	8,00 [126]	8,00
Термол	$C_{12}H_5N_5O_{10}S$	1,78	7,20 [124]	7,20
Z-такот	$C_{12}H_4N_8O_8$	1,85	7,25 [109]	7,25
Гексанитроэтан	$C_2N_6O_{12}$	1,86	7,58 [93]	7,52
Тринитрат метриола	$C_5H_9N_3O_9$	1,46	7,18 [93]	7,16
Азид гидразина	$H_5N_5$	1,26	7,60 [111]	7,59
Перхлорат гуанидина	$CH_6N_3O_4Cl$	1,67	7,15 [127]	7,32
Перхлорат метиламина	$CH_6NO_4Cl$	1,68	7,54 [127]	7,40
Смесь тетранитрометана с нитрометаном, % мас.: 93/7 85/15 81/19		1,595 1,542 1,512	6,67 [116] 6,76 [116] 6,77 [116]	6,56 6,57 6,53
Смесь тетранитрометана с 1,5-дифтораминопропеном: 75/25 60/40		1,52 1,45	7,40 [125] 7,30 [125]	7,47 7,21
Гексоген / тротил: 50/50 60/40 64/36 64/36 64/36 77/23		1,66 1,69 1,40 1,68 1,717 1,754	7,58 [116] 7,90 [91] 6,93 [121] 7,83 [121] 7,99 [119] 8,25 [119]	7,65 7,89 7,04 7,90 8,01 8,29
Октоген / тротил: 76/24 78/22		1,81 1,821	8,48 [108] 8,48 [119]	8,45 8,52
Тетрил / тротил: 70/30		1,60	7,30 [123]	7,25
Пикриновая кислота / тротил: 52/48		1,62	6,95 [123]	7,05
ТЭН / гексоген / тротил: 27/43/30		1,70	8,06 [108]	7,96

Окончание табл. 2.5

ВВ	Формула	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с	
			Опыт	Расчет
Нитротриазолон (NTO)	$C_2H_2N_4O_3$	1,91	8,12 [214]	7,95
1,3,3'-Тринитроазетидин (TNAZ)	$C_3H_4N_4O_6$	1,83	8,68 [67]	8,84
4,4'-Динитро-3,3'-диазенофуроксан (DNAF)	$C_4N_8O_8$	1,94	9,70 [213, 214, 68, 67]	9,73
3-Пикириламино-1,2,4-триазол (РАТО)	$C_8H_4N_7O_6$	1,94	7,85 [61]	7,92
2,6-Бис(пикрил-амино)-3,5-динитро-пиридин (РУХ)	$C_{17}H_9N_{11}O_{16}$	1,75	7,45 [61]	7,42
Гексанитрогликоль-урил (ННТДД)	$C_6H_4O_{14}N_{12}$	2,07	9,70 [61]	9,50
1,3,5,5-Тетранитро-гексагидро-пиримидин (DNNC)	$C_4H_6N_6O_8$	1,82	8,73 [61]	8,76
3-Амино-5-нитро-1,2,4 триазол (АНТА)	$C_2H_3N_5O_2$	1,82	8,46 [61]	8,26
3,3'-Динитро-4,4'-азоксифуразан	$C_4N_8O_7$	1,78	9,02 [67]	8,85
5,7-Диамино-4,6-динитробензо-фуроксан (CL-14)	$C_6H_4N_6O_6$	1,91	8,05 [61]	8,18
Октанитро-диазено-бензоамино-триазол (BTDAONAB)	$C_{16}H_6N_{18}O_{16}$	1,97	8,60 [65]	8,75
3,3'-Диамино-4,4'-азоксифуразан (DAAF)	$C_4H_4N_8O_3$	1,685	7,93 [67]	7,70
2,4,6-Тринитро-пиридин (TNPy)	$C_5H_2N_4O_6$	1,66	7,47 [67]	7,57
2,4,6-Тринитро-1,3,5-триазин	$C_3N_6O_6$	1,98	9,28 [61]	9,36
5-Нитро-4,6-бис(5-амино-3-нитро-1Н-1,2,4-триазол-1-ил)пиримидин (DANTNP)	$C_7H_4N_{13}O_6$	1,86	8,20 [61]	8,34

### 2.1.3. МЕТОД РАСЧЕТА СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИИ КОМПЛЕКСНЫХ ВВ С КАТИОНАМИ МЕТАЛЛОВ И АНИОНАМИ-ОКИСЛИТЕЛЯМИ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

Комплексные ИВВ с катионами металлов и анионами-окислителями в последние годы нашли широкое применение в различных областях науки и техники. Одной из причин возникшего в последние годы интереса к энергонасыщенным координационным соединениям является ужесточение требований к безопасности проведения взрывных работ. Безопасность повышается: при замене в капсюлях-детонаторах высокочувствительных штатных инициирующих ВВ (ИВВ) на менее чувствительные энергонасыщенные координационные соединения; при увеличении надежности как детонатора, так и линии связи генератора энергии с детонатором, не передающей и не генерирующей ложные инициирующие импульсы при возникновении аварийных ситуаций.

В ряде стран в конце XX века были проведены работы по получению и изучению свойств комплексных солей d-металлов с внешней сферой общей формулы  $M_x(L)_y(An)_z$  (где M — катион d-металла, L — лиганд, An — анион кислоты, чаще окислителя) как более безопасных по сравнению с традиционными ИВВ. Химическая структура комплексных солей позволяет в широких пределах регулировать их физико-химические, энергетические и эксплуатационные характеристики и создавать энергонасыщенные соединения, обладающие высокой инициирующей способностью и в то же время относительной безопасностью в обращении [128–135].

Над синтезом и изучением свойств экологически безопасных «зеленых» ИВВ, не содержащих свинца, активно работают лаборатории во всех развитых странах.

Светочувствительные координационные энергонасыщенные соединения и составы являются перспективными для создания безопасных оптических средств инициирования. Наиболее известным является вещество BNCP, которое нашло практическое применение в системах инициирования в США.

Для успешного использования известных соединений, а также для прогнозирования и целенаправленного синтеза новых комплексных ИВВ необходимо знать их скорости детонации. Энергетические координационные соединения (энергонасыщенные металлокомплексы) имеют специфическую химическую структуру: наличие различного вида лигандов, катионов разных металлов, анионов, молекул  $NH_3$ ,  $H_2N-NH_2$ ,  $H_2O$  и др.

Анализ известных методов расчета скорости детонации показал, что они не могут быть прямо использованы из-за указанного специфического состава комплексного соединения.

Данный метод предложен А. А. Котоминым и М. А. Илюшиным в работах [136, 137]. Основные положения и использование метода изложены также в работах [64, 99, 100, 138].

Сущность метода заключается в расчленении молекулы энергонасыщенного металлокомплекса на «активную» часть (анион-окислитель и лиганды) и «инертную» часть (катион металла, кристаллизационная вода) и объединении на этой основе аддитивного метода расчета параметров детонации ВВ по вкладам химических связей и групп (для индивидуальных ВВ) (раздел 2.1.2) и метода расчета параметров детонации для ВВ с инертными добавками [87, 88, 139–141]. Последний применим для смесей ВВ с различными видами инертных добавок (органические соединения, металлы, оксиды, соли и др.). В рамках предложенной модели катион комплексного соединения отнесен к ультрадисперсной инертной металлической добавке. Лиганд в зависимости от вида аниона может быть активным или инертным. В случае, когда имеется анион-окислитель, например, перхлоратный анион, лиганд окисляется и, таким образом, выступает как компонент «активной» части. Кристаллизационная вода является инертной добавкой. Эта модель комплексного соединения не учитывает химическую связь между анионом и катионом, и это вносит незначительную погрешность в расчет.

Данный метод разработан на основе систематизированного экспериментального материала, включающего комплексные соединения различных классов, содержащих С, Н, N, О, Cl, S элементы, различные катионы металлов и анионы-окислители  $[\text{ClO}_4]^-$ ,  $[\text{NO}_3]^-$  и  $[\text{C}(\text{NO}_2)_3]^-$ . Средняя погрешность расчета скорости детонации составила  $\pm 140$  м/с.

В этом разделе подробно изложена схема расчета и представлены характерные примеры расчета.

а) *Расчет скорости детонации «взрывчатой» части комплексного соединения при плотности  $1,7 \text{ г/см}^3$*

Принимаем условно значение плотности «взрывчатой» части  $\rho = 1,7 \text{ г/см}^3$ , исходя из того, что для большинства органических ВВ плотность колеблется в пределах  $1,4\text{--}2,0 \text{ г/см}^3$ . Наше допущение не вносит заметную погрешность, так как далее мы рассчитываем для «взрывчатой» части скорость детонации при ее истинной парциальной плотности в заряде.

Скорость детонации «взрывчатой» части  $D_{\text{вч}}$  (км/с) при плотности  $1,7 \text{ г/см}^3$  рассчитываем по следующей формуле:

$$D_{\text{вч}} = 2,77 + \frac{\rho}{M_{\text{вч}}} \left( \sum n_i F_i + \sum n_j N_j \right), \quad (2.28)$$

где  $M_{\text{вч}}$  — молекулярная масса «взрывчатой» части;  $\rho$  — условная плотность «взрывчатой» части ( $1,7 \text{ г/см}^3$ );  $\sum n_i F_i$  — сумма вкладов групп «взрывчатой» части молекулы комплексного ВВ ( $F_i$  — значение вклада группы,  $n_i$  — число групп данного вида);  $\sum n_j N_j$  — сумма вкладов химических связей между группами во «взрывчатой» части молекулы комплексного ВВ (связи внутри групп учтены в  $F_i$ ) ( $N_j$  — значение вклада связи;  $n_j$  — число связей данного вида).

Значения вкладов групп и химических связей приведены в табл. 2.1 ( $\alpha$  — кислородный коэффициент «взрывчатой» части состава  $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d\text{F}_e\text{Cl}_f\text{S}_g$  молекулы комплексного ВВ:  $\alpha = \frac{c + e/2 + f/2}{2a + b/2}$ ).

б) *Расчет скорости детонации «взрывчатой» части комплексного ВВ при ее парциальной плотности в заряде*

Парциальную плотность «взрывчатой части» комплексного ВВ в заряде ( $\rho_{\text{вч}}$ ,  $\text{г/см}^3$ ) рассчитываем по формуле:

$$\rho_{\text{вч}} = \alpha_{\text{вч}} \rho_0, \quad (2.29)$$

где  $\rho_0$  — плотность заряда комплексного ВВ,  $\text{г/см}^3$ ;  $\alpha_{\text{вч}}$  — массовая доля «взрывчатой части» в комплексном ВВ, которая определяется из соотношения:

$$\alpha_{\text{вч}} = \frac{M_{\text{вч}}}{M_{\text{ВВ}}}, \quad (2.30)$$

где  $M_{\text{ВВ}}$  — молекулярная масса комплексного ВВ.

Скорость детонации «взрывчатой части» при плотности  $\rho_{\text{вч}}$  находится из линейной зависимости:

$$D_{\rho_{\text{вч}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{вч}}), \text{ км/с}, \quad (2.31)$$

где  $D_{1,7}$  — скорость детонации «взрывчатой» части при плотности  $1,7 \text{ г/см}^3$  (формула 2.28);  $M$  — коэффициент, который рассчитывается для «взрывчатой» части с элементным составом  $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d\text{F}_e\text{Cl}_f$  по следующей формуле:

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2(e + f)}{0,1M_{\text{вч}}} \quad (2.32)$$

(при содержании  $\text{H} \leq 3,5\%$   $k_2 = 3,0$ ; при  $\text{H} > 3,5\%$   $k_2 = 1,3$ ).

в) *Учет влияния «инертной» части. Расчет скорости детонации комплексного ВВ при плотности заряда*

Заключительным этапом расчета является определение скорости детонации комплексного ВВ ( $D_{ВВ}$ , км/с) по следующей формуле:

$$D_{ВВ} = D_{рвч} + \sum \Delta D_d, \quad (2.33)$$

где  $\sum \Delta D_d$ , км/с — изменение скорости детонации за счет наличия «инертных» элементов (добавок) в молекуле соединения.

Для таких «инертных» частей как лиганды, не имеющих в своем составе нитро, нитраминных, нитратных, азидных и других эксплозифорных групп (при отсутствии в молекуле металлокомплекса анионов-окислителей) или кристаллизационная вода величина  $\Delta D_d$  определяется по формуле:

$$\Delta D_d = 10^{-4} A_d^2 \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_d}, \quad (2.34)$$

где  $\beta$  — массовая доля инертной части в молекуле комплексного ВВ;  $\rho_d$  — плотность инертной части, г/см<sup>3</sup>;  $A_d$  — количество грамм-атомов элементов в 1 литре инертной части, г-ат/л. Параметр  $A_d$  коррелирует со скоростью ударной волны в материале инертной части.

Параметр  $A_d$  рассчитывается по формуле:

$$A_d = 10^3 \frac{N}{M_d} \rho_d, \quad (2.35)$$

где  $N$  — число атомов в инертной части молекулы металлокомплекса;  $M_d$  — молекулярная масса инертной части (добавки).

Для катионов комплексных ВВ  $\Delta D_d$  рассчитывается по формуле:

$$\Delta D_d = a(b - \rho_d) \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_d}, \text{ км/с}, \quad (2.36)$$

где  $\rho_d$  — плотность катиона (металла), г/см<sup>3</sup>;  $\beta$  — массовая доля катиона в молекуле комплексного ВВ;  $a$  — коэффициент, равный 1,125 км/с / г/см<sup>3</sup>;  $b$  — коэффициент, равный 4,0 г/см<sup>3</sup> (коэффициенты  $a$ ,  $b$  взяты для ультрадисперсных металлов с размером частиц менее 10 мкм [87, 88]).

г) *Общая схема расчета*

Расчет скорости детонации комплексного ВВ по предложенному методу проводится следующим образом:

1) составляются эмпирическая и структурная формулы комплексного ВВ, вычисляется молекулярная масса ВВ;

2) молекула комплексного ВВ расчленяется на «взрывчатую» часть и инертные добавки. Вычисляются: молекулярная масса, кислородный коэффициент, массовая доля и парциальная плотность «взрывчатой» части (формулы 2.29, 2.30);

3) «взрывчатая» часть расчленяется на группы и химические связи между ними, приведенные в табл. 2.1, вычисляется сумма вкладов групп и связей с учетом кислородного коэффициента «взрывчатой» части;

4) рассчитывается скорость детонации «взрывчатой» части при плотности 1,7 г/см<sup>3</sup> по формуле (2.28);

5) рассчитывается коэффициент  $M$  «взрывчатой» части с учетом содержания в ней водорода по формуле (2.32);

6) вычисляется скорость детонации «взрывчатой» части при ее парциальной плотности в заряде по формуле (2.31);

7) вычисляется сумма вкладов «инертных» элементов в молекуле комплексного ИВВ ( $\sum \Delta D_d$ ) по формулам (2.34, 2.35, 2.36);

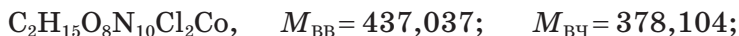
8) рассчитывается скорость детонации комплексного ИВВ при плотности заряда по формуле (2.33).

### Примеры расчета скорости детонации комплексных ИВВ

**Пример 1.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората пентааммин(5-цианотетразолато)кобальта (III) (СР) при плотности  $\rho_0$  1,50; 1,65 и 1,86 г/см<sup>3</sup>

а)  $\rho_0 = 1,50$  г/см<sup>3</sup>.

1. Перхлорат пентааммин(5-цианотетразолато)кобальта (III) (СР)

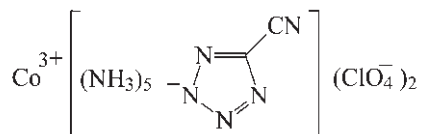


кислородный коэффициент, массовая доля и парциальная плотность «взрывчатой» части:

$$\alpha = \frac{c + f/2}{2a + b/2} = \frac{9}{4 + 7,5} = 0,78; \quad \alpha_{\text{ВЧ}} = \frac{M_{\text{ВЧ}}}{M_{\text{ВВ}}} = \frac{378,104}{437,037} = 0,865;$$

$$\rho_{\text{ВЧ}} = \alpha_{\text{ВЧ}} \rho_0 = 0,865 \cdot 1,50 = 1,298 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчленяем структурную формулу СР



на «взрывчатую» (анионы и лиганды) и «инертную» (катион) части, а «взрывчатую» часть — на группы и химические связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группа	$F_i$	$n_i$	Связь	$N_j$	$n_j$
N	8,8	4	C–N	4,4	1
C	6,6	1	C–C	13,4	1
CN	169,7	1	C=N	39,6	1
NH <sub>3</sub>	34,8	5	N–N	52,1	2
ClO <sub>4</sub>	278,7	2	N=N	49,8	1

Вычисляем сумму вкладов групп и связей:

$$\sum n_i F_i + \sum n_j F_j = 4 \cdot 8,8 + 6,6 + 169,7 + 5 \cdot 34,8 + 2 \cdot 278,7 + 4,4 + 13,4 + 39,6 + 2 \cdot 52,1 + 49,8 = 1154,3$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части СР при плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1,7(\sum n_i F_i + \sum n_j F_j)}{M_{\text{ВЧ}}} = 2,77 + \frac{1,7 \cdot 1154,3}{378,104} = 7,960 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$ :

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2f}{0,1M_{\text{ВЧ}}} =$$

$$= \frac{1,1 \cdot 2 - 1,3 \cdot 15 + 7,6 \cdot 8 + 8,1 \cdot 10 + 7,2 \cdot 2}{0,1 \cdot 378,104} = 3,67 \text{ км/с/г/см}^3$$

(содержание Н во «взрывчатой» части СР  $\frac{15,117}{378,104} \cdot 100\% = 3,99\%$ , следовательно  $k_2 = 1,3$ ).

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части СР при парциальной плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ :

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{ВЧ}}) = 7,960 - 3,67(1,7 - 1,298) = 6,485 \text{ км/с}$$

6. Рассчитываем скорость детонации комплексного ИВВ с учетом влияния «инертных» элементов. В СР инертным элементом является Со.

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \sum \Delta D_d;$$

$$\Delta D_d = a(b - \rho_d) \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_d}; \quad \beta = \frac{58,933}{437,037} = 0,135;$$



$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,135 \cdot 1,50}{8,9} = -0,125 \text{ км/с};$$

$$D_{\text{ВВ}} = 6,485 - 0,125 = 6,36 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $D_{1,50} = 6,28 \text{ км/с}$  [132].

б)  $\rho_0 = 1,65 \text{ г/см}^3$ ; при этом  $\rho_{\text{ВЧ}} = 1,65 \cdot 0,865 = 1,427 \text{ г/см}^3$ ;

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{ВЧ}}) = 7,960 - 3,67(1,7 - 1,427) = 6,958 \text{ км/с};$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,135 \cdot 1,65}{8,9} = -0,138 \text{ км/с},$$

$$\text{тогда } D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \sum \Delta D_{\text{д}} = 6,958 - 0,138 = 6,820 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $D_{1,65} = 6,821 \text{ км/с}$  [132].

в)  $\rho_0 = 1,86 \text{ г/см}^3$ , тогда  $\rho_{\text{ВЧ}} = 1,86 \cdot 0,865 = 1,609 \text{ г/см}^3$ .

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = 7,960 - 3,67(1,7 - 1,609) = 7,626 \text{ км/с};$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,135 \cdot 1,86}{8,9} = -0,156 \text{ км/с};$$

$$D_{\text{ВВ}} = 7,626 - 0,156 = 7,470 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $D_{1,86} = 7,579 \text{ км/с}$  [132].

**Пример 2.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората аквапентаамминкобальта (III) при плотности  $1,702 \text{ г/см}^3$

1. Перхлорат аквапентаамминкобальта (III)

$$\text{H}_{17}\text{O}_{13}\text{N}_5\text{Cl}_3\text{Co}, \quad M_{\text{ВВ}} = 460,445; \quad M_{\text{ВЧ}} = 383,497;$$

кислородный коэффициент «взрывчатой» части

$$\alpha = \frac{c + f / 2}{2a + b / 2} = \frac{13,5}{7,5} = 1,80;$$

$$\alpha_{\text{ВЧ}} = \frac{M_{\text{ВЧ}}}{M_{\text{ВВ}}} = \frac{383,497}{460,445} = 0,833;$$

$$\rho_{\text{ВЧ}} = \alpha_{\text{ВЧ}} \cdot \rho_0 = 0,833 \cdot 1,702 = 1,418 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчленим структурную формулу комплекса на «взрывчатую» (анионы и лиганды) и «инертную» (катион и вода) части, а «взрывчатую» часть — на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:



Группа	$F_i$	$n_i$
$\text{NH}_3$	34,8	5
$\text{ClO}_4$	227,2	3

Вычисляем сумму вкладов групп:

$$\sum n_i F_i = 5 \cdot 34,8 + 3 \cdot 227,2 = 174 + 681,6 = 855,6.$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного соединения при заданной плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1,7(\sum n_i F_i + \sum n_j N_j)}{M_{\text{ВЧ}}} = 2,77 + \frac{1,7 \cdot 855,6}{383,497} = 6,563 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$ :

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2f}{0,1M_{\text{ВЧ}}} =$$

$$= \frac{-1,3 \cdot 15 + 7,6 \cdot 12 + 8,1 \cdot 5 + 7,2 \cdot 3}{0,1 \cdot 383,497} = 3,62 \text{ км/с / г/см}^3$$

(содержание Н во «взрывчатой» части комплекса  $\frac{15,117}{383,497} \cdot 100\% = 3,94\%$ , следовательно,  $k_2 = 1,3$ ).

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплекса при парциальной плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ :

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{ВЧ}}) = 6,563 - 3,62(1,7 - 1,418) = 5,542 \text{ км/с.}$$

6. Рассчитываем скорость детонации комплексного соединения с учетом влияния «инертных» элементов. Инертными элементами являются Со и  $\text{H}_2\text{O}$ .

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \sum \Delta D_{\text{д}}; \quad \sum \Delta D_{\text{д}} = \Delta D_{\text{Со}} + \Delta D_{\text{H}_2\text{O}};$$

$$\Delta D_{\text{Со}} = a(b - \rho_{\text{Со}}) \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_{\text{Со}}}; \quad \beta = \frac{58,933}{460,445} = 0,128;$$

$$\Delta D_{Co} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,128 \cdot 1,702}{8,9} = -0,135 \text{ км/с};$$

$$A_{H_2O} = 10^3 \frac{N}{M_d} \rho_d = 10^3 \frac{3}{18,015} 1,0 = 166,5 \text{ г-ат/л};$$

$$\beta_{H_2O} = \frac{18,015}{460,445} = 0,039;$$

$$\Delta D_d = 10^{-4} A_d^2 \frac{\beta \rho_0}{\rho_d} = 10^{-4} 166,5^2 \frac{0,039 \cdot 1,702}{1,0} = 0,184 \text{ км/с};$$

$$D_{BB} = 5,542 - 0,135 + 0,184 = 5,591 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $D_{1,702} = 5,69 \text{ км/с}$  [132].

**Пример 3.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората аммоний пентааммин(5-нитраминотетразолата) кобальта (III) при плотности  $1,523 \text{ г/см}^3$

1. Перхлорат аммоний пентааммин(5-нитраминотетразолата) кобальта (III)

$$CH_{19}O_{10}N_{12}Cl_2Co, \quad M_{BB} = 489,069; \quad M_{BЧ} = 430,136;$$

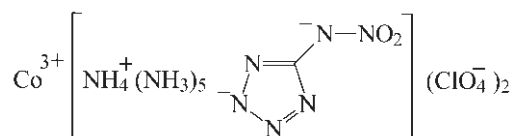
кислородный коэффициент «взрывчатой» части

$$\alpha = \frac{c + f/2}{2a + b/2} = \frac{11}{11,5} = 0,96;$$

$$\alpha_{BЧ} = \frac{M_{BЧ}}{M_{BB}} = \frac{430,136}{489,069} = 0,879;$$

$$\rho_{BЧ} = \alpha_{BЧ} \cdot \rho_0 = 0,879 \cdot 1,523 = 1,339 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчленим структурную формулу комплекса на «взрывчатую» и «инертную» части



Группа	$F_i$	$n_i$	Связь	$N_j$	$n_j$
C	6,6	1	C–N	4,4	2
N	8,8	5	C=N	39,6	1
NO <sub>2</sub>	175,8	1	N–N	52,1	3
NH <sub>3</sub>	34,8	5	N=N	49,8	1
NH <sub>4</sub>	43,2	1	$\begin{array}{c}   \quad \quad   \\ [-\text{N}-]^+ \quad \text{N}-\text{R} \\   \quad \quad   \\ \text{NO}_2 \end{array}$	23,0	1
ClO <sub>4</sub>	278,7	2			

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 6,6 + 44,0 + 175,8 + 174,0 + 43,2 + 557,4 + \\ + 8,8 + 39,6 + 156,3 + 49,8 + 23,0 = 1278,5.$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного ИВВ при плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1278,5 \cdot 1,7}{430,136} = 7,823 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$  (содержание Н = 4,45 %)

$$M = \frac{1,1 - 1,3 \cdot 19 + 7,6 \cdot 10 + 8,1 \cdot 12 + 7,2 \cdot 2}{0,1 \cdot 430,136} = 3,81 \text{ км/с / г/см}^3.$$

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного ВВ при парциальной плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ .

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{ВЧ}}) = 7,823 - 3,81(1,7 - 1,339) = 6,448 \text{ км/с.}$$

6. Рассчитываем скорость детонации комплексного ИВВ с учетом влияния «инертных» элементов:

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \sum \Delta D_{\text{д}}.$$

В этом случае инертным элементом является катион металла

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_{\text{д}}}; \quad \beta = \frac{58,933}{489,069} = 0,121;$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,121 \cdot 1,523}{8,9} = -0,114 \text{ км/с;}$$

$$D_{\text{ВВ}} = 6,448 - 0,114 = 6,334 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_{1,523} = 6,32 \text{ км/с}$  [132].

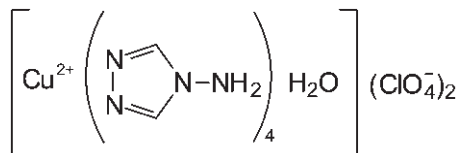
**Пример 4.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората аква-тетра(4-амино-1,2,4-триазоло)меди (II) при плотности 1,60 г/см<sup>3</sup>

1. Перхлорат аква-тетра(4-амино-1,2,4-триазоло)меди (II)

$$\text{C}_8\text{H}_{18}\text{O}_9\text{N}_{16}\text{Cl}_2\text{Cu}, \quad M_{\text{ВВ}} = 616,789; \quad M_{\text{ВЧ}} = 535,234; \quad \alpha_{\text{ВЧ}} = 0,868; \\ \rho_{\text{ВЧ}} = 1,389 \text{ г/см}^3$$

$$\text{Кислородный коэффициент «взрывчатой» части } \alpha = \frac{8+1}{16+8} = 0,375.$$

2. Расчленим структурную формулу комплекса на «взрывчатую» и «инертную» части, а «взрывчатую» часть — на группы и связи между ними:



Группа	$F_i$	$n_i$	Связь	$N_j$	$n_j$
CH	-8,4	8	C-N	4,4	8
N	8,8	12	C=N	39,6	8
NH <sub>2</sub>	21,4	4	N-N	52,1	8
ClO <sub>4</sub>	309,8	2			

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 8(-8,4) + 12 \cdot 8,8 + 4 \cdot 21,4 + 2 \cdot 309,8 + 8 \cdot 4,4 + \\ + 8 \cdot 39,6 + 8 \cdot 52,1 = 1512,4.$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного соединения при заданной плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1,7 \cdot 1512,4}{535,234} = 7,57 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$  (содержание Н = 3,01 %):

$$M = \frac{1,1 \cdot 8 - 3,0 \cdot 16 + 7,6 \cdot 8 + 8,1 \cdot 16 + 7,2 \cdot 2}{0,1 \cdot 535,234} = 3,09 \text{ км/с / г/см}^3.$$

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части ВВ при плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ :

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = 7,57 - 3,09(1,7 - 1,389) = 6,61 \text{ км/с.}$$

6. Рассчитываем скорость детонации ВВ с учетом влияния «инертной» части: катиона меди и кристаллизационной воды:

$$\beta_{\text{Cu}} = \frac{63,54}{616,789} = 0,103;$$

$$\Delta D_{\text{Cu}} = 1,125(4,0 - 8,96) \frac{0,103 \cdot 1,60}{8,96} = -0,10 \text{ км/с};$$

$$A_{\text{H}_2\text{O}} = 10^3 \frac{N}{M_{\text{д}}} \rho_{\text{д}} = 10^3 \frac{3}{18,015} 1,0 = 166,5 \text{ г-ат/л};$$

$$\beta_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{18,015}{616,789} = 0,029;$$

$$\Delta D_{\text{H}_2\text{O}} = 10^{-4} A_{\text{д}}^2 \frac{\beta \rho_0}{\rho_{\text{д}}} = 10^{-4} 166,5^2 \frac{0,029 \cdot 1,60}{1,0} = 0,13 \text{ км/с};$$

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \Delta D_{\text{Cu}} + \Delta D_{\text{H}_2\text{O}} = 6,61 - 0,10 + 0,13 = 6,64 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $D_{1,624} = 6,61 \pm 0,15 \text{ км/с}$  [131].

**Пример 5.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората пентааммин(5-нитротетразolato)кобальта (III) при плотности  $1,613 \text{ г/см}^3$

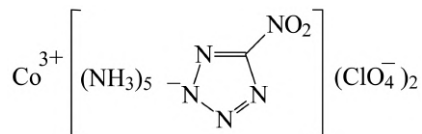
1. Перхлорат пентааммин(5-нитротетразolato)кобальта (III)

$$\text{CH}_{15}\text{O}_{10}\text{N}_{10}\text{Cl}_2\text{Co}, \quad M_{\text{ВВ}} = 457,024; \quad M_{\text{ВЧ}} = 398,091; \quad \alpha_{\text{ВЧ}} = 0,871;$$

$$\rho_{\text{ВЧ}} = 1,405 \text{ г/см}^3.$$

$$\text{Кислородный коэффициент «взрывчатой» части } \alpha = \frac{10+1}{2+7,5} = 1,16.$$

2. Расчленим структурную формулу комплекса на «взрывчатую» и «инертную» части, а «взрывчатую» часть — на группы и связи между ними:



Группа	$F_i$	$n_i$	Связь	$N_j$	$n_j$
C	6,6	1	C–N	4,4	2
N	8,8	4	C=N	39,6	1
NO <sub>2</sub>	165,24	1	N–N	52,1	2
NH <sub>3</sub>	34,8	5	N=N	49,8	1
ClO <sub>4</sub>	269,2	2			

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 6,6 + 4 \cdot 8,8 + 165,24 + 5 \cdot 34,8 + 2 \cdot 269,2 + \\ + 2 \cdot 4,4 + 39,6 + 2 \cdot 52,1 + 49,8 = 1121,84.$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного соединения при заданной плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1,7 \cdot 1121,84}{398,091} = 7,561 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$  (содержание Н = 3,79 %):

$$M = \frac{1,1 - 1,3 \cdot 15 + 7,6 \cdot 10 + 8,1 \cdot 10 + 7,2 \cdot 2}{0,1 \cdot 398,091} = 3,84 \text{ км/с / г/см}^3.$$

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части ВВ при плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ :

$$D_{\rho_{\text{ВЧ}}} = 7,561 - 3,84(1,7 - 1,405) = 6,428 \text{ км/с.}$$

6. Рассчитываем скорость детонации ВВ с учетом влияния кобальта

$$\beta = \frac{58,933}{457,024} = 0,129;$$

$$\Delta D_d = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,129 \cdot 1,613}{8,9} = -0,129 \text{ км/с;}$$

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{ВЧ}}} + \Delta D_d = 6,428 - 0,129 = 6,299 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_{1,613} = 6,450 \text{ км/с}$  [131].

**Пример 6.** Скорость детонации комплексного соединения перхлората аммоний пентааммин(5-динитрометилтетразолато) кобальта (III) при плотности 1,48 г/см<sup>3</sup>

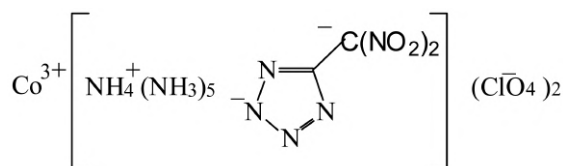
1. Перхлорат аммоний пентааммин(5-динитрометилтетразолато) кобальта (III)  $\text{C}_2\text{H}_{19}\text{O}_{12}\text{N}_{12}\text{Cl}_2\text{Co}$ ,  $M_{\text{ВВ}} = 533,085$ ;  $M_{\text{ВЧ}} = 474,152$ ;

кислородный коэффициент «взрывчатой» части  $\alpha = \frac{c+f/2}{2a+b/2} = \frac{13}{13,5} = 0,96$ :

$$\alpha_{\text{ВЧ}} = \frac{M_{\text{ВЧ}}}{M_{\text{ВВ}}} = \frac{474,152}{533,085} = 0,889;$$

$$\rho_{\text{ВЧ}} = \alpha_{\text{ВЧ}} \cdot \rho_0 = 0,889 \cdot 1,48 = 1,316 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчленим структурную формулу комплекса на «взрывчатую» и «инертную» части



Группа	$F_i$	$n_i$	Связь	$N_j$	$n_j$
C	6,6	2	C—N	4,4	3
N	8,8	4	C=N	39,6	1
NO <sub>2</sub>	175,8	2	N—N	52,1	2
NH <sub>3</sub>	34,8	5	N=N	49,8	1
NH <sub>4</sub>	43,2	1	C—C	13,4	1
ClO <sub>4</sub>	278,7	2	$\begin{array}{c}   \\ \text{—N}^{\oplus}\text{—} \\   \end{array} \text{ClO}_4^{\ominus}$	32,7	1

$$\begin{aligned} \sum n_i F_i + \sum n_j N_j &= 6,6 \cdot 2 + 8,8 \cdot 4 + 175,8 \cdot 2 + 34,8 \cdot 5 + 43,2 + 278,7 \cdot 2 + \\ &+ 4,4 \cdot 3 + 39,6 + 52,1 \cdot 2 + 49,8 + 13,4 + 32,7 = 1427,5. \end{aligned}$$

3. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного ИВВ при плотности 1,7 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{1,7} = 2,77 + \frac{1427,5 \cdot 1,7}{474,152} = 7,888 \text{ км/с.}$$

4. Рассчитываем коэффициент  $M$  (содержание Н = 4,04 %):

$$M = \frac{1,1 \cdot 2 - 1,3 \cdot 19 + 7,6 \cdot 12 + 8,1 \cdot 12 + 7,2 \cdot 2}{0,1 \cdot 474,152} = 3,80 \text{ км/с / г/см}^3.$$

5. Рассчитываем скорость детонации «взрывчатой» части комплексного ВВ при парциальной плотности  $\rho_{\text{ВЧ}}$ :



$$D_{\rho_{\text{вч}}} = D_{1,7} - M(1,7 - \rho_{\text{вч}}) = 7,888 - 3,80(1,7 - 1,316) = 6,429 \text{ км/с.}$$

6. Рассчитываем скорость детонации комплексного ИВВ с учетом влияния «инертных» элементов:

$$D_{\text{ВВ}} = D_{\rho_{\text{вч}}} + \sum \Delta D_{\text{д}}.$$

В этом случае инертным элементом является катион металла

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \cdot \rho_0}{\rho_{\text{д}}}; \quad \beta = \frac{58,933}{533,085} = 0,111;$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 1,125(4,0 - 8,9) \frac{0,111 \cdot 1,48}{8,9} = -0,102 \text{ км/с;}$$

$$D_{\text{е}} = 6,429 - 0,102 = 6,327 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_{1,48} = 6,32 \text{ км/с}$  [131].

#### 2.1.4. ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИИ FOX-7 ОТ ПЛОТНОСТИ ЗАРЯДА

В последние годы опубликован ряд работ по исследованию 1,1-диамино-2,2-динитроэтилена (FOX-7), имеющего низкую чувствительность к механическим воздействиям и ударной волне, а также малую вероятность несанкционированного перехода горения в детонацию [142]. Это определяет перспективу его применения в зарядах повышенной безопасности, например, в перфораторах для нефтяных и газовых скважин. Однако детонационная способность FOX-7 мало изучена. Кроме того, приводятся противоречивые данные по скоростям детонации.

В наших работах [143–146] исследована зависимость критических диаметров детонации FOX-7 от его дисперсности в широком диапазоне, а также зависимость скорости детонации от плотности зарядов в большом интервале плотностей. Результаты исследования детонационной способности FOX-7 приведены в разделе 2.3.7. В данном разделе изложены результаты по его скоростям детонации.

Скорости детонации определяли с помощью цифрового осциллографа с разрешающей способностью 5 нс. Для обеспечения режима детонации, близкого к идеальному, заряды FOX-7 в интервале плотностей 1,10–1,60 г/см<sup>3</sup> формировали прессованием в стальные трубы диаметром 40 мм, толщиной стенки 3,2 мм и длиной 200 мм. При этом использовали электроконтактные датчики. В интервале плотностей 1,70–1,87 г/см<sup>3</sup> испытывали прессованные шашки диаметром 40 мм без оболочки с использованием ионизационных датчиков. Шашки максимальной плотности 1,868 г/см<sup>3</sup> получены методом агатирования

(плотность монокристалла FOX-7 —  $1,885 \text{ г/см}^3$ ). Использовали полидисперсный FOX-7 (50–500 мкм), в котором фракция 200–300 мкм составляла 70 %. Надежность получаемых экспериментальных данных обеспечивалась двукратным повторением эксперимента, результатом каждого из которых являлось пять скоростей детонации, соответствующих пяти участкам заряда. Усреднение скоростей детонации по каждому эксперименту выполнялось методом наименьших квадратов.

Результаты исследования приведены в табл. 2.6 и на рис. 2.1.

Полученная линейная зависимость скорости детонации  $D_{\rho_0}$  от плотности  $\rho_0$  для FOX-7 представлена следующим уравнением:

$$D_{\rho_0} = 5,39 + 3,74(\rho_0 - 1,0), \quad (2.37)$$

где скорость детонации при плотности  $1,00 \text{ г/см}^3$  —  $5,39 \text{ км/с}$ ; коэффициент  $M$  —  $3,74 \frac{\text{км/с}}{\text{г/см}^3}$  несколько больше, чем для гексогена и октогена.

Максимальная скорость детонации FOX-7 при плотности монокристалла —  $1,885 \text{ г/см}^3$  по уравнению (2.37) составляет  $8,70 \text{ км/с}$  и равна скорости детонации гексогена при плотности монокристалла гексогена —  $1,80 \text{ г/см}^3$ .

Таким образом, получена экспериментальная зависимость скорости детонации зарядов FOX-7 от их плотности в интервале  $1,10$ – $1,87 \text{ г/см}^3$ .

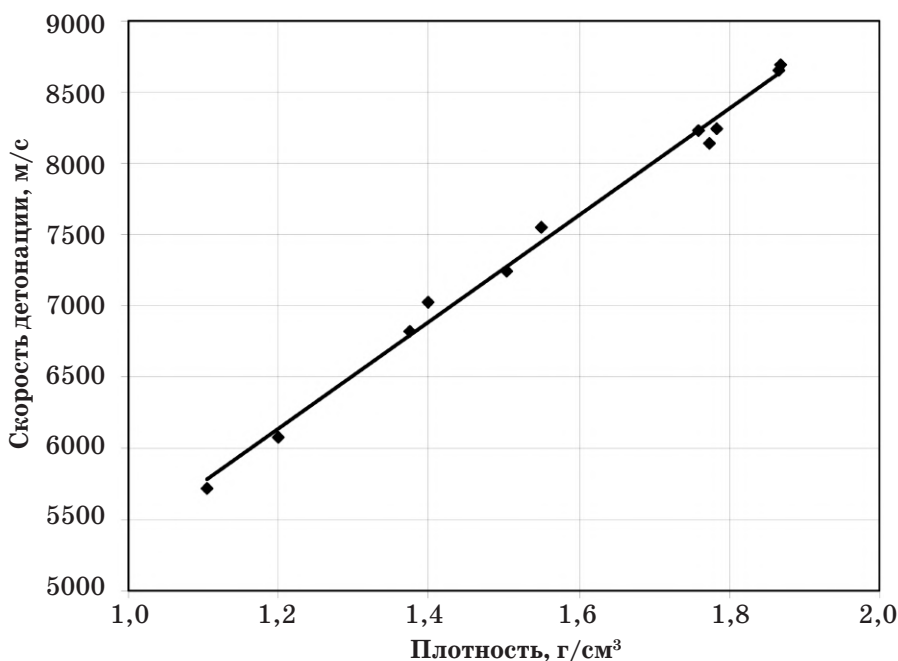


Рис. 2.1. Зависимость скорости детонации FOX-7 от плотности заряда

Т а б л и ц а 2.6

**Плотности зарядов ( $\rho_0$ ) и скорости детонации ( $D$ ) FOX-7**

$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , м/с
1,105	5720
1,200	6080
1,375	6820
1,400	7020
1,503	7250
1,550	7550
1,760	8230
1,773	8140
1,784	8250
1,866	8660
1,868	8690

**2.2. МЕТОДЫ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ  
ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ****2.2.1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД, УЧИТЫВАЮЩИЙ УДАРНУЮ  
СЖИМАЕМОСТЬ И РАЗГОН ЧАСТИЦ ИНЕРТНЫХ КОМПОНЕНТОВ**

При детонации взрывчатых композиций (ВК) многих типов (пластичные, эластичные и пастообразные ВК, полимерсодержащие литые и прессовочные ВК и др.) содержащиеся в них компоненты различного назначения из-за их недостаточно высокой дисперсности и малой реакционной способности не успевают прогреваться и не вступают в реакции с продуктами взрыва или другими компонентами за характерное время разложения  $\tau$  взрывчатого наполнителя — бризантного ВВ. Эти компоненты в зоне химической реакции за фронтом детонационной волны по существу выступают как инертные добавки, участвующие лишь в физических процессах — ударном сжатии и разгоне частиц продуктами взрыва.

В зависимости от дисперсности инертных добавок за фронтом детонационной волны за время  $\tau$  успевают или не успевают выравниваться по сечению заряда давление и массовая скорость. Если  $\tau \ll \tau_1$  ( $\tau_1$  — время, за которое выравнивается давление), то введение в состав ВК добавок не будет заметно сказываться на скорости распространения детонации. Выравнивание давления происходит, если диаметры частиц  $d_1 < \tau \cdot C_1$  ( $C_1$  — характерная скорость волновых возмущений в материале добавки).

При  $\tau > \tau_2$  ( $\tau_2$  — время, за которое частицы добавки приобретают скорость, равную массовой скорости продуктов взрыва), достигается газодинамическое равновесие (полное выравнивание давления и скоростей продуктов взрыва и частиц добавки). Время  $\tau_2$  определяется динамической вязкостью бризантного ВВ, разлагающегося в условиях детонационной волны, и инерционностью частиц добавки, зависящей от их диаметра и плотности. На основе экспериментальных данных о параметрах детонации смесевых ВВ можно заключить, что для различных типов добавок и видов бризантных ВВ диаметр полностью разгоняемых в детонационной волне частиц  $d_2$  составляет 1–10 мкм, что значительно меньше размера  $d_1$  для тех же составов. При размерах частиц больших  $d_2$  реализуется промежуточное состояние, соответствующее  $\tau_2 > \tau > \tau_1$ , при котором полного разгона частиц добавки не происходит, и скорости детонации зарядов находятся между значениями, отвечающими равновесию давления и выравниванию скоростей продуктов взрыва и добавки [147, 148, 87, 88].

В целом процесс детонации таких ВК, с учетом роли инертных компонентов, с газодинамических позиций с привлечением политропического уравнения состояния продуктов взрыва можно описать системой уравнений, предложенной И. М. Воскобойниковым и А. А. Котоминым [147, 148].

$$\frac{P_1 - P}{P} = (n + 1) \frac{\alpha_2 v_{02}}{v_0 - \alpha_2 v_{02}} \cdot \left( \frac{v_{02} - v_2}{v_{02}} \right)^2 \cdot \frac{b[2 + b(v_{02} - v_2)/v_{02}]}{[1 + b(v_{02} - v_2)/v_{02}]^2}; \quad (2.38)$$

$$\frac{v_{02} - v_2}{v_{02}} = \frac{1}{b} \frac{\sqrt{1 + 4bPv_{02}/C_0^2} - 1}{\sqrt{1 + 4bPv_{02}/C_0^2} + 1}; \quad (2.39)$$

$$v_1 = \frac{n}{n + 1} v_{01} \left[ 1 + \frac{P_1 - P}{P(n + 1)} \right]; \quad (2.40)$$

$$D^2 = \frac{P[(1 - \alpha_2)v_{01} + \alpha_2 v_{02}]^2}{[(1 - \alpha_2)(v_{01} - v_1) + \alpha_2(v_{02} - v_2)]^2}; \quad (2.41)$$

$$E = 0,5P(v_0 - v) + (1 - \alpha_2)Q; \quad (2.42)$$

$$E_1 = 0,5P(v_{01} - v_1) = Q = E_{11} - 0,5P_1(v_{01} - v_{11}); \quad (2.43)$$

$$\Delta E_2 = 0,5P(v_{02} - v_2); \quad (2.44)$$

$$P_1 = \frac{\rho_{01} D_1^2}{n + 1}; \quad v_{11} = \frac{n}{n + 1} v_{01}; \quad (2.45)$$

$$v_0 = \alpha_2 v_{02} + (1 - \alpha_2) v_{01}; \quad \rho_{01} = \frac{1 - \alpha_2}{1/\rho_0 - \alpha_2/\rho_{02}}; \quad (2.46)$$

$$v_{02} = 1/\rho_{02}; \quad v_{01} = 1/\rho_{01}; \quad v_0 = 1/\rho_0,$$

где  $\rho_0, \rho_{01}, \rho_{02}$  — начальные плотности взрывчатой композиции, ВВ в композиции и инертной добавки;  $v_0, v_{01}, v_{02}$  — начальные удельные объемы композиции, ВВ в композиции и добавки;  $\alpha_2$  — массовая доля добавки;  $D, P$  — скорость и давление детонации взрывчатой композиции;  $D_1, P_1, n$  — скорость детонации, давление и показатель политропы продуктов взрыва для ВВ при  $\rho_{01}$ ;  $v_1, v_2$  — удельные объемы продуктов взрыва и добавки при детонации композиции (при  $P$ );  $v_{11}, E_{11}$  — удельный объем и внутренняя энергия продуктов взрыва при детонации ВВ без добавки (при  $P_1$ );  $E, E_1, \Delta E_2$  — внутренняя энергия продуктов взрыва и добавки (при  $P$ ), продуктов взрыва в композиции (при  $P$ ), изменение энергии добавки при ее сжатии до  $P$ ;  $Q$  — теплота взрыва ВВ;  $C_0 = a$ ;  $b = \lambda$ , определяются из экспериментальной ударной адиабаты материала добавки в форме  $D = a + \lambda u$ , либо  $C_0 = 1,2C'_0, b = 1,7$  из обобщенной ударной адиабаты в форме  $D = 1,2C'_0 + 1,7u$ , где  $u$  — скорость материала добавки за ударным фронтом.

В табл. 2.7 сопоставлены рассчитанные по уравнениям (2.38–2.46) и экспериментальные [88, 147, 148] скорости детонации для некоторых модельных взрывчатых композиций с органическим связующим. Как видно из таблицы, результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Т а б л и ц а 2.7

**Экспериментальные и рассчитанные скорости детонации смесей ВВ  
с инертными добавками**

Состав ВК, % мас.	$\rho_{02}$ , г/см <sup>3</sup>	Размер частиц $d_{02}$ , мкм	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с	
				Опыт	Расчет
ТЭН / полисилоксан (ПС), 35/65	0,98	20	1,15	5,32	5,44
ТЭН / ПС / магний, 70/16/14	0,98/1,74	20	1,53	7,12	7,08
ТЭН / ПС / алюминий, 25/5/70	0,98/2,70	30	2,20	6,82	6,77
ТЭН / ПС / никель, 70/5/25	0,98/8,9	2	2,02	7,05	6,98
Гексоген / ПС / титан, 70/5/25	0,98/4,54	2	1,85	7,16	7,18
Гексоген / ПС / вольфрам, 30/5/65	0,98/19,2	2	3,77	4,18	4,20
ТЭН / ПС / NaCl, 35/5/60	0,98/2,16	100	1,87	6,28	6,30

Окончание табл. 2.7

Состав ВВ, % мас.	$\rho_{02}$ , г/см <sup>3</sup>	Размер частиц $d_{02}$ , мкм	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	D, км/с	
				Опыт	Расчет
Гексоген / ПС / K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> , 70/10/20	0,98/2,66	120	1,75	7,44	7,45
Гексоген / ПС / карбид кремния, 65/5/30	0,98/3,22	200	1,90	7,62	7,79
Октоген / (-CH <sub>2</sub> -CF <sub>2</sub> ) <sub>0,7</sub> [-CF <sub>2</sub> -C(CF <sub>3</sub> )F-] <sub>0,3</sub> , 85/15	1,79	10	1,86	8,47	8,35
Октоген / политетрафторэтилен, 83/17	2,23	50	1,91	8,42	8,32
ТЭН / парафин, 80/20	0,90	20	1,44	7,60	7,60

### 2.2.2. ЭМПИРИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Более удобным для практики является простой и достаточно точный эмпирический метод расчета, основанный на корреляционных соотношениях, предложенный А. А. Котоминым в работах [87, 88] для смесей ВВ с отрицательным и нулевым кислородным балансом (тротил, гексоген, октоген, тэн и др.) с различными видами инертных добавок. Метод применим для расчета порошкообразных, литьевых и пресс-композиций, пластичных пастообразных и эластичных ВВ и др., содержащих до 70 % мас. добавок.

Основные положения метода и его применение изложены также в работах [139–141, 154, 155]. В данном разделе представлен модернизированный вариант этого метода.

Взрывчатые композиции могут быть представлены как гетерогенные системы, в которых воздушные промежутки между частицами ВВ полностью или частично заполнены инертной добавкой.

Из практики известно, что при заполнении воздушных пор в пористом ВВ инертным веществом скорость детонации системы по сравнению со скоростью детонации исходного пористого ВВ в зависимости от вида и дисперсности добавки может как увеличиваться, так и уменьшаться. Это изменение скорости детонации может быть рассчитано, а так как скорость детонации пористого ВВ известна, то может быть вычислена и скорость детонации заполненной добавкой системы. Аналогично рассчитывается изменение показателя политропы продуктов взрыва при введении в ВВ инертной добавки. На этом принципе и основан данный метод расчета.

Сначала рассчитывается скорость детонации взрывчатой композиции при ее максимальной плотности, т. е. при полном заполнении пор добавкой:

$$D_{\rho_{\max}} = D_{\rho_n} + \Delta D_d, \quad (2.47)$$

где  $D_{\rho_{\max}}$  — скорость детонации взрывчатой композиции при ее максимальной плотности, км/с;  $D_{\rho_n}$  — скорость детонации чистого ВВ при его парциальной плотности в составе (пористого ВВ), км/с;  $\Delta D_d$  — изменение скорости детонации системы при заполнении воздушных пор добавкой, км/с.

Величина  $\Delta D_d$  определяется физическими процессами — повышением давления продуктов взрыва ВВ при заполнении воздушных пор инертным веществом, ударным сжатием и разгоном продуктами взрыва этого вещества.

Необходимые для проведения расчета по уравнению (2.47) величины находятся следующим образом.

*Максимальная плотность взрывчатой композиции ( $\rho_{\max}$ , г/см<sup>3</sup>):*

$$1/\rho_{\max} = \sum (c_i / \rho_i), \quad \sum c_i = 1, \quad (2.48)$$

где  $c_i$ ,  $\rho_i$  — массовые доли и плотности (в г/см<sup>3</sup>) компонентов композиции.

*Парциальная плотность ВВ (взрывчатого наполнителя) в композиции:*

$$\rho_n = \alpha \rho_{\max}, \quad (2.49)$$

где  $\rho_n$  — парциальная плотность ВВ в композиции, г/см<sup>3</sup>;  $\alpha$  — массовая доля ВВ в композиции.

*Скорость детонации пористого ВВ ( $D_{\rho_n}$ , км/с):*

$$D_{\rho_n} = D_{1,60} + M(\rho_n - 1,60) \text{ или } D_{\rho_n} = D_{1,0} + M(\rho_n - 1,0), \quad (2.50)$$

где  $D_{1,60}$ ,  $D_{1,0}$  — скорости детонации чистого ВВ (км/с) при плотностях 1,60 и 1,0 г/см<sup>3</sup>;  $M$  — угловой коэффициент зависимости  $D = f(\rho_0)$ , (км/с) / (г/см<sup>3</sup>).

Следует пользоваться приведенными в табл. 2.8 значениями  $D_{1,0}$ ,  $D_{1,60}$ ,  $M$  для индивидуальных ВВ.

Т а б л и ц а 2.8

**Величины  $D_{1,0}$ ,  $D_{1,60}$ ,  $M$  для некоторых ВВ**

	$D_{1,0}$ , км/с	$D_{1,60}$ , км/с	$M$
Тротил	5,15	6,97	3,03
Тетрил	5,48	7,27	3,22
Тринитробензол	5,06	7,02	3,26
ТЭН	5,90	7,85	3,25
Гексоген	6,08	8,03	3,33
Октоген	6,09	8,08	3,34
FOX-7	5,39	7,63	3,74
ДИНА	5,95	7,68	2,90
Нитрогуанидин	5,46	7,86	4,02
Пикриновая кислота	5,26	7,01	3,05

Если для взрывчатого вещества общей формулы  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$  коэффициент  $M$  неизвестен, то его можно рассчитать по формуле (2.32):

$$M = \frac{1,1a - k_2b + 7,6c + 8,1d + 7,2(e + f)}{0,1M_{\text{ВВ}}}$$

(при содержании Н  $\leq 3,5\%$   $k_2 = 3,0$ ; при Н  $> 3,5\%$   $k_2 = 1,3$ ),  
где  $M_{\text{ВВ}}$  — молекулярная масса ВВ.

Если взрывчатая композиция, наряду с инертными добавками, содержит не одно, а несколько различных ВВ, то скорость детонации пористого ВВ:

$$D_{\rho_n} = \alpha^{-1} \sum D_i \alpha_i, \quad (2.51)$$

где  $D_i$  — скорости детонации чистых ВВ при плотности  $\rho_n = \alpha \rho_{\text{max}}$ ;  $\alpha_i$  — массовые доли ВВ в композиции ( $\sum \alpha_i = \alpha$ ).

### **2.2.2.1. Скорость детонации ВВ с инертными органическими добавками**

Органические вещества обладают значительной ударной сжимаемостью в детонационной волне, связанной с такими их характеристиками, как плотность, объемная скорость звука, акустическая жесткость. Скорости ударных волн в них при равном давлении также существенно различны. Это определяет большое влияние вида инертной органической добавки на величину  $\Delta D_d$ .



Для подтверждения вышеизложенного в табл. 2.9 приведены экспериментальные скорости детонации ряда модельных взрывчатых композиций на основе высокодисперсного ТЭНа (3–5 мкм) с различными связующими (количество связующего и плотность зарядов одинаковы для всех композиций и составляют 15 % мас. и 1,55 г/см<sup>3</sup> соответственно).

Т а б л и ц а 2.9

**Влияние вида органической добавки (полимерного связующего) на скорость детонации композиций ТЭН/связующее 85/15 % мас.**

Связующее	$\rho_d$ , г/см <sup>3</sup>	$C_0$ , <sup>*</sup> км/с	$D$ , км/с (опыт)	$\Delta D_d$ , км/с (опыт)
Полисилоксановый каучук СКТ	0,98	0,865	7,36	0,44
Полистирол / дибутилфталат (2:1)	1,05	1,645	7,45	0,58
Бутадиеннитрильный каучук СКН-40	0,98	1,820	7,56	0,66
Дивинилстирольный термоэластопласт ДСТ-30	0,94	1,720	7,60	0,67
Бутадиен- $\alpha$ -метилстирольный каучук СКМС-10	0,92	1,750	7,64	0,69
Изопреновый каучук СКИ-3	0,92	1,825	7,68	0,73
Бутилкаучук / СКИ-3 (1:1)	0,92	1,910	7,82	0,87
Бутилкаучук	0,92	1,990	7,90	0,96

\*  $C_0$  — объемная скорость звука в связующем

Скорость детонации взрывчатой композиции с инертными органическими добавками рассчитывается по формуле (2.47). Величина  $\Delta D_d$ , км/с, для органических добавок и воды вычисляется по следующей формуле:

$$\Delta D_d = 10^{-4} A_d^2 \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_d}, \quad (2.52)$$

где  $\beta$  — массовая доля добавки в композиции;  $\rho_d$  — плотность добавки, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{\max}$  — максимальная плотность взрывчатой композиции, г/см<sup>3</sup>;  $A_d$  — количество грамм-атомов элементов в 1 литре добавки, г-ат/л. Параметр  $A_d$  коррелирует со скоростью ударной волны в материале добавки.

Ранее И. Н. Айзенштадт в расчет скорости детонации индивидуальных ВВ ввел фактор В (число грамм-атомов элементов в 1 кг ВВ), связанный с упругой компонентой детонационного давления [93].

Для индивидуального органического соединения параметр  $A_d$  рассчитывается по формуле

$$A_d = 10^3 \frac{N}{M_d} \rho_d, \quad (2.53)$$

где  $N$  — число атомов в молекуле добавки;  $M_d$  — молекулярная масса соединения.

В случае добавки-полимера  $N$  и  $M_d$  относятся к звену, а для сополимера  $A_d$  рассчитывается по формуле:

$$A_d = 10^3 \left( \frac{N_1}{M_1} m_1 + \frac{N_2}{M_2} m_2 \right) \rho_d, \quad (2.54)$$

где  $N_1, N_2$  — число атомов в звеньях;  $M_1, M_2$  — молекулярные массы звеньев;  $m_1, m_2$  — массовые доли звеньев.

#### 2.2.2.2. Скорость детонации ВВ с инертными малосжимаемыми добавками (металлы, оксиды, соли и др.)

Металлы, оксиды металлов, соли, карбиды, силициды и другие аналогичные виды инертных добавок обладают малой ударной сжимаемостью в детонационной волне. Величина  $\Delta D_d$  для этих добавок рассчитывается из выражения

$$\Delta D_d = a(b - \rho_d) \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_d}, \quad (2.55)$$

где  $a, b$  — коэффициенты, значения которых для различных групп малосжимаемых добавок приведены в табл. 2.11.

Таблица 2.11

Значения коэффициентов  $a, b$

Группы добавок	$a$	$b$
Металлы, оксиды, карбиды, силициды и др. с размером частиц менее 10 мкм ( $d_d \leq 10$ мкм)	1,125	4,0
Те же добавки с размером частиц более 10 мкм ( $d_d > 10$ мкм)	0,575	9,1
Неорганические и органические соли	1,76	3,6

Коэффициент  $a$  (км/с / г/см<sup>3</sup>) связывает изменение скорости детонации системы при введении инертных добавок с инерционностью добавок. Добавки с размером частиц менее 10 мкм полностью разгоняются в детонационной волне.

Физический смысл коэффициента  $b$  (г/см<sup>3</sup>) состоит в том, что заполнение воздушных пор в пористом ВВ инертной добавкой с плотностью, численно равной  $b$ , не приводит к изменению скорости детонации системы ( $\Delta D_d = 0$ ). Малосжимаемые добавки с большей плотностью снижают скорость детонации системы, а с меньшей — повышают.

Для полидисперсных порошков малосжимаемых добавок, включающих фракции с  $d_d > 10$  мкм и  $d_d \leq 10$  мкм,  $\Delta D_d$  находится между рассчитанными значениями для мелких и крупных частиц добавки в соответствии с соотношением фракций.

Если во взрывчатой композиции содержится несколько инертных добавок различного вида, то  $\Delta D_d$  рассчитывается аддитивно, как сумма вкладов всех добавок:

$$\Delta D_d = \sum (\Delta D_d)_i. \quad (2.56)$$

Например, для взрывчатого состава, содержащего полимер, пластификатор, сенсibilизатор и алюминий:

$$\Delta D_d = \Delta D_{\text{пол}} + \Delta D_{\text{пл}} + \Delta D_{\text{сенси}} + \Delta D_{\text{Al}}.$$

### 2.2.2.3. Расчет скорости детонации взрывчатой композиции при реальной плотности заряда ( $\rho_0$ )

Скорость детонации взрывчатой композиции при ее максимальной плотности  $D_{\rho_{\max}}$ , рассчитанная по формуле (2.47), приводится к плотности заряда  $\rho_0$  по линейной зависимости:

$$D_{\rho_0} = D_{\rho_{\max}} - \rho_{\text{МК}} M \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\max}} \right), \quad (2.57)$$

где  $\rho_{\text{МК}}$  — плотность монокристалла ВВ;  $M$  — угловой коэффициент зависимости  $D = f(\rho_0)$ , (км/с) / (г/см<sup>3</sup>) для чистого ВВ.

Ограничение расчета  $D_{\rho_{\max}}$ : для приведенного метода расчета вводится единственное ограничение по предельной объемной концентрации инертной добавки. Расчет верен при условии

$$\frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_d} \leq \frac{0,85}{\sqrt{\rho_d}}. \quad (2.58)$$

Обычно предельная для расчета концентрация добавки составляет 60–70 % мас., что превышает содержание добавок в реальных взрывчатых составах.

#### 2.2.2.4. Зависимость показателя политропы продуктов взрыва композиций от вида и содержания инертных добавок

Известно, что при разбавлении ВВ инертными добавками эффективный показатель политропы системы возрастает. Это, очевидно, связано с обогащением продуктов детонации ВВ конденсированной фазой, содержащей твердые частицы добавок и обладающей меньшей сжимаемостью.

В работах [87, 88] было установлено, что зависимость эффективного показателя политропы взрывчатых композиций (ВК) от массовой доли инертной добавки ( $\sim$  до 50 %) является линейной:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + k\beta, \quad (2.59)$$

где  $n_{\text{ВК}}$  — показатель политропы ВК;  $n_{\text{ВВ}}$  — показатель политропы чистого ВВ (основы ВК);  $\beta$  — массовая доля инертной добавки.

Коэффициент пропорциональности ( $k$ ) слабо зависит от плотности и дисперсности добавок, и его значение было принято усредненным и постоянным, равным 2,85.

Если экспериментальное значение  $n_{\text{ВВ}}$  неизвестно, то для ВВ состава  $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c\text{N}_d\text{F}_e\text{Cl}_f$   $n_{\text{ВВ}}$  можно вычислить по следующим формулам (раздел 2.1.2):

$$n_{1,5} = \frac{3,5a + k_2b + 4,8c + 3,6d + 5,9e + 10,3f}{0,1M_{\text{ВВ}}};$$

$$n_{\text{ВВ}} = n_{1,5} + 0,4(\rho_0 - 1,5)$$

(при содержании Н  $\leq 5,8\%$   $k_2 = -0,5$ ; при содержании Н  $> 5,8\%$   $k_2 = +0,5$ ),

где  $n_{1,5}$  — показатель политропы при плотности ВВ  $\rho_0 = 1,5 \text{ г/см}^3$ ;  $n_{\text{ВВ}}$  — показатель политропы при заданной плотности  $\rho_0$ .

Параметры идеальной детонации взрывчатых композиций в точке Жуге рассчитываются с учетом вычисленных значений показателей политропы  $n_{\text{ВК}}$  по известным формулам:

$$P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{ВК}} + 1}; \quad U_J = \frac{D_{\rho_0}}{n_{\text{ВК}} + 1};$$

$$\rho_J = \frac{n_{\text{ВК}} + 1}{n_{\text{ВК}}} \rho_0; \quad C_J = D_{\rho_0} - U_J,$$

где  $P_J$  — детонационное давление, кбар;  $U_J$  — скорость продуктов взрыва, км/с;  $\rho_J$  — плотность продуктов взрыва, г/см<sup>3</sup>;  $C_J$  — скорость звука

в продуктах взрыва, км/с;  $\rho_0$  — плотность заряда, г/см<sup>3</sup>;  $D_{\rho_0}$  — скорость детонации ВК при плотности  $\rho_0$ , км/с, вычисленная по формуле (2.57).

Точка Жуге (плоскость Чепмена–Жуге) соответствует совпадению адиабаты продуктов детонации с их изоэнтропой, при котором ударный фронт перемещается относительно продуктов детонации со скоростью звука в них.

Для более точного расчета показателей политропы продуктов взрыва ВК ( $n_{\text{ВК}}$ ) и, соответственно, давления детонации взрывчатых композиций необходимо было уточнить значения коэффициента  $k$  из формулы (2.59) для органических и неорганических групп добавок. С этой целью были проведены дополнительные экспериментальные исследования давлений детонации и показателей политропы продуктов взрыва ВК с различными органическими и неорганическими инертными добавками. Измерения давлений детонации проводились совместно с к.т.н. Б. В. Румянцевым методом «аквариума». Диаметр зарядов составлял 54 мм, масса заряда ВК — 200 г.

В табл. 2.12 приведены индекс и состав ВК на основе гексогена, а также плотность и дисперсность использованных инертных органических добавок.

Таблица 2.12

**Взрывчатые композиции (ВК) на основе гексогена,  
содержащие различные инертные органические добавки**

Индекс ВК	Содержание гексогена, мас. доля	Инертная добавка	Содержание добавки, мас. доля	Плотность добавки, г/см <sup>3</sup>	Дисперсность добавки, мкм
ВК-1	0,850	Меламин	0,150	1,573	100
ВК-2	0,750	Меламин	0,250	1,573	100
ВК-3	0,650	Меламин	0,350	1,573	100
ВК-4	0,550	Меламин	0,450	1,573	100
ВК-5	0,450	Меламин	0,550	1,573	100
ВК-6	0,683	$\alpha$ -Нафтол	0,317	1,224	100
ВК-7	0,655	Аминогуанидин солянокислый	0,345	1,450	100
ВК-8	0,666	м-Фенилендиамин	0,334	1,350	100
ВК-9	0,644	Гуанидинкарбонат	0,356	1,520	100
ВК-10	0,635	Гликоколь	0,365	1,600	100
ВК-11	0,950	Связующее*	0,050	0,970	—
ВК-12	0,870	Связующее*	0,130	0,970	—

\* Полимерное связующее — смесь силоксанового и бутадиеннитрильного каучуков 1:1.

В табл. 2.13, аналогичной табл. 2.12, приведены состав ВК и характеристики использованных инертных *неорганических* добавок: металлов, оксидов, солей. Для прессования зарядов в ВК вводился флегматизатор (свыше 100 %)

Таблица 2.13

**ВК на основе гексогена, содержащие различные инертные неорганические добавки (металлы, оксиды, соли)**

Индекс ВК	Содержание гексогена, мас. доля	Инертная добавка	Содержание добавки, мас. доля	Плотность добавки, г/см <sup>3</sup>	Дисперсность добавки, мкм
ВК-13	0,855	Алюминий	0,145	2,700	40
ВК-14	0,665	Алюминий	0,335	2,700	10
ВК-15	0,485	Алюминий	0,515	2,700	40
ВК-16	0,650	Магний	0,350	1,741	1,8
ВК-17	0,653	Титан	0,347	4,510	100
ВК-18	0,653	Титан	0,347	4,510	9,5
ВК-19	0,653	Хлорид натрия	0,347	2,150	50
ВК-20	0,650	Бор аморфный	0,350	2,340	5
ВК-21	0,550	Железо	0,450	7,870	9,5
ВК-22	0,549	Цирконий	0,451	6,440	10
ВК-23	0,550	Оксид меди	0,450	6,400	10

В табл. 2.14 приведены экспериментальные характеристики ВК, указанные в табл. 2.12, 2.13. Определены плотность зарядов, скорость и давление детонации ВК. Испытан был также и чистый гексоген. Из полученных экспериментальных данных рассчитаны эффективные показатели политропы продуктов взрыва ВК.

На основании полученных результатов построена зависимость показателя политропы продуктов взрыва ВК от содержания инертных *органических* (рис. 2.2) и *неорганических* (рис. 2.3) добавок.

Как видно из рис. 2.2, 2.3 полученная зависимость является линейной и аппроксимируется следующими уравнениями:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 2,7\beta; \quad (2.60)$$

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 3,1\gamma, \quad (2.61)$$

где  $\beta$  — массовая доля инертной *органической* добавки;  $\gamma$  — массовая доля инертной *неорганической* добавки.

Для уравнения (2.60) коэффициент корреляции ( $r$ ) составил 0,998, среднеквадратическое отклонение ( $s$ ) — 0,022; для уравнения (2.61) коэффициент корреляции ( $r$ ) составил 0,996, среднеквадратическое отклонение ( $s$ ) — 0,030.

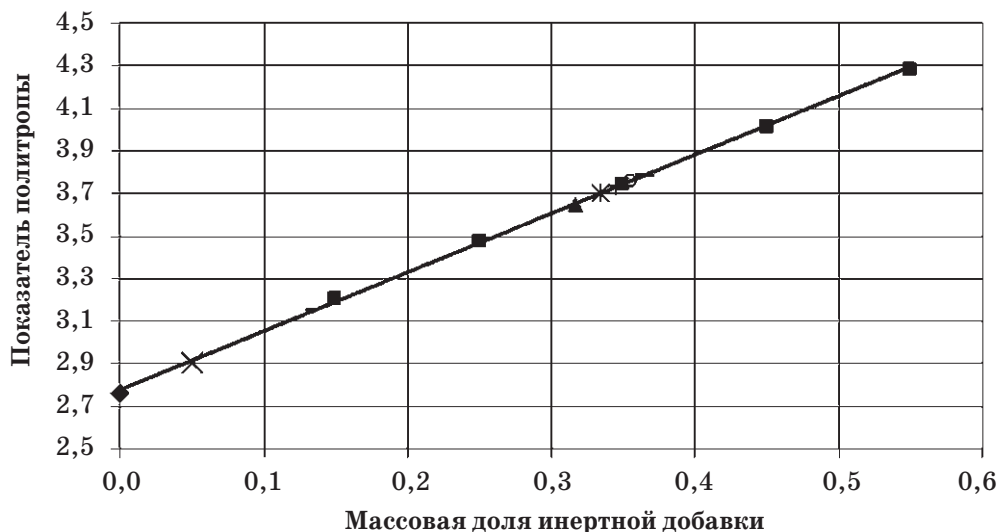


Рис. 2.2. Зависимость показателя политропы продуктов взрыва взрывчатых композиций на основе гексогена от содержания инертных *органических* добавок:

◆ чистый гексоген, ■ меламин, ▲  $\alpha$ -нафтол, + амингуанидин солянокислый, \* м-фенилендиамин, ○ гуанидинкарбонат, — гликоколь, × связующее

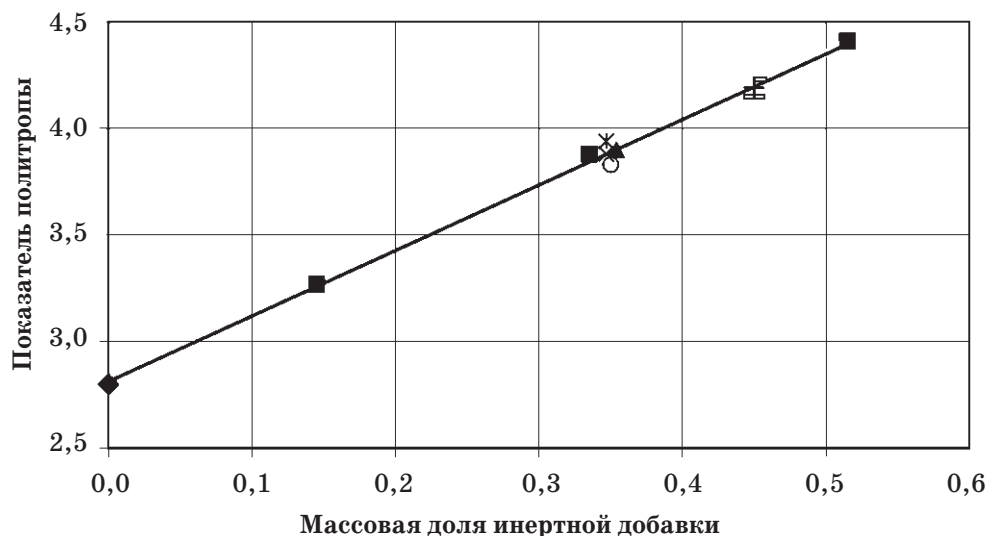


Рис. 2.3. Зависимость показателя политропы продуктов взрыва взрывчатых композиций на основе гексогена от содержания инертных *неорганических* добавок:

◆ чистый гексоген, ■ Al, ▲ Mg, + CuO, \* NaCl, ○ B, □ Zr, ◐ Fe, × Ti

Таблица 2.14

**Экспериментальные характеристики исследованных взрывчатых композиций, содержащих различные инертные добавки**

Индекс ВК	Плотность заряда ВК, г/см <sup>3</sup>	Пористость заряда ВК, %	Скорость детонации ВК, км/с	Давление детонации ВК, кбар	Показатель политропы продуктов взрыва ВК
Гексоген	1,680	7,5	8,29	308	2,75
ВК-1	1,647	4,1	7,93	247	3,20
ВК-2	1,626	3,9	7,70	216	3,47
ВК-3	1,608	3,5	7,48	190	3,74
ВК-4	1,585	3,7	7,24	166	4,01
ВК-5	1,563	3,5	7,02	146	4,28
ВК-6	1,530	1,3	7,26	173	3,65
ВК-7	1,575	3,0	7,29	177	3,73
ВК-8	1,549	2,8	7,08	165	3,70
ВК-9	1,465	11,0	7,26	162	3,76
ВК-10	1,600	4,2	7,74	201	3,78
ВК-11	1,570	9,2	7,89	251	2,90
ВК-12	1,630	2,4	8,00	251	3,15
ВК-13	1,670	7,7	7,69	231	3,27
ВК-14	1,864	3,6	7,74	229	3,88
ВК-15	1,858	13,5	7,11	174	4,41
ВК-16	1,603	6,9	7,50	184	3,90
ВК-17	1,995	5,1	7,15	209	3,88
ВК-18	1,887	10,3	6,95	187	3,88
ВК-19	1,736	4,7	7,34	189	3,94
ВК-20	1,524	18,2	6,35	127	3,83
ВК-21	2,310	2,5	7,06	224	4,15
ВК-22	2,176	9,4	6,37	169	4,23
ВК-23	2,253	2,4	6,72	196	4,19

Таким образом, коэффициент  $k$  из уравнения (2.59) для ВК с инертными *органическими* добавками составляет 2,7, а для ВК с инертными *неорганическими* добавками — 3,1.

Для взрывчатых композиций, содержащих смесь инертных органических и неорганических добавок, показатель политропы продуктов взрыва рассчитывается аддитивно по следующему уравнению:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 2,7\beta + 3,1\gamma. \quad (2.62)$$



Корректность полученных уравнений была проверена на известных из литературы взрывчатых композициях различного вида [88, 102, 108, 112, 117, 119, 149, 151]. В табл. 2.15 приведены опытные и рассчитанные скорости и давления детонации ВК, содержащих инертные *органические* добавки. В табл. 2.16 приведены опытные и рассчитанные скорости и давления детонации ВК, содержащих инертные *неорганические* добавки. В табл. 2.17 приведены опытные и рассчитанные скорости и давления детонации ВК, содержащих *смеси* инертных органических и неорганических добавок.

Как видно из этих таблиц наблюдается хорошая сходимостъ экспериментальных и расчетных величин, что подтверждает достоверность полученных уравнений (2.47)–(2.62).

Таблица 2.15

**Опытные и расчетные параметры детонации известных взрывчатых композиций с инертными органическими добавками**

№ п/п	Состав ВК, % мас.	Плотность ВК, г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с		Давление детонации, кбар	
			опыт	расчет	опыт	расчет
1	Гексоген/воск 95/5	1,640	8,38	8,28	297	300
2	Гексоген/воск 91/9	1,631	8,37	8,30	287	290
3	Октоген/парафин 95/5	1,783	8,73	8,76	335	354
4	Октоген/воск 91/9	1,710	8,68	8,59	318	327
5	Гексоген/ацетон 75,5/24,5	1,350	6,92	6,89	153	147
6	Октоген/полисилоксан 92,5/7,5	1,750	8,35	8,37	310	313
7	Октоген/estane 95,5/4,5	1,820	8,83	8,80	370	371
8	Октоген/estane 93,4/6,6	1,800	8,67	8,63	334	345
9	Октоген/estane 86,4/13,6	1,738	8,36	8,30	307	299
10	Октоген/viton-A 95/5	1,860	8,82	8,79	375	377
11	Октоген/viton-A 85/15	1,852	8,43	8,34	348	321
12	Тринитротриаминобензол/kel-F 92,5/7,5	1,908	7,63	7,67	300	285
13	Гексоген/kel-F 90/10	1,780	8,37	8,31	328	314
14	Октоген/диаминотринитробензол/estane 85,6/9,2/5,2	1,798	8,57	8,52	343	345
15	Октоген/нитрогуанидин/estane 29,7/64,9/5,4	1,712	8,38	8,24	301	310
16	Октоген/нитрогуанидин/kel-F 65,7/26,4/7,9	1,815	8,62	8,52	346	345

Окончание табл. 2.15

№ п/п	Состав ВК, % мас.	Плотность ВК, г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с		Давление детонации, кбар	
			опыт	расчет	опыт	расчет
17	Октоген/нитроцеллюлоза/ трис-β-хлорэтилфосфат 94/3/3	1,844	8,80	8,78	375	378
18	Гексоген/полисилоксан/ трибромфенол 54,4/5/40,6	1,897	6,75	6,70	176	175
19	Гексоген/полиизобутилен/ диоктилсебагинат 91/2,1/6,9	1,615	7,97	8,01	257	260
20	Гексоген/связующее-1/ди- октиладипинат 91/8,5/0,5	1,640	8,33	8,37	295	289
21	Октоген/связующее-2/ди- октиладипинат 92/2/6	1,760	8,63	8,60	334	335

*Примечание:* estane — полиэфир-уретан адипиновой кислоты и бутандиола; viton-A — сополимер гексафторпропилена с винилиденфторидом; kel-F — сополимер трифторхлорэтилена с винилиденфторидом; связующее-1 — сополимер полиэтилена с винилацетатом; связующее-2 — сополимер этилакрилата с бутилакрилатом

Таблица 2.16

**Опытные и расчетные параметры детонации известных взрывчатых композиций с инертными неорганическими добавками**

№ п/п	Состав ВК, % мас.	Плотность ВК, г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с		Давление детонации, кбар	
			опыт	расчет	опыт	расчет
1	Тротил/алюминий (270 мкм) 85/15	1,690	6,84	6,81	200	185
2	Тротил/алюминий (270 мкм) 85/15	1,490	6,27	6,24	137	137
3	Тротил/алюминий (80 мкм) 85/15	1,490	6,20	6,24	134	134
4	Тротил/алюминий (130 мкм) 80/20	1,700	6,58	6,69	180	167
5	ТЭН/алюминий (130 мкм) 80/20	1,800	7,60	7,76	240	235
6	Гексоген/алюминий (15 мкм) 80/20	1,760	7,90	7,83	260	254
7	ТЭН/магний (100 мкм) 80/20	1,660	7,71	7,75	225	226
8	Тротил/вольфрам (0,4 мкм) 85/15	1,840	6,72	6,76	196	198

Окончание табл. 2.16

№ п/п	Состав ВК, % мас.	Плотность ВК, г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с		Давление детонации, кбар	
			опыт	расчет	опыт	расчет
9	Тротил/вольфрам (0,4 мкм) 85/15	1,490	5,68	5,69	113	113
10	Тротил/оксид кремния (270 мкм) 85/15	1,690	6,64	6,79	183	175
11	Тротил/оксид кремния (270 мкм) 85/15	1,490	6,27	6,25	143	137
12	Тротил/оксид кремния (5 мкм) 85/15	1,690	6,45	6,59	173	165
13	Гексоген/хлорид натрия (300 мкм) 80/20	1,300	6,25	6,28	128	118
14	Гексоген/хлорид натрия (300 мкм) 60/40	1,300	5,60	5,46	95	85
15	Гексоген/хлорид натрия (300 мкм) 50/50	1,300	5,15	5,02	79	70
16	Тротил/хлорид натрия (300 мкм) 80/20	1,360	5,60	5,68	102	97
17	Тротил/хлорид натрия (300 мкм) 60/40	1,360	4,88	5,01	66,5	67,7
18	Тротил/хлорид натрия (300 мкм) 50/50	1,360	4,30	4,49	50	47

Таблица 2.17

**Опытные и расчетные параметры детонации известных  
взрывчатых композиций, содержащих смеси инертных  
органических и неорганических добавок**

№ п/п	Состав ВК, % мас.	Плотность ВК, г/см <sup>3</sup>	Скорость детонации, км/с		Давление детонации, кбар	
			опыт	расчет	опыт	расчет
1	ТЭН/полисилоксан/алюминий (15 мкм) 65/5/30	1,853	7,53	7,50	221	216
2	ТЭН/полисилоксан/алюминий (15 мкм) 37,6/12,7/49,7	1,890	6,70	6,63	145	149
3	Тротил/полисилоксан/ алюминий (15 мкм) 65/5/30	1,729	6,50	6,46	149	150
4	Гексоген/иодид аммония/вода 59/26/15	1,730	7,07	7,20	185	176
5	Гексоген/иодид аммония/вода 64/19/17	1,610	7,10	7,13	174	171

### 2.2.2.5. Общая схема расчета взрывчатых композиций.

#### Примеры расчета

Расчет параметров детонации взрывчатых композиций (ВК) по предложенному методу проводится следующим образом:

а) приводятся компонентный состав ВК, плотности всех компонентов, структурные формулы и молекулярные массы органических добавок, плотность заряда ВК, вычисляются максимальная плотность ВК и парциальная плотность ВВ в композиции;

б) вычисляется скорость детонации ВВ при его парциальной плотности в ВК (пористого ВВ);

в) рассчитываются параметры  $A_d$  и величины  $\Delta D_d$  для инертных органических добавок в ВК;

г) рассчитываются величины  $\Delta D_d$  для инертных неорганических (малосжимаемых) добавок в ВК;

д) вычисляется сумма вкладов всех добавок  $\sum (\Delta D_d)_i$  в ВК;

е) рассчитывается скорость идеальной детонации ВК при ее максимальной плотности ( $D_{p_{\max}}$ );

ж) рассчитывается скорость идеальной детонации ВК при ее реальной плотности (плотности заряда)  $D_{p_0}$ ;

з) вычисляется показатель политропы ВК ( $n_{ВК}$ );

и) рассчитываются параметры идеальной детонации ВК по известным формулам (раздел 2.2.2.4).

Проведенные теоретические и экспериментальные исследования позволили установить, что влияние связующего, пластификатора, порошкообразных металлов, солей, оксидов и других аналогичных инертных компонентов взрывчатых композиций на параметры детонации (скорость фронта детонационной волны и давление продуктов взрыва в точке Жуге) определяется физическими факторами: сжимаемостью, разгоном частиц добавок и скоростью распространения в них ударной волны. Химические реакции между этими добавками и продуктами взрыва ВВ с отрицательным кислородным балансом (тротил, гексоген, ТЭН и др.) практически не протекают в детонационной волне до точки Жуге. Сгорание частиц активных металлов (Mg, Al, B, Be, Ti, Zr, Hf) и органических добавок происходит, в основном, за плоскостью Чепмена–Жуге [88].

В частности, приведенные в табл. 2.18 скорости детонации и величины  $\Delta D_{Me}$  для металлизированных взрывчатых композиций на основе гексогена подтверждают, что частицы алюминия, магния и алюмомagneзиевого сплава различной формы и размеров являются инертной добавкой в детонационной волне. Уменьшение размера частиц этих активных металлов (менее 10 мкм) приводит к заметному (130–190 м/с)

снижению скорости детонации композиции при равной объемной доле металла (разгон частиц металла) вместо ожидаемого повышения скорости детонации (сгорание частиц в зоне химической реакции детонационной волны).

Присутствие в продуктах взрыва свободного кислорода (ВВ — окислители) обеспечивает частичное сгорание указанных добавок в зоне химической реакции. Высокодисперсные (1–10 мкм) соли-окислители и их растворы успевают частично разлагаться и взаимодействовать с продуктами взрыва таких ВВ, как гексоген, до точки Жуге.

Таблица 2.18

**Экспериментальные скорости детонации взрывчатых композиций  
гексоген / каучук СКТ / каучук СКН / металл (79/2/2/17 % мас.)**

Добавка металла (сплава)				$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с	$\Delta D_{Me}^{***}$ , км/с
Металл (сплав)	Форма частиц*	Размер частиц, мкм	$\alpha_{Me}^{**}$ , %			
Алюминий ПА-1	оск	65	96	1,775	7,94	0,43
Алюминий ПА-4	оск	20	91	1,792	7,95	0,39
Алюминий АСДТ	сф	30	96	1,780	7,96	0,43
Алюминий АСД-1	сф	15	98	1,785	7,99	0,45
Алюминий АСД-4	сф	8	98	1,794	7,92	0,35
Алюминий ПА-2	чеш	6	94	1,788	7,85	0,30
Алюминий ультра- дисперсный	чеш	1	92	1,795	7,86	0,29
Магний порошок	оск	30	98	1,648	7,69	0,48
Магний ультрадисперсный	оск	1,5	94	1,652	7,51	0,29
Алюмо-магниевого сплавы	сф	135	98	1,783	7,98	0,45
АМД-5	сф	15	98	1,765	7,91	0,43
ПАМ-1	оск	120	96	1,748	8,00	0,46
ПАМ-6	оск	5	94	1,730	7,77	0,28

\* оск — осколочная; сф — сферическая; чеш — чешуйчатая;

\*\*  $\alpha_{Me}$  — содержание металла в добавке;

\*\*\*  $\Delta D_{Me}$  — приведена к единой объемной доле металла (0,122).

В случае реагирующих органических добавок сопоставление расчетных и экспериментальных величин  $\Delta D_d$  позволяет оценить степень

участия добавок в химических реакциях в детонационной волне. Так, увеличение энтальпии образования в ряду исследованных в работе [88] органических добавок от  $-8108$  до  $1760$  кДж/кг практически не сказывается на скорости детонации систем. Однако превышение определенного уровня запасенной молекулой добавки энергии ( $\Delta H_f^0 > 1900$  кДж/кг) приводит к разложению органического соединения при детонации взрывчатой композиции и высвобождению части энергии в зоне химической реакции. Обусловленное молекулярной деструкцией и дополнительным энерговыделением приращение скорости детонации по сравнению с расчетной при объемной доле добавок  $v_d = 0,30$  составляет  $170\text{--}330$  м/с (табл. 2.19).

Таблица 2.19

Экспериментальные и расчетные значения  $\Delta D_d$  для смесей ТЭН ( $d = 5$  мкм) с азолами в качестве органических добавок, 70/30 (% мас.)

Органическая добавка	$\rho_d$ , г/см <sup>3</sup>	$\Delta H_f^0$ , кДж/кг	$\Delta D_d$ , (км/с) при $v_d = 0,30$		$(\Delta D_{оп} - \Delta D_{расч})$ , м/с
			опыт*	расчет	
Тетразол	1,54	3394	1,04	0,71	330
5-Метилтетразол	1,36	2543	1,02	0,78	240
1-Метил-5-амино-тетразол	1,44	1957	1,20	0,91	290
5-Аминотетразол (безводный)	1,60	2451	1,06	0,86	200
Бензтриазол	1,25	2099	0,81	0,64	170

\*  $\Delta D_d$  определялось из скоростей детонации смесей (из 6 опытов на каждую смесь).

Таким образом, при достижении значения энтальпии образования  $1900$  кДж/кг органические добавки превращаются из инертных в «активные» [88]. Тетразол, имеющий наибольшую величину  $\Delta H_f^0$  ( $3394$  кДж/кг), устойчиво детонирует в чистом виде как индивидуальное ВВ [88, 220].

### Примеры расчета параметров детонации взрывчатых композиций

**Пример 1.** Инертная добавка — индивидуальное органическое соединение

Рассчитать параметры детонации смеси гексогена с ацетоном 75,5/24,5 % мас. при плотности  $1,35$  г/см<sup>3</sup>.

## 1. Максимальная плотность смеси:

$$1/\rho_{\max} = \sum (c_i / \rho_i) = 0,755/1,80 + \\ + 0,245/0,792, \text{ отсюда } \rho_{\max} = 1,37 \text{ г/см}^3$$

( $\rho_{\text{МК}}$  гексогена —  $1,80 \text{ г/см}^3$ , плотность ацетона —  $0,792 \text{ г/см}^3$ ).

Парциальная плотность гексогена в смеси  $\rho_{\text{Н}} = \alpha \rho_{\max} = 0,755 \cdot 1,37 = 1,034 \text{ г/см}^3$ .

2. Скорость детонации гексогена при плотности  $\rho_{\text{Н}}$ 

$$D_{\rho_{\text{Н}}} = D_{1,0} + M(\rho_{\text{Н}} - 1,0) = 6,08 + 3,33(1,034 - 1,0) = 6,19 \text{ км/с}$$

( $D_{1,0}$ ,  $M$  — из табл. 2.8).

3. Для ацетона ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ),  $M_{\text{д}} = 58,08$ :

вычисляем параметр  $A_{\text{д}}$  и  $\Delta D_{\text{д}}$

$$A_{\text{д}} = 10^3 \frac{N}{M_{\text{д}}} \rho_{\text{д}} = 10^3 \frac{10}{58,08} 0,792 = 136,4 \text{ г-ат/л};$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 10^{-4} A_{\text{д}}^2 \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_{\text{д}}} = 10^{-4} 136,4^2 \frac{0,245 \cdot 1,37}{0,792} = 0,788 \approx 0,79 \text{ км/с}$$

## 4. Скорость детонации смеси гексогена с ацетоном:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = D_{\rho_{\text{Н}}} + \Delta D_{\text{д}} = 6,19 + 0,79 = 6,98 \text{ км/с};$

б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = D_{\rho_{\max}} - \rho_{\text{МК}} M \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\max}} \right) = \\ = 6,98 - 1,80 \cdot 3,33(1 - 1,35/1,37) = 6,89 \text{ км/с}.$

## 5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва смеси

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 2,7\beta = 2,70 + 2,7 \cdot 0,245 = 3,36 \quad (n_{\text{ВВ}} \text{ — из табл. 2.4}).$$

## 6. Детонационные параметры смеси в точке Жуге:

а) детонационное давление  $P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{ВК}} + 1} = 10 \frac{1,35 \cdot 6,89^2}{3,36 + 1} = 147 \text{ кбар};$

б) скорость продуктов детонации  $U_J = \frac{D_{\rho_0}}{n_{\text{ВК}} + 1} = \frac{6,89}{3,36 + 1} = 1,58 \text{ км/с};$

в) плотность продуктов детонации  $\rho_J = \frac{n_{\text{ВК}} + 1}{n_{\text{ВК}}} \rho_0 = \frac{3,36 + 1}{3,36} 1,35 = 1,75 \text{ г/см}^3;$

г) скорость звука в продуктах детонации  $C_J = D_{\rho_0} - U_J = 6,89 - 1,58 = 5,31$  км/с.

Результаты расчета:

Параметры	Опыт [149]	Расчет
$D_{\rho_0}$ , км/с	6,92	6,89
$P_J$ , кбар	153	147
$U_J$ , км/с	1,62	1,58
$n_{BK}$	3,30	3,36

**Пример 2.** Добавка — полимерное связующее

Рассчитать скорость и давление идеальной детонации взрывчатого состава октоген/эстан 93,4/6,6 % мас. при плотности заряда 1,800 г/см<sup>3</sup>.

1. Максимальная плотность состава:

$$1/\rho_{\max} = 0,934/1,904 + 0,066/1,25,$$

отсюда  $\rho_{\max} = 1,841$  г/см<sup>3</sup> ( $\rho_{\text{мк}}$  октогена — 1,904 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{д}}$  эстана — 1,25 г/см<sup>3</sup>).

Парциальная плотность октогена в смеси  $\rho_{\text{н}} = 0,934 \cdot 1,841 = 1,719$  г/см<sup>3</sup>.

2. Скорость детонации октогена при плотности  $\rho_{\text{н}}$

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 8,08 + 3,34(1,719 - 1,60) = 8,48 \text{ км/с } (D_{1,60}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

3. Для эстана (полиэфируретановый эластомер):

$$[-O(CH_2)_2OCONH(CH_2)_4NHCO-]_m \quad N = 28; \quad M_{\text{д}} = 202,21$$

$$A_{\text{д}} = 10^3 \frac{28}{202,21} 1,25 = 173,1 \text{ г-ат/л};$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 10^{-4} 173,1^2 \frac{0,066 \cdot 1,841}{1,25} = 0,29 \text{ км/с.}$$

4. Скорость детонации состава:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = 8,48 + 0,29 = 8,77$  км/с;

б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 8,77 - 1,904 \cdot 3,34(1 - 1,800/1,841) = 8,63$  км/с;

Опытное значение  $D_{\rho_0} = 8,67$  км/с [150].



5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва состава:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 2,7\beta = 2,70 + 2,7 \cdot 0,066 = 2,88 \quad (n_{\text{ВВ}} \text{ — из табл. 2.4}).$$

$$\text{Детонационное давление } P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{ВК}} + 1} = 10 \frac{1,800 \cdot 8,63^2}{2,88 + 1} = 345 \text{ кбар.}$$

Опытное значение  $P_J = 334$  кбар [150].

### Пример 3. Водонаполненное ВВ

Рассчитать скорость идеальной детонации водонаполненного гексогена 75/25 % мас. при плотности заряда 1,50 г/см<sup>3</sup>.

1. Максимальная плотность смеси  $1/\rho_{\text{max}} = 0,75/1,80 + 0,25/1,00$ , отсюда  $\rho_{\text{max}} = \rho_0 = 1,500$  г/см<sup>3</sup> ( $\rho_{\text{мк}}$  гексогена — 1,80 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{д}}$  воды — 1,00 г/см<sup>3</sup>).

Парциальная плотность гексогена в смеси  $\rho_{\text{н}} = 0,75 \cdot 1,50 = 1,125$  г/см<sup>3</sup>.

2. Скорость детонации гексогена при плотности  $\rho_{\text{н}}$ :

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 6,08 + 3,33(1,125 - 1,00) = 6,50 \text{ км/с } (D_{1,0}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

3. Для H<sub>2</sub>O: N = 3;  $M_{\text{д}} = 18,015$ :

$$A_{\text{д}} = 10^3 \frac{3}{18,015} 1,00 = 166,5 \text{ г-ат/л;}$$

$$\Delta D_{\text{д}} = 10^{-4} 166,5^2 \frac{0,25 \cdot 1,50}{1,00} = 1,04 \text{ км/с.}$$

4. Скорость детонации смеси: при  $\rho_{\text{max}} = \rho_0$   $D = 6,50 + 1,04 = 7,54$  км/с. Опытное значение  $D_{1,50} = 7,50$  км/с [151].

### Пример 4. Смесь органических добавок

Рассчитать скорость и давление идеальной детонации смеси гексоген/полисилоксан/меламин 60/10/30 % мас. при плотности заряда 1,55 г/см<sup>3</sup>.

1. Максимальная плотность смеси  $1/\rho_{\text{max}} = 0,60/1,80 + 0,10/0,98 + 0,30/1,573$ , отсюда  $\rho_{\text{max}} = 1,597$  г/см<sup>3</sup> ( $\rho_{\text{д}}$  полисилоксана — 0,98 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{д}}$  меламина — 1,573 г/см<sup>3</sup>).

Парциальная плотность гексогена в смеси  $\rho_{\text{н}} = 0,60 \cdot 1,597 = 0,958$  г/см<sup>3</sup>.

2. Скорость детонации гексогена при плотности  $\rho_{\text{н}}$ :

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 6,08 + 3,33(0,958 - 1,00) = 5,94 \text{ км/с } (D_{1,0}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

3. Для полисилоксана:  $[-\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{O-}]_m$   $N = 10$ ;  $M_d = 74,155$ :

$$A_d = 10^3 \frac{10}{74,155} 0,98 = 132,2 \text{ г-ат/л};$$

$$\Delta D_d = 10^{-4} 132,2^2 \frac{0,10 \cdot 1,597}{0,98} = 0,285 \text{ км/с}.$$

Для меламина:  $\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6$   $N = 15$ ;  $M_d = 126,123$ :

$$A_d = 10^3 \frac{15}{126,123} 1,573 = 187,1 \text{ г-ат/л};$$

$$\Delta D_d = 10^{-4} 187,1^2 \frac{0,30 \cdot 1,597}{1,573} = 1,066 \text{ км/с}.$$

4. Скорость детонации смеси:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = 5,94 + 0,285 + 1,066 = 7,29 \text{ км/с};$

б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 7,29 - 1,80 \cdot 3,33(1 - 1,55/1,597) = 7,11 \text{ км/с}.$

Опытное значение  $D_{\rho_0} = 7,07 \text{ км/с}.$

5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва смеси:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 2,7\beta = 2,70 + 2,7(0,10 + 0,30) = 3,78 \text{ } (n_{\text{ВВ}} \text{ — из табл. 2.4}).$$

$$\text{Детонационное давление } P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{ВК}} + 1} = 10 \frac{1,55 \cdot 7,11^2}{3,78 + 1} = 164 \text{ кбар}.$$

Опытное значение  $P_J = 160 \text{ кбар}.$

**Пример 5.** Добавка — порошкообразный металл

Рассчитать скорость и давление идеальной детонации смеси ТЭНа с магнием (100 мкм) 80/20 % мас. при плотности заряда  $1,66 \text{ г/см}^3$ .

1. Максимальная плотность смеси

$$1/\rho_{\max} = 0,80/1,773 + 0,20/1,74, \text{ отсюда } \rho_{\max} = 1,766 \text{ г/см}^3$$

( $\rho_{\text{мк}}$  ТЭНа —  $1,773 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho_d$  магния —  $1,74 \text{ г/см}^3$ ).

Парциальная плотность ТЭНа в смеси  $\rho_n = 0,80 \cdot 1,766 = 1,413 \text{ г/см}^3$ .

2. Скорость детонации ТЭНа при плотности  $\rho_n$ :

$$D_{\rho_n} = 5,90 + 3,25(1,413 - 1,00) = 7,24 \text{ км/с } (D_{1,0}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

$$\begin{aligned} 3. \text{ Для магния: } \Delta D_d &= a(b - \rho_d) \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_d} = 0,575(9,1 - 1,74) \frac{0,20 \cdot 1,766}{1,74} = \\ &= 0,86 \text{ км/с } (a, b \text{ при } d_d > 10 \text{ мкм — из табл. 2.11}). \end{aligned}$$

## 4. Скорость детонации смеси:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = 7,24 + 0,86 = 8,10$  км/с;б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 8,10 - 1,773 \cdot 3,25(1 - 1,66/1,766) = 7,75$  км/с.Опытное значение  $D_{\rho_0} = 7,71$  км/с [152].

## 5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва смеси:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 3,1\gamma = 2,80 + 3,1 \cdot 0,20 = 3,42 \quad (n_{\text{ВВ}} \text{ — из табл. 2.4}).$$

$$\text{Детонационное давление } P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{ВК}} + 1} = 10 \frac{1,66 \cdot 7,75^2}{3,42 + 1} = 226 \text{ кбар.}$$

Опытное значение  $P_J = 225$  кбар [152].**Пример 6.** Добавка — субдисперсный металл

Рассчитать скорость и давление идеальной детонации смеси тротила с вольфрамом (0,4 мкм) 85/15 % мас. при плотности заряда 1,49 г/см<sup>3</sup>.

## 1. Максимальная плотность смеси:

$$1/\rho_{\max} = 0,85/1,663 + 0,15/19,3, \text{ отсюда } \rho_{\max} = 1,927 \text{ г/см}^3$$

(  $\rho_{\text{мк}}$  тротила — 1,663 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{д}}$  вольфрама — 19,3 г/см<sup>3</sup>)

$$\text{Парциальная плотность тротила в смеси } \rho_{\text{н}} = 0,85 \cdot 1,927 = 1,638 \text{ г/см}^3$$

2. Скорость детонации тротила при плотности  $\rho_{\text{н}}$ :

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 6,97 + 3,03(1,638 - 1,60) = 7,09 \text{ км/с } (D_{1,60}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

## 3. Для вольфрама:

$$\begin{aligned} \Delta D_{\text{д}} &= a(b - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_{\text{д}}} = 1,125(4,0 - 19,3) \frac{0,15 \cdot 1,927}{19,3} = \\ &= -0,26 \text{ км/с } (a, b \text{ при } d_{\text{д}} < 10 \text{ мкм — из табл. 2.11}). \end{aligned}$$

## 4. Скорость детонации смеси:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = 7,09 - 0,26 = 6,83$  км/с;б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 6,83 - 1,663 \cdot 3,03(1 - 1,49/1,927) = 5,69$  км/с.Опытное значение  $D_{\rho_0} = 5,68$  км/с [102].

## 5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва смеси:

$$n_{\text{ВК}} = n_{\text{ВВ}} + 3,1\gamma = 2,80 + 3,1 \cdot 0,15 = 3,26 \quad (n_{\text{ВВ}} \text{ — из табл. 2.4}).$$

$$\text{Детонационное давление } P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{БК}} + 1} = 10 \frac{1,49 \cdot 5,69^2}{3,26 + 1} = 113 \text{ кбар.}$$

Опытное значение  $P_J = 113$  кбар [102].

**Пример 7.** Добавка — неорганическая соль

Рассчитать скорость и давление идеальной детонации смеси тротила с хлористым натрием (300 мкм) 60/40 % мас. при плотности заряда  $1,36 \text{ г/см}^3$ .

1. Максимальная плотность смеси:

$$1/\rho_{\text{max}} = 0,60/1,663 + 0,40/2,16, \text{ отсюда } \rho_{\text{max}} = 1,832 \text{ г/см}^3$$

( $\rho_{\text{мк}}$  тротила —  $1,663 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho_{\text{д}}$  NaCl —  $2,16 \text{ г/см}^3$ )

Парциальная плотность тротила в смеси  $\rho_{\text{н}} = 0,60 \cdot 1,832 = 1,099 \text{ г/см}^3$ .

2. Скорость детонации тротила при плотности  $\rho_{\text{н}}$ :

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 5,15 + 3,03(1,099 - 1,00) = 5,45 \text{ км/с } (D_{1,0}, M — \text{из табл. 2.8}).$$

$$3. \text{ Для NaCl: } \Delta D_{\text{д}} = a(b - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \rho_{\text{max}}}{\rho_{\text{д}}} = 1,76(3,6 - 2,16) \frac{0,40 \cdot 1,832}{2,16} = 0,86 \text{ км/с } (a, b — \text{из табл. 2.11}).$$

4. Скорость детонации смеси:

$$a) \text{ при } \rho_{\text{max}} \quad D_{\rho_{\text{max}}} = 5,45 + 0,86 = 6,31 \text{ км/с;}$$

$$б) \text{ при } \rho_0 \quad D_{\rho_0} = 6,31 - 1,663 \cdot 3,03(1 - 1,36/1,832) = 5,01 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_{\rho_0} = 4,88 \text{ км/с}$  [152].

5. Эффективный показатель политропы продуктов взрыва смеси:

$$n_{\text{БК}} = n_{\text{ВВ}} + 3,1\gamma = 2,80 + 3,1 \cdot 0,40 = 4,04 \quad (n_{\text{ВВ}} — \text{из табл. 2.4}).$$

$$\text{Детонационное давление } P_J = 10 \frac{\rho_0 D_{\rho_0}^2}{n_{\text{БК}} + 1} = 10 \frac{1,36 \cdot 5,01^2}{4,04 + 1} = 67,7 \text{ кбар.}$$

Опытное значение  $P_J = 66,5$  кбар [152].

**Пример 8.** Металлизированный взрывчатый состав

Рассчитать скорость идеальной детонации взрывчатого состава октоген/алюминий (>10 мкм)/ Вайтон А 65,7/18,9/15,4 % мас. при плотности заряда  $1,990 \text{ г/см}^3$ .

$$1. \text{ Максимальная плотность состава } 1/\rho_{\text{max}} = 0,657/1,904 + 0,189/2,70 + 0,154/1,79, \text{ отсюда } \rho_{\text{max}} = 1,996 \text{ г/см}^3 \quad (\rho_{\text{мк}} \text{ октогена} — 1,904 \text{ г/см}^3, \rho_{\text{д}} \text{ Al} — 2,70 \text{ г/см}^3, \rho_{\text{д}} \text{ Вайтона А} — 1,79 \text{ г/см}^3).$$

Парциальная плотность октогена в смеси  $\rho_n = 0,657 \cdot 1,996 = 1,311$  г/см<sup>3</sup>.

2. Скорость детонации октогена при плотности  $\rho_n$ :

$$D_{\rho_n} = 8,08 + 3,34(1,311 - 1,60) = 7,12 \text{ км/с } (D_{1,60}, M \text{ — из табл. 2.8}).$$

3. Для Вайтона А (сополимера винилиденфторида и гексафторпропилена 70/30 % мас.):  $[-CH_2-CF_2-]_m[-CF_2-CF(CF_3)-]_n$ :

$$\begin{aligned} A_d &= 10^3 \left( \frac{N_1}{M_1} m_1 + \frac{N_2}{M_2} m_2 \right) \rho_d = \\ &= 10^3 \left( \frac{6}{64,03} 0,7 + \frac{9}{150,02} 0,3 \right) 1,79 = 149,6 \text{ г-ат/л} \end{aligned}$$

( $N_1 = 6$ ;  $N_2 = 9$ ;  $M_1 = 64,03$ ;  $M_2 = 150,02$ ;  $m_1 = 0,7$ ;  $m_2 = 0,3$ );

$$\Delta D_d = 10^{-4} 149,6^2 \frac{0,154 \cdot 1,996}{1,79} = 0,39 \text{ км/с.}$$

Для алюминия:

$$\Delta D_d = a(b - \rho_d) \frac{\beta \rho_{\max}}{\rho_d} = 0,575(9,1 - 2,70) \frac{0,189 \cdot 1,996}{2,70} = 0,52 \text{ км/с}$$

( $a, b$  — из табл. 2.11).

4. Скорость детонации состава:

а) при  $\rho_{\max}$   $D_{\rho_{\max}} = 7,12 + 0,39 + 0,52 = 8,03$  км/с;

б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 8,03 - 1,904 \cdot 3,34(1 - 1,990/1,996) = 8,01$  км/с.

Опытное значение  $D_{\rho_0} = 8,16$  км/с [153].

**Пример 9.** Смесь двух ВВ с металлом

Рассчитать скорость идеальной детонации литьевого взрывчатого состава «торпекс» гексоген/тротил/алюминий (>10 мкм) 41/41/18 % мас. при плотности заряда 1,81 г/см<sup>3</sup>.

1. Максимальная плотность состава  $1/\rho_{\max} = 0,41/1,80 + 0,41/1,663 + 0,18/2,70$ , отсюда  $\rho_{\max} = 1,848$  г/см<sup>3</sup> ( $\rho_{\text{мк}}$  гексогена — 1,80 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{мк}}$  тротила — 1,663 г/см<sup>3</sup>,  $\rho_d$  Al — 2,70 г/см<sup>3</sup>).

Парциальная плотность смеси ВВ в составе  $\rho_n = (0,41 + 0,41)1,848 = 1,515$  г/см<sup>3</sup>.

2. Скорость детонации смеси гексогена и тротила при плотности  $\rho_n$ :

$$D_{\rho_n} = \alpha^{-1} \sum D_i \alpha_i;$$

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 8,03 + 3,33(1,515 - 1,60) = 7,75 \text{ км/с (гексоген);}$$

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 6,97 + 3,03(1,515 - 1,60) = 6,71 \text{ км/с (тротил);}$$

$$D_{\rho_{\text{н}}} = (7,75 \cdot 0,41 + 6,71 \cdot 0,41) / 0,82 = 7,23 \text{ км/с (смесь ВВ).}$$

3. Для алюминия:

$$\Delta D_{\text{д}} = a(b - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \rho_{\text{max}}}{\rho_{\text{д}}} = 0,575(9,1 - 2,70) \frac{0,180 \cdot 1,848}{2,70} = 0,45 \text{ км/с}$$

( $a, b$  — из табл. 2.8).

4. Скорость детонации состава:

а) при  $\rho_{\text{max}}$   $D_{\rho_{\text{max}}} = 7,23 + 0,45 = 7,68 \text{ км/с;}$

б) при  $\rho_0$   $D_{\rho_0} = 7,68 - 1,73 \cdot 3,18(1 - 1,81/1,848) = 7,57 \text{ км/с}$

(плотность смеси ВВ —  $1,73 \text{ г/см}^3$ ;  $M$  смеси ВВ —  $3,18$ ).

Опытное значение  $D_{\rho_0} = 7,49 \text{ км/с [108].}$

### 2.2.3. РАСЧЕТ СКОРОСТИ ДЕТОНАЦИИ АММИАЧНОСЕЛИТРЕННЫХ И ПЕРХЛОРАТНЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ

#### Аммиачноселитренные взрывчатые композиции

Идеальные скорости детонации смесей аммонийной селитры (АС) со взрывчатыми веществами и органическими соединениями (аммиачноселитренные ВВ), а также чистой АС при реальной плотности заряда ( $D_{\rho_0}$ ) вычисляются по методу расчета, изложенному в разделе 2.1.2. Для АС и аммиачноселитренных ВВ в табл. 2.1 приведен вклад группы  $\text{NO}_3^-$ :

- 86,5 (при  $\alpha \leq 1,0$ );
- 86,5 – 321 ( $\alpha - 1,0$ ) (при  $\alpha > 1,0$ ).

Вклады групп  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$  для каждого компонента смеси берутся или вычисляются по кислородному коэффициенту смеси.

Для аммиачноселитренных ВВ, содержащих инертные компоненты (неорганические соли, воду и др.), используется метод расчета из раздела 2.2.2.

Для аммоналов — стехиометрических алюминизированных аммиачноселитренных ВВ, для которых кислородный баланс равен 0, идеальная скорость детонации  $D_{\text{АС/ВВ/Al}}$ , км/с рассчитывается по следующей формуле:

$$\frac{D_{\text{АС/ВВ/Al}}}{D_{\text{АС/ВВ}}} = \left( \frac{n_{\text{АС/ВВ/Al}}}{n_{\text{АС/ВВ}}} \right)^{0,76} \sqrt{\frac{Q_{\text{АС/ВВ/Al}} - q_{\text{пр}}}{Q_{\text{АС/ВВ}}}}, \quad (2.63)$$

где  $D_{AC/BB}$  — скорость детонации двойной смеси при пористости, равной пористости тройной смеси, км/с;  $n_{AC/BB/Al}$ ,  $n_{AC/BB}$  — число молей газообразных продуктов взрыва тройной и двойной смеси, моль/кг;  $Q_{AC/BB/Al}$ ,  $Q_{AC/BB}$  — теплота взрыва тройной и двойной смеси, кДж/кг;  $q_{пр}$  — тепловые потери на прогрев исходного Al в смеси до  $T_{пл}$  и образовавшегося  $Al_2O_3$  до  $T_{взр}$ .

### Примеры расчета идеальной скорости детонации аммиачноселитренных взрывчатых композиций различного вида

#### Пример 1. Аммонийная селитра (АС)

1.  $H_4N_2O_3$ ,  $M_{BB} = 80,046$ ;  $\rho_0 = 1,0$  г/см<sup>3</sup>;  $\alpha = 3/2 = 1,50$ .

2. Расчленим структурную формулу АС ( $^+NH_4^-NO_3$ ) на группы и связи между ними в соответствии с табл. 2.1:

Группы		Связи	
Вид	Число	Вид	Число
$^+NH_4$	1	$\begin{array}{c}   \\ \text{---} N^{\oplus} \text{---} NO_3^{\ominus} \\   \end{array}$	1
$^-NO_3$	1		

Вычисляем сумму вкладов групп и связей:

$$\sum n_i F_i + \sum n_j N_j = F_{^+NH_4} + F_{^-NO_3} + N_{^+NN^-} = 43,2 - 74,0 + 30,8 = 0.$$

Вклад  $^-NO_3$  группы ( $F_{^-NO_3}$ ) взят при  $\alpha > 1,0$ :  $86,5 - 321(1,50 - 1,0) = -74,0$ .

3. Рассчитываем идеальную скорость детонации АС при плотности 1,0 г/см<sup>3</sup> по формуле (2.16):

$$D_{\rho_0} = 2,77 + \frac{\rho_0}{M_{BB}} \left( \sum n_i F_i + \sum n_j N_j \right) = 2,77 + \frac{1,00 \cdot 0}{80,046} = 2,77 \text{ км/с.}$$

Опытное значение 2,75 км/с (заряд диаметром 460 мм) [103].

**Пример 2. Аммонит 6ЖВ** (смесь АС и тротила 79/21 % мас.) при плотности зарядов 1,0 г/см<sup>3</sup> и 1,45 г/см<sup>3</sup>

1.  $H_4N_2O_3$ ,  $M_{BB} = 80,046$ ;  $\alpha = 1,50$ .

Тротил (ТНТ)  $C_7H_5N_3O_6$ ,  $M_{BB} = 227,131$ ;  $\alpha = 0,363$ . В 1000 г смеси:

$$m_1 = \frac{790}{80,046} = 9,869 \text{ молей АС}, \quad m_2 = \frac{210}{227,131} = 0,925 \text{ молей ТНТ}.$$

Кислородный коэффициент смеси:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{см}} &= \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} = \\ &= \frac{3 \cdot 9,87 + 6 \cdot 0,925}{2(7 \cdot 0,925) + \frac{1}{2}(4 \cdot 9,87 + 5 \cdot 0,925)} = 1,00. \end{aligned}$$

2. Скорость детонации смеси по формуле (2.17):

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} \left( \sum m_i \delta_i \right)$$

а) АС,  $^+\text{NH}_4^- \text{NO}_3$

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = F_{^+\text{NH}_4} + F_{^- \text{NO}_3} + N_{^+ \text{NN}^-} = \\ &= 43,2 + 86,5 + 30,8 = 160,5 \end{aligned}$$

(так как смесь содержит ВВ — окислитель (АС), вклады групп  $^- \text{NO}_3$  и  $\text{NO}_2$  для каждого компонента смеси берутся или вычисляются по кислородному коэффициенту смеси — по табл. 2.1:  $F_{^- \text{NO}_3} = 86,5$ );

б) ТНТ

$$\begin{aligned} \delta_2 &= \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = \\ &= F_{\text{CH}_3} + 4F_{\text{C}} + 2F_{\text{CH}} + 3F_{\text{NO}_2} + 4N_{\text{C-C}} + 3N_{\text{C=C}} + 3N_{\text{C-N}} = \\ &= 1,5 + 4 \cdot 6,6 + 2(-8,4) + 3 \cdot 175,8 + 4 \cdot 13,4 + 3 \cdot (-1,6) + 3 \cdot 4,4 = 600,5 \end{aligned}$$

(содержание водорода в ТНТ  $\frac{5,04}{227,131} \cdot 100 = 2,22\%$ , следовательно,  $F_{\text{CH}_3} = 1,5$ ).

Скорость детонации смеси при плотности  $1,0 \text{ г/см}^3$ :

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{1,0}{1000} (9,869 \cdot 160,5 + 0,925 \cdot 600,5) = 4,91 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $4,90 \text{ км/с}$  [155].

Скорость детонации смеси при плотности  $1,45 \text{ г/см}^3$ :

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{1,45}{1000} (9,869 \cdot 160,5 + 0,925 \cdot 600,5) = 5,87 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $5,70 \text{ км/с}$  [155].



**Пример 3.** Аммотол 50/50 (смесь АС и тротила 50/50 % мас.) при плотности заряда 1,0 г/см<sup>3</sup>

1.  $\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_3$ ,  $M_{\text{BB}} = 80,046$ ;  $\alpha = 1,50$ .

Тротил (ТНТ),  $\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$ ,  $M_{\text{BB}} = 227,131$ ;  $\alpha = 0,363$ .

В 1000 г смеси:

$$m_1 = \frac{500}{80,046} = 6,246 \text{ молей АС}, \quad m_2 = \frac{500}{227,131} = 2,201 \text{ молей ТНТ}.$$

Кислородный коэффициент смеси:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{см}} &= \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} = \\ &= \frac{3 \cdot 6,246 + 6 \cdot 2,201}{2(7 \cdot 2,201) + \frac{1}{2}(4 \cdot 6,246 + 5 \cdot 2,201)} = 0,65. \end{aligned}$$

2. Скорость детонации смеси по формуле (2.17):

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} (\sum m_i \delta_i)$$

а) АС,  $^+\text{NH}_4^- \text{NO}_3$  при  $\alpha = 0,65$   $\delta_1 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 160,5$  (из примера 2)

б) ТНТ при  $\alpha = 0,65$   $\delta_2 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 600,5$  (из примера 2)

Скорость детонации смеси при плотности 1,0 г/см<sup>3</sup>:

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{1,0}{1000} (6,246 \cdot 160,5 + 2,201 \cdot 600,5) = 5,09 \text{ км/с}.$$

Опытное значение 5,10 км/с [155].

**Пример 4.** Динафталит (смесь АС и динитронафталины 88/12 % мас.) при плотности заряда 0,9 г/см<sup>3</sup>

1.  $\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_3$ ,  $M_{\text{BB}} = 80,046$ ;  $\alpha = 1,50$

Динитронафталин (ДНН),  $\text{C}_{10}\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_4$ ,  $M_{\text{BB}} = 218,162$ ;  $\alpha = 0,17$ .

В 1000 г смеси:

$$m_1 = \frac{880}{80,046} = 10,993 \text{ молей АС}, \quad m_2 = \frac{120}{218,162} = 0,550 \text{ молей ДНН}.$$

Кислородный коэффициент смеси:

$$\alpha_{\text{см}} = \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} =$$

$$= \frac{3 \cdot 10,993 + 4 \cdot 0,550}{2(10 \cdot 0,550) + \frac{1}{2}(4 \cdot 10,993 + 6 \cdot 0,550)} = 1,016.$$

2. Скорость детонации смеси по формуле (2.17)

а) АС,  $^+\text{NH}_4^- \text{NO}_3$  при  $\alpha = 1,016$ :

$$\delta_1 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = F_{+\text{NH}_4} + F_{-\text{NO}_3} + N_{+\text{NN}^-} =$$

$$= 43,2 + 81,4 + 30,8 = 155,4;$$

б) ДНН при  $\alpha = 1,016$ :

$$\delta_2 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 4F_{\text{C}} + 6F_{\text{CH}} + 2F_{\text{NO}_2} + 6N_{\text{C-C}} + 5N_{\text{C=C}} + 2N_{\text{C-N}} =$$

$$= 4 \cdot 6,6 + 6(-8,4) + 2 \cdot 174,8 + 6 \cdot 13,4 + 5(-1,6) + 2 \cdot 4,4 = 406,8.$$

Скорость детонации смеси при плотности  $0,9 \text{ г/см}^3$ :

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} \left( \sum m_i \delta_i \right) =$$

$$= 2,77 + \frac{0,9}{1000} (10,993 \cdot 155,4 + 0,550 \cdot 406,8) = 4,51 \text{ км/с}.$$

Опытное значение  $4,60 \text{ км/с}$  [155].

**Пример 5.** Предохранительный взрывчатый состав ПЖВ-20 (смесь АС, ТНТ и NaCl 64/16/20 % мас.) при плотности заряда ( $\rho_0$ )  $1,0 \text{ г/см}^3$

1. Скорость детонации ПЖВ-20 ( $D_{\rho_0}$ ) рассчитывается по формуле (2.47), раздел 2.2.2:  $D_{\rho_0} = D_{\rho_{\text{н}}} + \Delta D_{\text{д}}$ , где  $D_{\rho_{\text{н}}}$  — скорость детонации смеси АС и ТНТ при её парциальной плотности в составе ( $\rho_{\text{н}}$ );  $\Delta D_{\text{д}}$  — вклад NaCl:

$$\rho_{\text{н}} = \alpha \rho_0 = (0,64 + 0,16)1,0 = 0,80 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчет  $D_{\rho_{\text{н}}}$ :

АС  $\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_3$ ,  $M_{\text{БВ}} = 80,046$ ;  $\alpha = 1,50$ .

Тротил (ТНТ),  $\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$ ,  $M_{\text{БВ}} = 227,131$ ;  $\alpha = 0,363$ .

В 800 г смеси ВВ:

$$m_1 = \frac{640}{80,046} = 7,995 \text{ молей АС}, \quad m_2 = \frac{160}{227,131} = 0,704 \text{ молей ТНТ}.$$

Кислородный коэффициент смеси:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{см}} &= \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} = \\ &= \frac{3 \cdot 7,995 + 6 \cdot 0,704}{2(7 \cdot 0,704) + \frac{1}{2}(4 \cdot 7,995 + 5 \cdot 0,704)} = 1,02. \end{aligned}$$

Скорость детонации смеси по формуле (2.17):

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} (\sum m_i \delta_i)$$

а) АС,  $^+\text{NH}_4^- \text{NO}_3$  при  $\alpha = 1,02$   $\delta_1 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 154,1$ ;

б) ТНТ при  $\alpha = 1,02$   $\delta_2 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 599,2$

(вклады групп  $^-\text{NO}_3$  и  $\text{NO}_2$  взяты из табл. 2.1 при  $\alpha = 1,02$ )

Скорость детонации смеси при плотности  $\rho_{\text{н}} = 0,80 \text{ г/см}^3$ :

$$D_{\rho_{\text{н}}} = 2,77 + \frac{0,80}{800} (7,995 \cdot 154,1 + 0,704 \cdot 599,2) = 4,42 \text{ км/с}.$$

3. Расчет  $\Delta D_{\text{д}}$ :

$$\Delta D_{\text{д}} = a(b - \rho_{\text{д}}) \frac{\beta \rho_{\text{max}}}{\rho_{\text{д}}} = 1,76(3,6 - 2,16) \frac{0,20 \cdot 1,0}{2,16} = 0,23 \text{ км/с}.$$

4. Расчет  $D_{\rho_0}$ :  $D_{\rho_0} = D_{\rho_{\text{н}}} + \Delta D_{\text{д}} = 4,42 + 0,23 = 4,67 \text{ км/с}.$

Опытное значение 4,54 км/с [155].

**Пример 6.** Порэммит 1-А (смесь АС, индустриального масла, воды 70/6/24 % мас.) при плотности заряда ( $\rho_0$ )  $1,20 \text{ г/см}^3$

1. Скорость детонации Порэммита 1-А ( $D_{\rho_0}$ ) рассчитывается по формуле (2.47), раздел 2.2.2:  $D_{\rho_0} = D_{\rho_{\text{н}}} + \Delta D_{\text{д}}$ , где  $D_{\rho_{\text{н}}}$  — скорость детонации смеси АС и индустриального масла при её парциальной плотности в составе ( $\rho_{\text{н}}$ );  $\Delta D_{\text{д}}$  — вклад  $\text{H}_2\text{O}$ :

$$\rho_{\text{н}} = \alpha \rho_0 = (0,70 + 0,06)1,20 = 0,912 \text{ г/см}^3.$$

2. Расчет  $D_{\rho_n}$ :

$$\text{AC, H}_4\text{N}_2\text{O}_3, \quad M_{\text{BB}} = 80,046; \quad \alpha = 1,50.$$

Индустриальное масло — основной элемент соединений  $(-\text{CH}_2-)_n$ ,  
 $M_{\text{CH}_2} = 14,027$ .

В 1000 г смеси:

$$m_1 = \frac{700}{80,046} = 8,745 \text{ молей AC, } m_2 = \frac{60}{14,027} = 4,277 \text{ молей } (-\text{CH}_2-).$$

Кислородный коэффициент смеси:

$$\begin{aligned} \alpha_{\text{см}} &= \frac{c_1 m_1 + c_2 m_2}{2(a_1 m_1 + a_2 m_2) + \frac{1}{2}(b_1 m_1 + b_2 m_2)} = \\ &= \frac{3 \cdot 8,745}{2(1 \cdot 4,277) + \frac{1}{2}(4 \cdot 8,745 + 2 \cdot 4,277)} = 0,865. \end{aligned}$$

Скорость детонации смеси по формуле (2.17):

$$D_{\text{см}} = 2,77 + \frac{\rho_{\text{см}}}{1000} (\sum m_i \delta_i)$$

а) AC,  $^+\text{NH}_4^- \text{NO}_3$  при  $\alpha = 0,865$

$$\delta_1 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = 160,5 \text{ (из примера 2);}$$

б)  $(-\text{CH}_2-)$   $\delta_2 = \sum n_i F_i + \sum n_j N_j = -0,9$ .

Скорость детонации смеси при плотности  $\rho_n = 0,912 \text{ г/см}^3$ :

$$D_{\rho_n} = 2,77 + \frac{0,912}{760} [8,745 \cdot 160,5 + 4,277 \cdot (-0,9)] = 4,45 \text{ км/с.}$$

3. Расчет  $\Delta D_{\text{H}_2\text{O}}$ :  $N = 3$ ;  $M_d = 18,015$ :

$$A_d = 10^3 \frac{3}{18,015} 1,00 = 166,5 \text{ г-ат/л;}$$

$$\Delta D_d = 10^{-4} 166,5^2 \frac{0,24 \cdot 1,20}{1,00} = 0,80 \text{ км/с.}$$

4. Расчет  $D_{\rho_0}$ :  $D_{\rho_0} = D_{\rho_n} + \Delta D_d = 4,45 + 0,80 = 5,25 \text{ км/с.}$

Опытное значение  $5,10 \text{ км/с.}$

### Перхлоратные взрывчатые композиции

В последнее время возрос интерес к энергетическим конденсированным системам, содержащим перхлорат аммония (ПХА). Введение в состав современных взрывчатых композиций ПХА позволяет существенно повысить параметры ударных волн при воздушном и подводном взрывах.

Анализ литературы выявил недостаточное количество работ по исследованию скоростей детонации ПХА различной дисперсности и его смесей с различными ВВ, а также неоднозначность известных экспериментальных скоростей детонации чистого ПХА. Так, по Касту, в железной трубе диаметром 35 мм при плотности  $1,17 \text{ г/см}^3$  скорость детонации ПХА равна  $2,50 \text{ км/с}$  [156]. По Эвансу (1965г) —  $3,75 \text{ км/с}$  при плотности  $1,0 \text{ г/см}^3$  [157].

В работе Донны Прайс (1967г) приведены скорости детонации ПХА (10 мкм) для зарядов без оболочек диаметром 50 мм: при плотности  $1,0 \text{ г/см}^3$  —  $3,40 \text{ км/с}$ ; при  $1,26 \text{ г/см}^3$  —  $4,2 \text{ км/с}$ ; при  $1,40 \text{ г/см}^3$  —  $4,4 \text{ км/с}$ . Для зарядов без оболочек диаметром 76 мм: при  $1,0 \text{ г/см}^3$  —  $3,78 \text{ км/с}$ , при  $1,26 \text{ г/см}^3$  —  $4,79 \text{ км/с}$ . При плотностях выше  $1,4 \text{ г/см}^3$  скорость детонации ПХА падает [158].

Нами исследовались близкие к идеальным скорости детонации относительно больших зарядов высокодисперсного ПХА и его смесей с различными ВВ, а также составов, содержащих алюминий, в толстостенных стальных трубах. Установлены зависимости скорости детонации ПХА от его плотности в широком интервале и скоростей детонации смесей от соотношения компонентов и кислородного коэффициента смесей. Предложена также полуэмпирическая экспресс-методика расчета скорости детонации тройных стехиометрических смесей ПХА/ВВ/Al [159–162].

Скорости детонации определялись методом ионизационных датчиков с помощью цифрового осциллографа с разрешающей способностью 5 нс. Для обеспечения режима детонации, близкого к идеальному ПХА, и смеси с ним подпрессовывались в стальные трубы диаметром 20 и 40 мм, с толщинами стенок 2,7 и 3,2 мм и длиной 150 и 200 мм соответственно. Трубы диаметром 20 мм использовались для всех смесей, содержащих более 50 % ВВ. Контрольные опыты показали, что для таких смесей скорости детонации при диаметрах 20 и 40 мм практически одинаковы. Для индивидуального ПХА использовались трубы только диаметром 40 мм. Надежность получаемых экспериментальных данных обеспечивалась двукратным повторением эксперимента, результатом каждого из которых являлось пять скоростей детонации, соответствующих пяти участкам заряда. Усреднение скоростей детонации по каждому эксперименту выполнялось методом наименьших квадратов.

Определена зависимость скорости детонации высокодисперсного ПХА (размер частиц 7 мкм) от его плотности в широком диапазоне от 0,70 до 1,58 г/см<sup>3</sup> (плотность монокристалла ПХА — 1,95 г/см<sup>3</sup>). Следует отметить, что ПХА с размером частиц 160 мкм в данных условиях детонирует с затуханием. Полученные экспериментальные данные для ПХА (7 мкм) приведены в табл. 2.20 и на рис. 2.4.

Таблица 2.20

**Плотности зарядов ( $\rho_0$ ) и скорости детонации ( $D$ )  
перхлората аммония (7 мкм)**

$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с
0,705	2,79	1,394	5,00
0,958	3,67	1,398	4,87
1,108	4,24	1,400	4,92
1,110	4,08	1,406	4,76
1,285	4,76	1,527	4,09
1,387	4,85	1,555	3,46
1,393	4,92	1,578	3,34

Скорость детонации ПХА линейно возрастает при повышении плотности от 0,700 до 1,394 г/см<sup>3</sup>. Предельное значение составляет  $4,97 \pm 0,03$  км/с. С дальнейшим увеличением плотности скорость детонации ПХА резко падает, что находится в согласии с результатами работы Донны Прайс [158].

Линейный участок полученной зависимости аппроксимируется следующим уравнением:

$$D_{\rho_0} = 2,85 + 3,07(\rho_0 - 0,7). \quad (2.63)$$

Как видно из уравнения (2.63), коэффициент  $M$  для перхлората аммония составляет  $3,07 \frac{\text{км/с}}{\text{г/см}^3}$ , скорость детонации при плотности 0,7 г/см<sup>3</sup> равна 2,85 км/с.

Далее исследовались зависимости скоростей детонации смесей ТЭН / ПХА (7 мкм) и гексоген / ПХА (7 мкм) от содержания ВВ в смесях. Смесей готовились путём тщательного механического перемешивания с выборочным контролем состава смеси. Средний размер частиц ВВ составлял: 50 мкм для ТЭНа и 30 мкм для гексогена. Плотность зарядов для большинства этих смесей была в относительно небольшом интервале 1,13–1,27 г/см<sup>3</sup>. Для сравнения исследовались аналогичные смеси с грубым перхлоратом аммония (160 мкм).

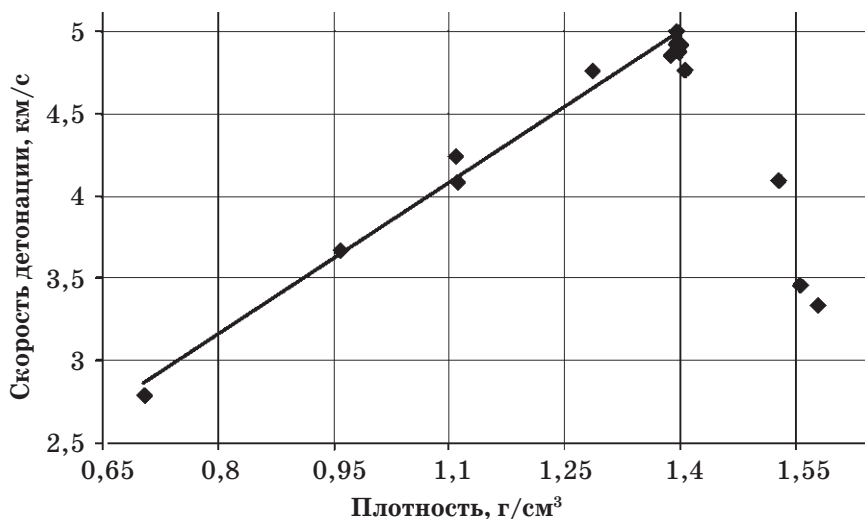


Рис. 2.4. Зависимость скорости детонации ПХА (7 мкм) от плотности заряда

Средние значения измеренных скоростей детонации всех исследованных смесей приведены в табл. 2.21.

Таблица 2.21

## Плотности зарядов и скорости детонации смесей ВВ / ПХА

Содержание ВВ в смеси, % мас.	Смеси ТЭН / ПХА				Смеси гексоген / ПХА			
	ПХА — 160 мкм		ПХА — 7 мкм		ПХА — 160 мкм		ПХА — 7 мкм	
	$\rho_0$ , г/см³	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см³	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см³	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см³	$D_{см}$ , км/с
10	1,234	3,92	1,200	4,69	1,236	3,73	1,200	4,67
	1,238	3,81			1,251	3,72		
20	1,240	4,40	1,135	4,80	1,268	4,50	0,828	3,78
	1,225	4,35			1,267	4,52		
30	1,230	4,85	1,190	5,18	1,270	5,08	1,168	5,30
	1,228	4,83			1,285	5,08		
40	1,216	5,01	1,158	5,26	1,267	5,51	1,243	5,71
	1,215	5,05						
50	1,179	5,24	1,203	5,58	1,243	5,73	1,138	5,58
							1,242	5,83
60	1,111	5,23	1,148	5,52	1,284	6,05	1,211	6,07
	1,144	5,26			1,293	5,99		

Окончание табл. 2.21

Содержание ВВ в смеси, % мас.	Смеси ТЭН / ПХА				Смеси гексоген / ПХА			
	ПХА — 160 мкм		ПХА — 7 мкм		ПХА — 160 мкм		ПХА — 7 мкм	
	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{см}$ , км/с	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{см}$ , км/с
70	1,125	5,45	1,197	5,79	1,235	6,08	1,240	6,38
	1,138	5,47			1,280	6,12		
80	1,064	5,36	1,136	5,82	1,278	6,41	1,158	6,21
	1,086	5,39			1,275	6,44		
90	0,998	5,38	1,200	6,15	1,283	6,70	1,272	6,77
					1,260	6,62		

Далее экспериментальные скорости детонации приводились к одной плотности зарядов ( $\rho_0 = 1,20$  г/см<sup>3</sup>) по коэффициенту  $M$  смеси, рассчитанному аддитивно по коэффициентам  $M$  для ТЭНа (3,25), гексогена (3,33) и ПХА (3,07). На рис. 2.5 и 2.6 представлены полученные результаты для смесей ВВ/ПХА (7 мкм). Там же для сравнения построены аналогичные зависимости для смесей ВВ/ПХА (160 мкм).

Из графиков видно, что смеси на грубом ПХА в данных условиях детонируют в неидеальном режиме, по этой причине данные для смесей с ПХА (160 мкм) не могут быть приняты для создания корректной методики расчета скоростей детонации смесей ВВ/ПХА.

На рис. 2.5, 2.6 виден также схожий характер зависимостей скорости детонации от содержания различных ВВ в смеси. Нелинейность графиков связана с вкладом ПХА не только как ВВ, но и как сильного

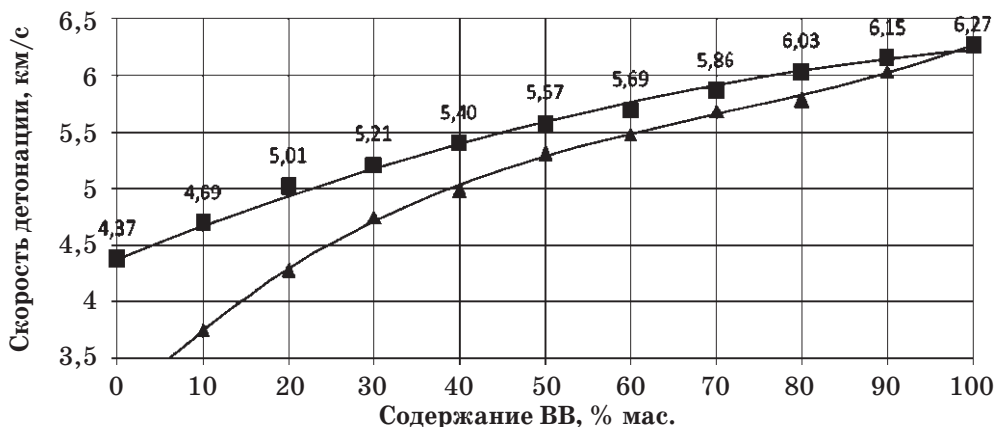


Рис. 2.5. Зависимость скоростей детонации смесей ТЭН/ПХА от содержания ТЭНа в смесях при  $\rho_0 = 1,20$  г/см<sup>3</sup>: нижняя кривая — ПХА 160 мкм; верхняя кривая — ПХА 7 мкм



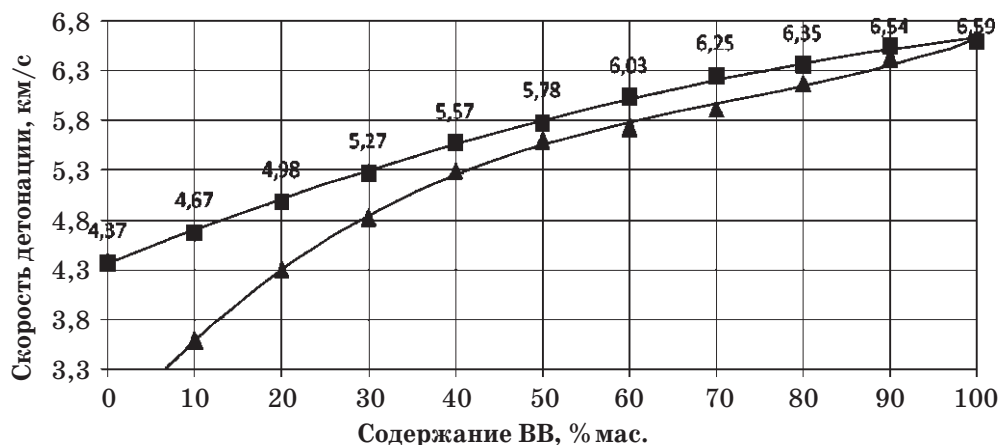


Рис. 2.6. Зависимость скоростей детонации смесей гексоген / ПХА от содержания гексогена в смесях при  $\rho_0 = 1,20 \text{ г/см}^3$ : нижняя кривая — ПХА 160 мкм; верхняя кривая — ПХА 7 мкм

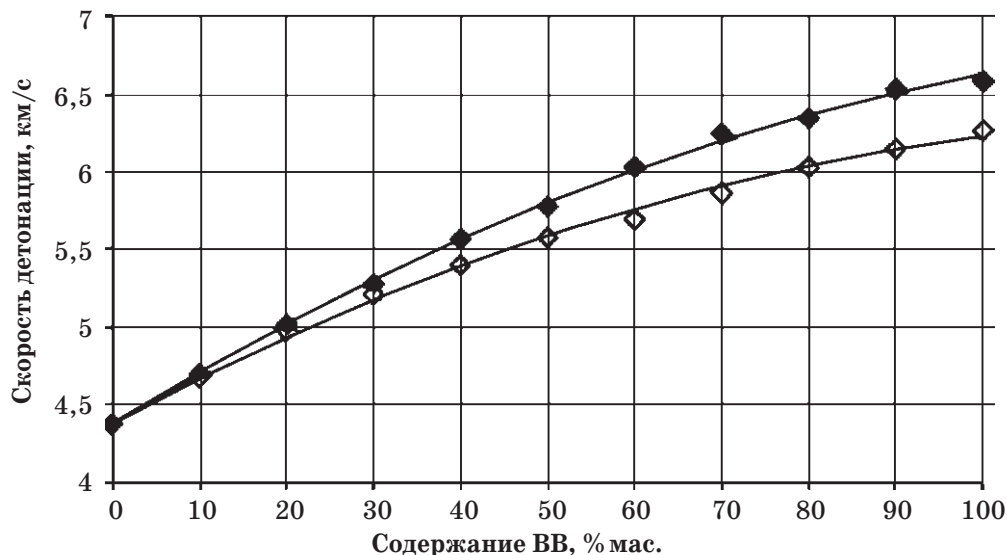


Рис. 2.7. Зависимость скоростей детонации смесей ВВ / ПХА (7 мкм) от содержания ВВ при  $\rho_0 = 1,20 \text{ г/см}^3$ : нижняя кривая — ТЭН / ПХА; верхняя кривая — гексоген / ПХА

окислителя, продукты разложения которого химически взаимодействуют с продуктами разложения ВВ.

При сравнении графиков зависимостей скоростей детонации и кислородных коэффициентов смесей с различными ВВ от содержания ВВ (рис. 2.7, 2.8) наглядна взаимосвязь этих параметров смесей.

Для получения обобщенной зависимости скорости детонации смесей ВВ/ПХА от кислородного коэффициента смеси предложены следующие относительные параметры:

$$D' = \frac{D_{\text{см}} - D_{\text{ВВ}}}{D_{\text{ПХА}} - D_{\text{ВВ}}}, \quad \alpha' = \frac{\alpha_{\text{см}} - \alpha_{\text{ВВ}}}{\alpha_{\text{ПХА}} - \alpha_{\text{ВВ}}},$$

где  $D_{\text{см}}$ ,  $D_{\text{ВВ}}$ ,  $D_{\text{ПХА}}$  — скорость детонации при плотности  $1,20 \text{ г/см}^3$  для смеси, ВВ и ПХА соответственно;  $\alpha_{\text{см}}$ ,  $\alpha_{\text{ВВ}}$ ,  $\alpha_{\text{ПХА}}$  — кислородный коэффициент смеси, ВВ и ПХА соответственно.

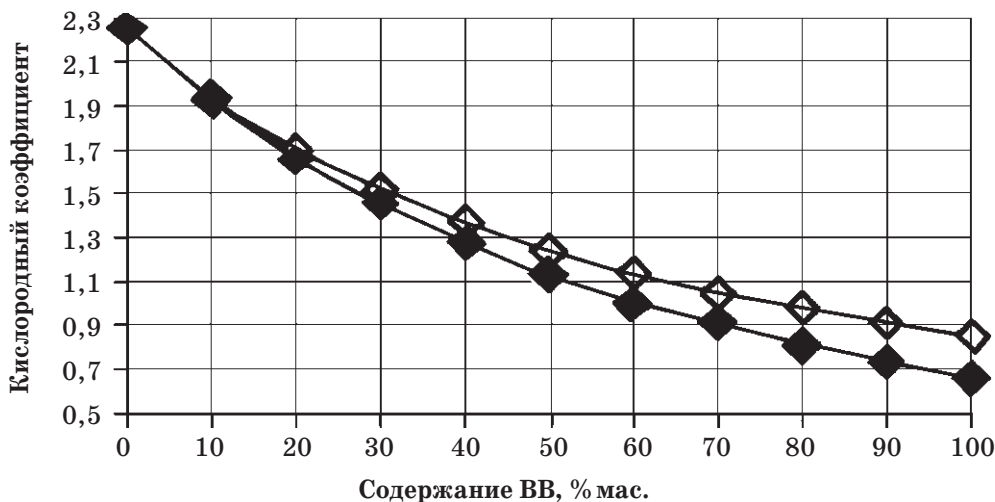


Рис. 2.8. Зависимость кислородного коэффициента смесей ВВ/ПХА от содержания ВВ: нижняя кривая — гексоген/ПХА; верхняя кривая — ТЭН/ПХА

На рис. 2.9 представлена обобщенная зависимость, которая с коэффициентом корреляции 0,99 аппроксимируется уравнением:

$$\frac{D_{\text{см}} - D_{\text{ВВ}}}{D_{\text{ПХА}} - D_{\text{ВВ}}} = 1,348 \left( \frac{\alpha_{\text{см}} - \alpha_{\text{ВВ}}}{\alpha_{\text{ПХА}} - \alpha_{\text{ВВ}}} \right) - 0,348 \left( \frac{\alpha_{\text{см}} - \alpha_{\text{ВВ}}}{\alpha_{\text{ПХА}} - \alpha_{\text{ВВ}}} \right)^2. \quad (2.64)$$

Формула (2.64) может быть использована для расчета скорости детонации смесей других ВВ с ПХА при плотности смеси  $1,20 \text{ г/см}^3$ . Затем рассчитанная скорость детонации приводится к заданной плотности смеси по коэффициенту  $M$  смеси, рассчитанному аддитивно по  $M$  для ВВ и ПХА (3,07).

На основании полученных авторами и известных экспериментальных данных в разработанный метод расчёта вводится ограничение: для смесей, содержащих менее 20 % ВВ, расчёт применим для зарядов с пористостью не менее 20 %.

Предложенный метод расчета был проверен при сопоставлении расчётных и экспериментальных данных на смесях ПХА (7 мкм) с другими

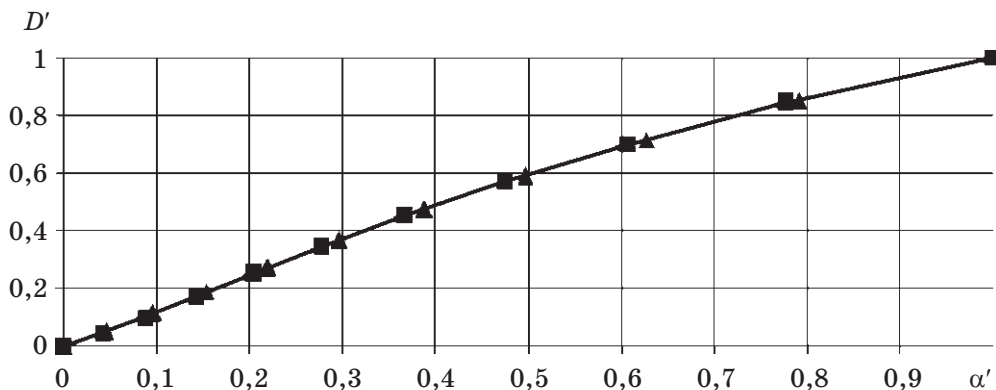


Рис. 2.9. Обобщенная зависимость скорости детонации смесей ВВ/ПХА от кислородного коэффициента смеси:

■ ТЭН, ▲ гексоген

ВВ: октогеном и 3,4-бис(4-нитрофуразан-3-ил)фуроксаном (DNTF) при содержании каждого ВВ: 50 и 75 %. В целом отклонение рассчитанных скоростей детонации от экспериментальных для смесей ВВ/ПХА, в которых в качестве ВВ были использованы ТЭН, гексоген, DNTF и октоген, составило не более 0,8 %.

Кроме смесей ПХА с различными ВВ в указанных выше условиях были экспериментально исследованы близкие к идеальным скорости детонации тройных смесей: ВВ/ПХА (7 мкм)/Al (10–20 мкм). На основе полученных результатов предложена полуэмпирическая экспресс-методика расчета идеальной скорости детонации стехиометрических тройных смесей ( $D_{\text{ВВ/ПХА/Al}}$ ), для которых кислородный баланс равен 0:

$$\frac{D_{\text{ВВ/ПХА/Al}}}{D_{\text{ВВ/ПХА}}} = \left( \frac{n_{\text{ВВ/ПХА/Al}}}{n_{\text{ВВ/ПХА}}} \right)^{1,20} \sqrt{\frac{Q_{\text{ВВ/ПХА/Al}}}{Q_{\text{ВВ/ПХА}}}}, \quad (2.65)$$

где  $D_{\text{ВВ/ПХА}}$  — скорость детонации двойной смеси при пористости, равной пористости тройной смеси;  $\frac{n_{\text{ВВ/ПХА/Al}}}{n_{\text{ВВ/ПХА}}}$  — число молей газообразных продуктов взрыва тройной и двойной смеси, моль/кг;  $Q_{\text{ВВ/ПХА/Al}}$ ,  $Q_{\text{ВВ/ПХА}}$  — теплота взрыва тройной и двойной смеси, кДж/кг.

Средняя относительная погрешность данной методики расчёта составила 1,5 %.

В методике допускается упрощённая схема взрывчатого превращения смесей, не претендующая на расчет точного состава продуктов взрыва.

В табл. 2.22 в качестве примера приведены экспериментальные скорости детонации некоторых стехиометрических тройных смесей.

Т а б л и ц а 2.22

## Скорости детонации смесей ВВ/ПХА/Al

Состав, % мас.	ПХА (160 мкм)		ПХА (7 мкм)	
	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D$ , км/с
ТЭН/ПХА/АСД-4 20/59,5/20,5	1,462	3,91	1,402	5,41
	1,468	3,85		
Гексоген/ПХА/АСД-4 40/50,4/9,6	1,337	5,32	1,123	5,18
	1,367	5,41		

Приведём расчёт скорости детонации тройной смеси ТЭН/ПХА/Al 20/59,5/20,5 % мас. при плотности 1,402 г/см<sup>3</sup>.

*Характеристики компонентов смеси*

ТЭН:  $C_5H_8O_{12}N_4$ ,  $M_{ВВ} = 316,135$ ;  $\rho_{МК} = 1,77$  г/см<sup>3</sup>;  $M = 3,25$  км/с/г/см<sup>3</sup>;

$Q_{v\text{ обр}} = 481,8$  кДж/моль;  $\alpha_{ВВ} = 0,857$ ;  $D_{1,20} = 6,27$  км/с;

ПХА:  $NH_4ClO_4$ ,  $M_{ВВ} = 117,488$ ;  $\rho_{МК} = 1,95$  г/см<sup>3</sup>;  $M = 3,07$  км/с/г/см<sup>3</sup>;

$Q_{v\text{ обр}} = 284,0$  кДж/моль;  $\alpha_{ПХА} = 2,25$ ;  $D_{1,20} = 4,39$  км/с;

Al,  $M = 26,982$ ;  $\rho_{МК} = 2,70$  г/см<sup>3</sup>.

*Мольные доли компонентов в 1 кг тройной смеси*

$$200/316,135 + 595/117,488 + 205/26,982 = \\ = 0,6327 C_5H_8O_{12}N_4 + 5,0644 NH_4ClO_4 + 7,5977 Al.$$

*Кислородные коэффициенты тройной и двойной смесей*

$$a_{тр} = (12 \cdot 0,6327 + 4 \cdot 5,0644 + 0,5 \cdot 5,0644) / (10 \cdot 0,6327 + 4 \cdot 0,6327 + \\ + 2 \cdot 5,0644 + 3/2 \cdot 7,5977) = 1,00$$

$$a_{дв} = (12 \cdot 0,6327 + 4 \cdot 5,0644 + 0,5 \cdot 5,0644) / (10 \cdot 0,6327 + 4 \cdot 0,6327 + \\ + 2 \cdot 5,0644) = 1,60.$$

*Скорость детонации двойной смеси при пористости, равной пористости тройной смеси*

Для тройной смеси:  $\rho_0 = 1,402$  г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{\max} = 2,024$  г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{отн} = \rho_0 / \rho_{\max} = 0,693$

Для двойной смеси: 25,15 % ТЭНа + 74,85 % ПХА;  $\rho_{\max} = 1,901$  г/см<sup>3</sup>;  $\rho_0 = 1,901 \cdot 0,693 = 1,317$  г/см<sup>3</sup>:

$$\frac{D_{см} - D_{ВВ}}{D_{ПХА} - D_{ВВ}} = 1,348 \left( \frac{\alpha_{см} - \alpha_{ВВ}}{\alpha_{ПХА} - \alpha_{ВВ}} \right) - 0,348 \left( \frac{\alpha_{см} - \alpha_{ВВ}}{\alpha_{ПХА} - \alpha_{ВВ}} \right)^2$$

$$(D_{\text{см}} - 6,27)/(4,39 - 6,27) = 1,348(1,60 - 0,857)/(2,25 - 0,857) - 0,348 \cdot [(1,60 - 0,857) / (2,25 - 0,857)]^2.$$

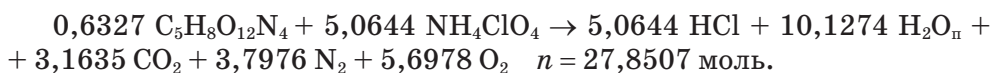
Отсюда  $D_{\text{см}} = 5,10$  км/с при  $\rho_0 = 1,20$  г/см<sup>3</sup>.

Приведем  $D_{\text{см}}$  к  $\rho_0 = 1,317$  г/см<sup>3</sup>:

$$M_{\text{см}} = 0,2515 \cdot 3,25 + 0,7485 \cdot 3,07 = 3,12 \text{ км/с} / \text{г/см}^3.$$

$$D_{\text{см}} = 5,10 + 3,12(1,317 - 1,20) = 5,46 \text{ км/с при } \rho_0 = 1,317 \text{ г/см}^3.$$

*Теплота взрыва и число молей продуктов взрыва двойной смеси*



$$Q_{\text{взр}} = 92,35 \cdot 5,0644 + 240,7 \cdot 10,1274 + 393,5 \cdot 3,1635 - 481,8 \cdot 0,6327 - 284,0 \cdot 5,0644 = 2407,1 \text{ кДж (на массу двойной смеси 795 г — в 1 кг тройной смеси)}.$$

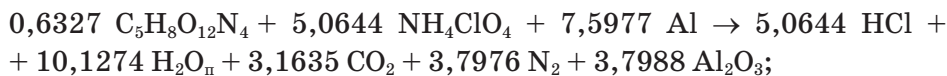
Удельная теплота взрыва (на 1 кг)

$$Q_{\text{взр}} = (2407,1/795) \cdot 1000 = 3027,8 \text{ кДж/кг}.$$

Удельное число молей газообразных продуктов взрыва (на 1 кг)

$$n = (27,8507/795) \cdot 1000 = 35,03 \text{ моль/кг}.$$

*Теплота взрыва и число молей газообразных продуктов взрыва тройной смеси (на 1 кг)*



$$n = 22,15 \text{ моль/кг}.$$

$$Q_{\text{взр}} = 2407,1 + 1672,0 \cdot 3,7988 = 8758,7 \text{ кДж/кг}.$$

*Скорость детонации тройной смеси при плотности  $\rho_0 = 1,402$  г/см<sup>3</sup>*

$$\frac{D_{\text{вв/пха/Al}}}{D_{\text{вв/пха}}} = \left( \frac{n_{\text{вв/пха/Al}}}{n_{\text{вв/пха}}} \right)^{1,20} \sqrt{\frac{Q_{\text{вв/пха/Al}}}{Q_{\text{вв/пха}}}};$$

$$\frac{D_{\text{вв/пха/Al}}}{5,46} = \left( \frac{22,15}{35,03} \right)^{1,20} \sqrt{\frac{8758,7}{3027,8}};$$

$$\frac{D_{\text{вв/пха/Al}}}{5,46} = 0,981; D_{\text{вв/пха/Al}} = 5,36 \text{ км/с}.$$

Опытное значение 5,41 км/с.

### 2.2.4. РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ НЕИДЕАЛЬНОЙ ДЕТОНАЦИИ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

В данном разделе изложен удобный для практики простой и достаточно точный эмпирический метод расчета параметров неидеальной детонации взрывчатых композиций с различными видами инертных добавок, разработанный А. А. Котоминым [87, 88].

Основы метода и его применение изложены также в работах [140, 163–165].

Скорость детонации ВВ при диаметре заряда между предельным и критическим ( $D$ ), критическая скорость детонации ( $D_k$ ), а также предельный диаметр ( $d_{пр}$ ) как для индивидуальных ВВ, так и для взрывчатых композиций (ВК) рассчитываются по следующим формулам:

$$\frac{D}{D_{и}} = q - h \frac{d_k}{d} \text{ при } d_{пр} > d \geq d_k \quad (2.66)$$

$$\frac{D}{D_{и}} = 1 \text{ при } d \geq d_{пр}; \quad (2.67)$$

$$D_k = (q - h)D_{и}; \quad (2.68)$$

$$\frac{d_{пр}}{d_k} = 1,15 \frac{h}{q - 1}, \quad (2.69)$$

где  $D_{и}$  — идеальная скорость детонации, соответствующая  $d_{пр}$ , рассчитывается для взрывчатых композиций (ВК) по формулам (2.47–2.62) или берется опытное значение;  $d_k$  — критический диаметр детонации;  $q, h$  — коэффициенты, определяемые дисперсностью ВВ, степенью его разбавления инертной добавкой и пористостью заряда.

Значения коэффициентов  $q, h$  находятся из следующих выражений:

$$q = A_1 + B_1 v_v + C_1 v_d^\gamma; \quad (2.70)$$

$$h = A_2 + 0,1l + B_2 v_v + C_2 v_d, \quad (2.71)$$

где  $l$  — средний размер частиц ВВ, мм;  $v_v$  — объемная доля воздуха в заряде:  $v_v = 1 - \rho_0 / \rho_{\max}$  ( $\rho_0$  — плотность заряда, г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\max}$  — максимальная плотность ВК, г/см<sup>3</sup>);  $v_d$  — объемная доля добавки (смеси добавок)

в ВК:  $v_d = \frac{\beta \rho_0}{\rho_d}$  ( $\beta$  — массовая доля добавки в ВК,  $\rho_d$  — плотность добавки, г/см<sup>3</sup>), для индивидуальных ВВ  $v_d = 0$ ;  $A_1, B_1, C_1, A_2, B_2, C_2, \gamma$  — коэффициенты, значения которых зависят от объемных долей воздуха и добавки (табл. 2.23, 2.24):

Т а б л и ц а 2.23

Значения коэффициентов  $A_1, B_1, C_1, \gamma$ 

	$A_1$	$B_1$		$C_1$	$\gamma$
$v_B \leq 0,36$	1,01	0,233	$v_d \leq 0,36$	0,0186	1,0
$v_B > 0,36$	1,146	-0,145	$v_d > 0,36$	0,295	3,5

Т а б л и ц а 2.24

Значения коэффициентов  $A_2, B_2, C_2$ 

	$A_2$	$B_2$	$C_2$
$v_B \leq 0,30, v_d \leq 0,36$	0,02	0,9	0,058
$v_B > 0,30, v_d \leq 0,36$	0,223	0,224	0,058
$v_B \leq 0,30, v_d > 0,36$	-0,133	0,9	0,48
$v_B > 0,30, v_d > 0,36$	0,07	0,224	0,48

В табл. 2.25 приведены экспериментальные и рассчитанные по изложенному методу критические скорости детонации ( $D_K$ ) для некоторых ВВ и взрывчатых композиций.

Т а б л и ц а 2.25

**Экспериментальные и расчетные критические скорости детонации индивидуальных ВВ, их смесей и взрывчатых композиций**

ВВ, ВК	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{из}$ , км/с	$D_K$ , км/с	
			Опыт	Расчет
Тротил (0,08 мм) [166]	1,62	7,00	6,65	6,74
Тротил (0,10 мм) [167]	1,55	6,80	6,40	6,36
Тротил (0,10 мм) [166]	1,46	6,50	5,75	5,85
Тротил (0,15–0,20 мм) [168]	0,85	4,95	3,75	3,65
Гексоген (0,10 мм) [169]	1,48	7,64	6,40	6,53
Гексоген (0,10 мм) [169]	1,20	6,80	5,30	5,31
ТГ-40* (0,095 мм) [108]	0,90	5,30	3,80	3,88
ТГ-40 (0,095 мм) [108]	0,50	3,85	2,60	2,54
Гексоген (0,10 мм) / парафин 90/10 [170]	1,10	6,51	5,25	5,09
Гексоген (0,10 мм) / парафин 85/15 [170]	1,16	6,77	5,36	5,38

Продолжение табл. 2.25

ВВ, ВК	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{н}$ , км/с	$D_{к}$ , км/с	
			Опыт	Расчет
Гексоген (0,10 мм) / парафин 80/20 [170]	1,25	7,12	6,20	6,11
Гексоген (0,10 мм) / парафин 76/24 [170]	1,32	7,42	6,73	6,71
Гексоген (0,10 мм) / парафин 72/28 [170]	1,39	7,71	7,30	7,17
Тротил (0,10 мм) / парафин 90/10 [170]	1,10	5,67	4,50	4,47
Тротил (0,10 мм) / парафин 75/25 [170]	1,33	6,63	6,33	6,27
Тротил (0,20–0,32 мм) / ПС** 85/15 [87]	1,44	6,28	5,91	5,82
Гексоген (0,32–0,38 мм) / ПС 80/20 [87]	1,54	7,42	6,90	6,93
Гексоген (0,20–0,32 мм) / ПС 85/15 [87]	1,59	7,68	7,24	7,30
Гексоген (3–7 мкм) / ПС 80/20 [87]	1,54	7,41	7,18	7,20
ТЭН (0,20–0,32 мм) / ПС 85/15 [87]	1,57	7,42	6,98	7,02
ТЭН (5 мкм) / ПС 65/35 [87]	1,37	6,34	5,84	5,86
ТЭН (5 мкм) / ПС 50/50 [87]	1,25	5,83	5,22	5,19
ТЭН (5 мкм) / ПС 40/60 [87]	1,18	5,50	4,70	4,78
ТЭН (5 мкм) / ПС 35/65 [87]	1,15	5,30	4,50	4,65
ТЭН (5 мкм) / ПС / алюминий 37,6/12,7/49,7 [87]	1,89	6,70	6,12	6,05
ТЭН (5 мкм) / ПС / $\alpha$ -нафтол 51,7/17,5/30,8 [87]	1,35	6,22	5,63	5,54
ТЭН (5 мкм) / ПС / меламин 47,5/16,0/36,5 [87]	1,47	6,49	5,84	5,78
ТЭН (5 мкм) / ПС / п-дихлорбензол 48,8/16,5/34,7 [87]	1,45	5,86	5,24	5,20
ТЭН (5 мкм) / ПС / 2,4,6-трибромфенол 38,7/13,0/48,3 [87]	1,83	5,70	5,16	5,08
Тетрил (0,20–0,32 мм) / ПС 85/15 [87]	1,52	6,83	6,50	6,42



Окончание табл. 2.25

ВВ, ВК	$\rho_0$ , г/см <sup>3</sup>	$D_{и}$ , км/с	$D_k$ , км/с	
			Опыт	Расчет
Октоген (0,20–0,32 мм) / ПС 85/15 [87]	1,62	7,78	7,30	7,26
ТЭН (5 мкм) / ПС / м-фенилендиамин солянокислый 50,1/16,9/33,0 [87]	1,41	6,14	5,52	5,46
ТЭН (5 мкм) / ПС / аминогуанидин солянокислый 48,9/16,5/34,6 [87]	1,44	6,35	5,68	5,65

\* ТГ — смесь тротила с гексогеном; \*\* ПС — полисилоксан.

Из этой таблицы видна хорошая сходимость экспериментальных и расчетных величин, что подтверждает достоверность предложенного метода расчета.

Проведены исследования зависимости относительной величины максимального снижения скорости детонации ВВ и композиций при неидеальной детонации ( $g = 1 - D_k / D_{и}$ ) от вида ВВ, его дисперсности, вида добавки и объемного соотношения элементов системы (ВВ, добавка, воздух). Установлено, что параметр  $g$  практически не зависит от вида ВВ (с отрицательным кислородным балансом) и добавки. Он повышается с увеличением размера частиц ВВ, степени его разбавления инертными добавками и пористости заряда. Для большого числа исследованных ВВ и композиций на их основе значение  $g$  находится в пределах 0,01–0,40 [88].

В работе [101] установлено, что при уменьшении диаметра заряда, наряду с понижением детонационных параметров, значительно возрастает показатель политропы продуктов взрыва, например, от 3,3 до 4,78 для литого тротила. По мнению авторов, это может быть связано либо с изменением состава продуктов взрыва (при полном разложении ВВ), определяемого условиями равновесия при данных значениях  $p$  и  $T$ , либо с тем, что часть ВВ, охваченная волной разрежения, не успевает заметно прореагировать до точки Жуге. Второе предположение кажется нам более реальным, так как показатель политропы слабо зависит от состава продуктов взрыва (для различных ВВ  $n = 2,9 \pm 0,4$ ). В этом случае неразложившуюся в зоне химической реакции часть ВВ ( $a$ ), непосредственно представляющую химические потери, по-видимому, можно уподобить инертной органической добавке и рассчитать с помощью полученной зависимости  $n$  от концентрации добавки в ВВ (2.60) по формулам:

$$a = \frac{n_d - n_{\text{пр}}}{2,70} 10^2, \% ; \quad (2.72)$$

$$a_{\text{max}} = \frac{n_k - n_{\text{пр}}}{2,70} 10^2, \% , \quad (2.73)$$

где  $n_{\text{пр}}, n_k, n_d$  — показатели политропы продуктов взрыва, соответствующие предельному, критическому и текущему диаметрам заряда. Величина химических потерь  $a_{\text{max}}$  при  $d_k$ , рассчитанная по опытным значениям  $n$  [101] для ряда индивидуальных и смесевых ВВ, меняется как и величина  $g$  в широком интервале (от 10 до 50 %).

### Примеры расчета параметров неидеальной детонации ВВ и ВК

#### Пример 1. Неидеальная детонация индивидуального ВВ

Рассчитать для прессованного тротила (размер частиц 0,10 мм,  $\rho_0 = 1,46$  г/см<sup>3</sup>,  $d_k = 5,0$  мм,  $D_{\text{и}} = 6,50$  км/с) критическую скорость детонации, скорость детонации заряда диаметром 10 мм и предельный диаметр.

##### 1. Объемная доля воздуха

$$v_b = 1 - \rho_0 / \rho_{\text{max}} = 1 - 1,46 / 1,66 = 0,120$$

##### 2. Коэффициенты $q, h$

$$q = A_1 + B_1 v_b + C_1 v_d^\gamma = 1,01 + 0,233 \cdot 0,12 = 1,038;$$

$$h = A_2 + 0,1l + B_2 v_b + C_2 v_d = \\ = 0,02 + 0,1 \cdot 0,1 + 0,9 \cdot 0,12 = 0,138$$

(коэффициенты  $A_1, B_1, A_2, B_2$  выбираем из табл. 2.23, 2.24 при условии  $v_b < 0,30$ ; добавки нет).

##### 3. Критическая скорость детонации

$$D_k = (q - h) D_{\text{и}} = (1,038 - 0,138) 6,50 = 5,85 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_k = 5,75$  км/с [166].

##### 4. Скорость детонации заряда диаметром 10 мм

$$\frac{D}{D_{\text{и}}} = q - h \frac{d_k}{d} = 1,038 - 0,138 \frac{5,0}{10,0} = 0,969,$$

отсюда  $D = 6,50 \cdot 0,969 = 6,30$  км/с.

Опытное значение  $D = 6,34$  км/с [166].

## 5. Пределный диаметр

$$\frac{d_{\text{пр}}}{d_{\text{к}}} = 1,15 \frac{h}{q-1}, \text{ откуда } d_{\text{пр}} = 1,15 \frac{0,138}{1,038-1} 5,0 = 20,9 \text{ мм.}$$

Опытное значение  $d_{\text{пр}} \approx 18 \text{ мм}$  [166].

**Пример 2.** Неидеальная детонация смеси ВВ с органической добавкой

Рассчитать критическую скорость детонации смеси гексоген (0,10 мм)/парафин 76/24 мас. ( $\rho_0 = 1,32 \text{ г/см}^3$ ,  $D_{\text{н}} = 7,42 \text{ км/с}$ ).

## 1. Объемные доли ВВ, добавки, воздуха:

$$v_{\text{ВВ}} = \alpha \rho_0 / \rho_{\text{ВВ}} = 0,76 \cdot 1,32 / 1,80 = 0,557;$$

$$v_{\text{д}} = \beta \rho_0 / \rho_{\text{д}} = 0,24 \cdot 1,32 / 0,90 = 0,352;$$

$$v_{\text{в}} = 1 - (v_{\text{ВВ}} + v_{\text{д}}) = 1 - (0,557 + 0,352) = 0,091,$$

$$\text{или } v_{\text{в}} = 1 - \rho_0 / \rho_{\text{макс}} = 1 - 1,32 / 1,452 = 0,091$$

(1,452 г/см<sup>3</sup> — максимальная плотность смеси, вычисленная из плотностей гексогена — 1,80 г/см<sup>3</sup> и парафина — 0,90 г/см<sup>3</sup>).

2. Коэффициенты  $q$ ,  $h$ :

$$\begin{aligned} q &= A_1 + B_1 v_{\text{в}} + C_1 v_{\text{д}}^{\gamma} = \\ &= 1,01 + 0,233 \cdot 0,091 + 0,0186 \cdot 0,352 = 1,038; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h &= A_2 + 0,1l + B_2 v_{\text{в}} + C_2 v_{\text{д}} = \\ &= 0,02 + 0,1 \cdot 0,1 + 0,9 \cdot 0,091 + 0,058 \cdot 0,352 = 0,133 \end{aligned}$$

(коэффициенты  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $A_2$ ,  $B_2$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $\gamma$  выбираем из табл. 2.23, 2.24).

## 3. Критическая скорость детонации

$$D_{\text{к}} = (q - h) D_{\text{н}} = (1,038 - 0,133) 7,42 = 6,71 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_{\text{к}} = 6,73 \text{ км/с}$  [170].

**Пример 3.** Неидеальная детонация композиции ВВ/связующее

Рассчитать критическую скорость детонации смеси ТЭН (5 мкм)/полисилоксан 65/35 % мас. ( $\rho_0 = 1,37 \text{ г/см}^3$ ,  $D_{\text{н}} = 6,34 \text{ км/с}$ ).

## 1. Объемные доли ВВ, добавки, воздуха:

$$v_{\text{ВВ}} = \alpha \rho_0 / \rho_{\text{ВВ}} = 0,65 \cdot 1,37 / 1,77 = 0,503;$$

$$v_{\text{д}} = \beta \rho_0 / \rho_{\text{д}} = 0,35 \cdot 1,37 / 0,98 = 0,489;$$

$$v_{\text{в}} = 1 - (v_{\text{ВВ}} + v_{\text{д}}) = 1 - (0,503 + 0,489) = 0,008.$$

2. Коэффициенты  $q, h$ :

$$q = A_1 + B_1 v_b + C_1 v_d^\gamma =$$

$$= 1,01 + 0,233 \cdot 0,008 + 0,295 \cdot 0,489^{3,5} = 1,034;$$

$$h = A_2 + 0,1l + B_2 v_b + C_2 v_d =$$

$$= -0,133 + 0,1 \cdot 0,005 + 0,9 \cdot 0,008 + 0,48 \cdot 0,489 = 0,109$$

(коэффициенты  $A_1, B_1, A_2, B_2, C_1, C_2, \gamma$  выбираем из табл. 2.23, 2.24).

## 3. Критическая скорость детонации

$$D_k = (q - h)D_{и} = (1,034 - 0,109)6,34 = 5,86 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_k = 5,84 \text{ км/с}$  ( $d_k = 1,6 \text{ мм}$ ) [87].

**Пример 4.** Неидеальная детонация металлизированного взрывчатого состава

Рассчитать критическую скорость детонации состава ТЭН (5 мкм)/полисилоксан/Al (12–16 мкм) 37,6/12,7/49,7 % мас. ( $\rho_0 = 1,89 \text{ г/см}^3$ ,  $D_{и} = 6,70 \text{ км/с}$ ).

## 1. Объемные доли ВВ, смеси добавок, воздуха:

$$v_{\text{ВВ}} = \alpha \rho_0 / \rho_{\text{ВВ}} = 0,376 \cdot 1,89 / 1,77 = 0,401;$$

$$v_d = \beta_1 \rho_0 / \rho_{d1} + \beta_2 \rho_0 / \rho_{d2} = 0,127 \cdot 1,89 / 0,98 + 0,497 \cdot 1,89 / 2,70 = 0,593;$$

$$v_b = 1 - (v_{\text{ВВ}} + v_d) = 1 - (0,401 + 0,593) = 0,006.$$

2. Коэффициенты  $q, h$ :

$$q = A_1 + B_1 v_b + C_1 v_d^\gamma =$$

$$= 1,01 + 0,233 \cdot 0,006 + 0,295 \cdot 0,593^{3,5} = 1,058;$$

$$h = A_2 + 0,1l + B_2 v_b + C_2 v_d =$$

$$= -0,133 + 0,1 \cdot 0,005 + 0,9 \cdot 0,006 + 0,48 \cdot 0,593 = 0,155$$

(коэффициенты  $A_1, B_1, A_2, B_2, C_1, C_2, \gamma$  выбираем из табл. 2.23, 2.24).

## 3. Критическая скорость детонации

$$D_k = (q - h)D_{и} = (1,058 - 0,155)6,70 = 6,05 \text{ км/с.}$$

Опытное значение  $D_k = 6,12 \text{ км/с}$  ( $d_k = 2,1 \text{ мм}$ ) [87].

## 2.3. КРИТИЧЕСКИЕ ДИАМЕТРЫ ДЕТОНАЦИИ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Главным требованием к взрывчатым материалам, используемым в современных системах инициирования, детонационных разводках и устройствах взрывной логики, в детонирующих шнурах и удлиненных кумулятивных зарядах различного назначения, а также в аэрокосмической технике, в частности системах разделения космических аппаратов, является высокая детонационная способность, критерий которой — критический диаметр детонации ( $d_k$ ). Для обычно используемых в промышленности зарядов традиционных ВВ  $d_k$  равен 1–10 мм, в то время как для решения задач в аэрокосмической технике он должен составлять 0,1–1,0 мм [171–177].

Величина  $d_k$  определяется совокупностью кинетических, термодинамических и газодинамических факторов при детонации заряда ВВ. При разработке систем, включающих заряды с очень малым поперечным сечением, необходимы прогнозирование и расчет величины  $d_k$ .

Для гомогенных взрывчатых систем (жидкости, монокристаллы):

$$d_k \sim L \sim D\tau, \quad (2.74)$$

где  $L$  — протяженность зоны химической реакции за фронтом детонационной волны;  $D$  — скорость детонации;  $\tau$  — время задержки адиабатического взрыва. Чем уже зона химической реакции, тем меньше  $d_k$ .

Для гетерогенных систем  $d_k$  не является константой. Для индивидуальных ВВ  $d_k$  зависит от ряда факторов: химической природы, дисперсности и дефектности кристаллов ВВ, плотности заряда, начальной температуры, наличия и характера оболочки. Для смесевых ВВ, включая эластичные ВВ, применяемые в системах детонационной автоматики космических аппаратов [171–177],  $d_k$  зависит также от концентрации взрывчатого наполнителя, физических свойств и дисперсности инертных компонентов (добавок), микроструктуры и однородности заряда и др.

Наличие многих факторов, оказывающих влияние на  $d_k$ , существенно затрудняет его прогнозирование. Это предполагает необходимость установления основных наиболее эффективных способов регулирования детонационной способности взрывчатых материалов, в частности ЭВВ, и разработки метода расчета их критического диаметра детонации.

Авторами с участием сотрудников, аспирантов и студентов СПбГТИ(ТУ) и ФГУП «СКТБ «Технолог» были проведены систематические целенаправленные экспериментальные исследования детонационной способности штатных и перспективных индивидуальных ВВ

различных классов, их смесей и композиций на их основе, используемых в современной технике. Основные результаты этих работ опубликованы в научных статьях и материалах конференций [84, 88, 140, 141, 143–146, 178–200].

В данном разделе систематизированы и обобщены результаты этих исследований.

### 2.3.1. ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ, ДЕФЕКТНОСТИ КРИСТАЛЛОВ И СОДЕРЖАНИЯ ВВ

#### Методология исследований

Для всех исследованных взрывчатых композиций (ВК) на основе различных ВВ экспериментально были получены зависимости критического диаметра детонации ВК от концентрации ВВ. Установлено, что эти зависимости имеют единый вид и описываются уравнением

$$d_k = \frac{d_{k0}}{V_{\text{ВВ}}^n}, \quad (2.75)$$

где  $d_k$  (мм) — критический диаметр детонации ВК при ее максимальной плотности ( $\rho_{\text{max}}$ );  $d_{k0}$  (мм) — критический диаметр индивидуального (чистого) ВВ при его реальной дисперсности и высокой плотности (пористость 0,1–2 %);  $V_{\text{ВВ}}$  — объемная доля ВВ;  $n$  — параметр, определяемый дисперсностью ВВ и физическими свойствами инертных компонентов (добавок).

Указанная зависимость стала основой для проведения экспериментальных исследований детонационной способности различных ВВ и композиций на их основе.

Экспериментально, с точностью 0,02–0,03 мм, были определены критические диаметры детонации сплошных, практически беспористых, шнуровых зарядов из однородных взрывчатых композиций (ВК) с равномерным распределением кристаллов исследуемых ВВ в мягкой полимерной матрице, в основном, полидиметилсилоксане (СКТ). ВК изготавливали по технологии, исключающей дробление кристаллов ВВ. При этом в ВК сохранялась дисперсность исходных ВВ. Содержание ВВ в ВК варьировалось от 60 до 90 % мас. В некоторых ВК использовалась сплошная жидкая органическая среда, загущенная для стабильности суспензий небольшим количеством аэросила.

Особое внимание уделялось микронным ВВ (удельная поверхность  $S_g = 5000\text{--}14000 \text{ см}^2/\text{г}$ ). Образцы этих ВВ были получены методом высаживания при дозировании их растворов в воду при заданных условиях (вид растворителя, температура, модуль, способ дозирования, например, распыление раствора в воду).

Для всех ВК по результатам экспериментов были построены зависимости критических диаметров детонации ( $d_k$ ) от объемной доли ВВ. На рис. 2.10, *a* в качестве примера приведена такая зависимость для ВК на основе высокодисперсного ТЭНа с удельной поверхностью  $S_g = 4700 \text{ см}^2/\text{г}$  ( $0,47 \text{ м}^2/\text{г}$ ). Удельная поверхность ( $S_g$ ) определялась по газопроницаемости слоя ВВ на приборе ПСХ-12. На рис. 2.10, *б* приведена логарифмическая форма этой зависимости.

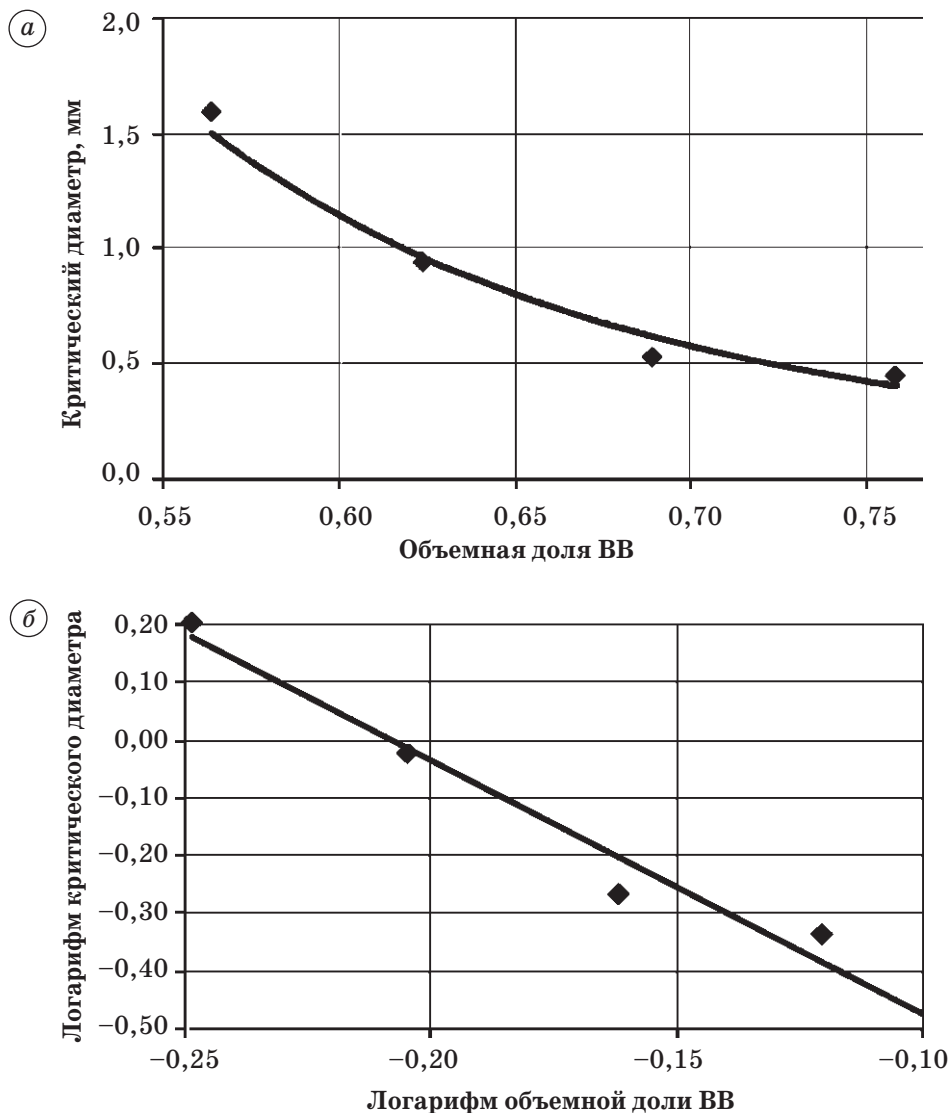


Рис. 2.10. Зависимость критических диаметров детонации ВК: ТЭН ( $S_g = 4700 \text{ см}^2/\text{г}$ )/СКТ от объемной доли ВВ (*a*); логарифмическая форма этой зависимости (*б*)

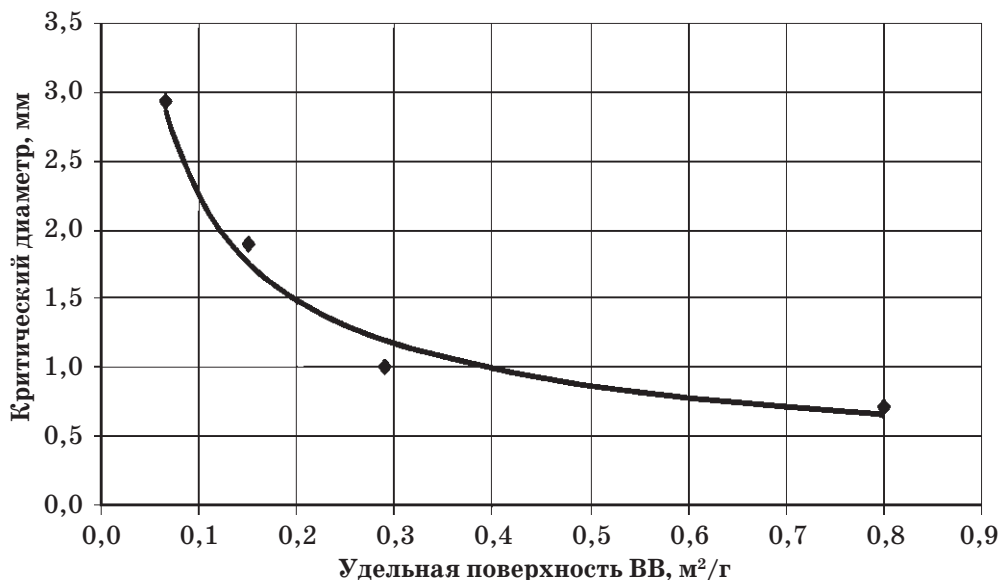


Рис. 2.11. Зависимость критических диаметров детонации чистого FOX-7 от  $S_g$

Для индивидуальных (чистых) ВВ  $d_{к0}$  рассчитывали из полученных экспериментальных данных для ВК по логарифмическим зависимостям и формуле (2.75). На рис. 2.11 в качестве примера приведена зависимость полученных расчетно-экспериментальных значений  $d_{к0}$  FOX-7 от его удельной поверхности.

Зависимость  $d_{к0}$  (мм) чистых ВВ от  $S_g$  (м²/г) аппроксимируется следующим уравнением:

$$d_{к0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b} \quad (2.76)$$

где  $a$  — критический диаметр детонации чистого ВВ при  $S_g = 1,0$  м²/г, мм;  $S_1$  — удельная поверхность ВВ, равная 1,0 м²/г (10 000 см²/г);  $b$  — коэффициент.

### Результаты исследований

В табл. 2.26 приведены физико-химические и энергетические характеристики ВВ, детонационная способность которых, а также ВК на их основе исследовалась авторами.

Для всех исследованных ВК экспериментально были получены зависимости критических диаметров детонации ( $d_k$ ) от концентрации ВВ. Эти зависимости описываются уравнением (2.75). Получены также зависимости параметров этого уравнения ( $d_{к0}$ ,  $n$ ) от дисперсности ВВ.



На первом этапе работы проводились на бинарных смесях гексогена, ТЭНа, октогена и тетрила с жидким низкомолекулярным полисилоксановым каучуком марки СКТН в качестве инертной добавки. С целью получения зерен ВВ различного размера проводился «мокрый» рассев штатных продуктов на узкие фракции, средний размер зерна ( $\bar{a}_3$ ) которых рассчитывался по формуле Андерсена:

$$\bar{a}_3 = \sqrt[3]{\frac{2a_1^2 a_2^2}{a_1 + a_2}}, \quad (2.77)$$

где  $a_1$  и  $a_2$  — размеры отверстий сит, между которыми заключалась данная фракция.

Т а б л и ц а 2.26

**Физико-химические и энергетические характеристики ВВ**

ВВ	Плотность монокристал- ла, г/см <sup>3</sup>	Кислород- ный коэф- фициент	Энтальпия образования, кДж/моль	Теплота взрыва, кДж/кг	Температура начала разложения, °С
ТЭН	1,773	0,86	–515,3	5866	165
Гексоген	1,806	0,67	70,1	5392	205
Октоген	1,904	0,67	87,8	5668	264
CL-20	2,044	0,80	422,8	6230	216
DNTF	1,910	0,67	657,2	6100	212
НТФ	1,865	0,58	674,0	5830	230
БТФ	1,901	0,50	590,0	5860	230
Тетрил	1,730	0,48	19,1	4815	129
FOX-7	1,885	0,67	130,0	4860	215

Смешение кристаллического ВВ с жидкой органической добавкой проводилось вручную в целях исключения дробления и деформации кристаллов. Исключение седиментации твердой фазы в приготовленных однородных смесях достигалось введением в них 0,5 ÷ 1 % мас. загустителя-аэросила (высокодисперсной окиси кремния). При этом, как было установлено экспериментально, критический диаметр детонации взрывчатых смесей практически не изменялся (табл. 2.27).

Величины  $a_3$ , критических диаметров детонации некоторых фракций гексогена, ТЭНа, октогена и тетрила ( $d_{к0}$ ) и параметра  $n$  для их смесей с СКТН приведены в табл. 2.28.

Таблица 2.27

## Влияние аэросила на критический диаметр ВК

№	Состав ВК, % мас.	Критический диаметр, мм
1	Гексоген/полисилоксан-олигомер (СКТН) 63/37	11±0,5
2	Гексоген/СКТН 63/37 Аэросил (сверх 100 %) 0,5	11±0,5
3	ТЭН/СКТН 54/46	10±0,5
4	ТЭН/СКТН 54/46 Аэросил (сверх 100 %) 0,7	10±0,5
5	Гексоген/дибромбензол 48,8/51,2	10,5±0,5
6	Гексоген/дибромбензол 48,8/51,2 Аэросил (сверх 100 %) 1,0	10,5±0,5

Таблица 2.28

Значения критического диаметра детонации некоторых фракций ряда ВВ ( $d_{к0}$ ) и параметра  $n$  для их смесей с СКТН

ВВ	Фракция, мкм	Средний $a_3$ , мкм	$d_{к0}$ , мм (расч.-эксп.)	$n_{эксп}$
Гексоген	3–5	4	0,27	3,39
	0–60	30	1,67	2,55
	90–160	118	2,37	2,09
	200–250	223	3,31	1,76
	250–350	294	3,78	1,44
ТЭН	6–9	7	0,20	3,66
	0–90	45	0,86	2,68
	90–160	118	1,73	1,94
	200–250	224	2,29	1,80
	400–500	446	3,18	1,51
	500–600	547	3,38	1,36
Октоген	0–90	45	1,47	2,99
	90–160	118	2,08	2,79
	200–250	223	3,10	1,64
	400–500	446	4,80	1,58
Тетрил	90–160	118	3,04	2,22
	250–315	280	3,95	1,89
	400–500	446	5,79	1,46

На рис. 2.12 представлена зависимость  $d_{к0}$  указанных ВВ от размера зерна ВВ ( $a_3$ ). На рис. 2.13 — зависимость параметра  $n$  для смесей этих ВВ с каучуком СКТН от размера зерна ВВ ( $a_3$ ).

Из рис. 2.12, 2.13 видно, что для всех ВВ с увеличением размера зерна ВВ ( $a_3$ ) увеличивается  $d_{к0}$  и уменьшается параметр  $n$ .

Эти зависимости можно объяснить с позиций очагового механизма инициирования химического превращения в детонационной волне и распространения реакции вглубь зерна ВВ. Кристаллические ВВ содержат большое количество центров инициирования реакции взрывчатого превращения: в кристаллах существуют дефекты в виде трещин, пор, сколов, раковин, выходов дислокаций, т. е. «горячие точки». Предполагается, что их число настолько велико, что скорость взрывчатого превращения при детонации определяется процессами распространения реакции от горячей точки. С уменьшением размера зерна ВВ снижается время распространения процесса вглубь зерна. Отсюда следует, что с уменьшением размера зерна и повышением степени дефектности кристаллов ВВ будет уменьшаться величина его критического диаметра детонации  $d_{к0}$ .

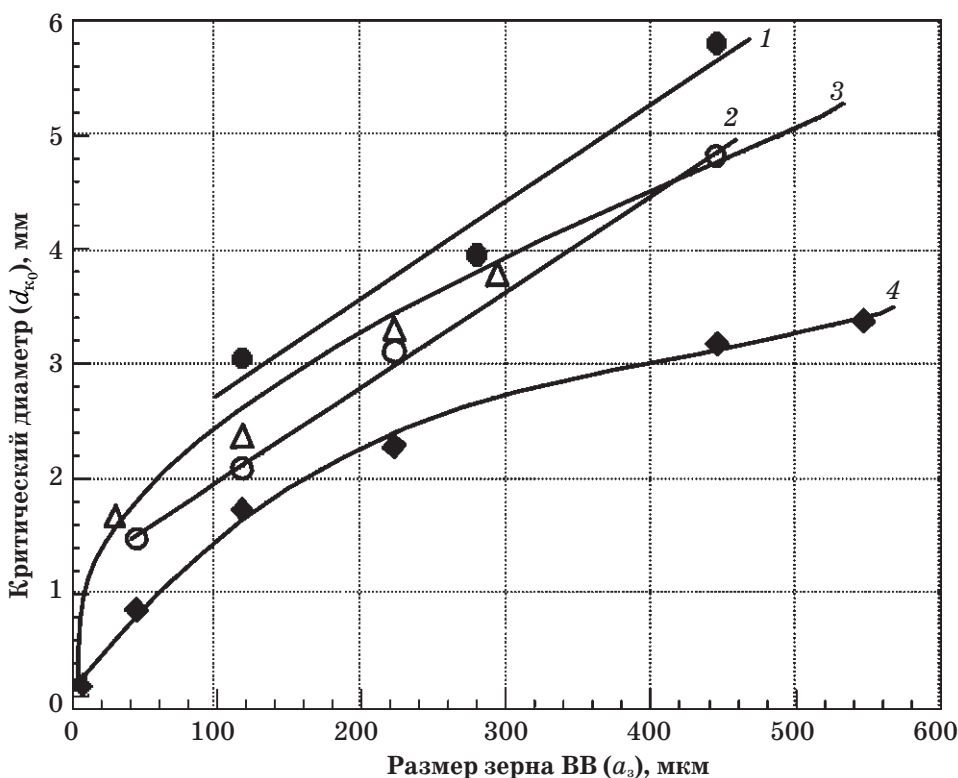


Рис. 2.12. Зависимость  $d_{к0}$  некоторых ВВ от размера зерна ВВ ( $a_3$ ):  
1 — тетрил, 2 — гексоген, 3 — октоген, 4 — ТЭН

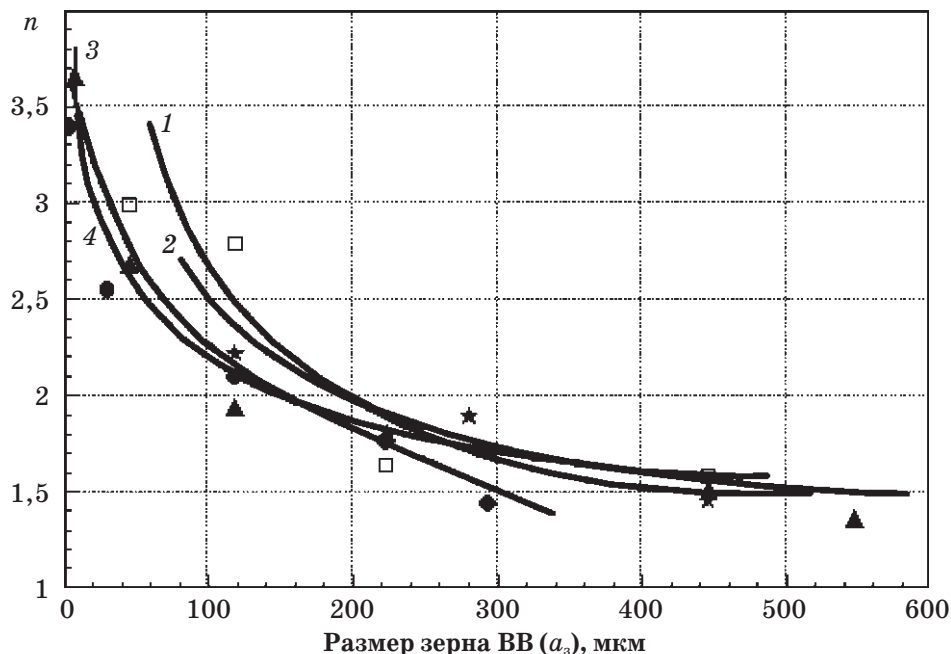


Рис. 2.13. Зависимость параметра  $n$  для смесей некоторых ВВ с каучуком СКТН от размера зерна ВВ ( $a_z$ ):  
1 — октоген, 2 — тетрил, 3 — ТЭН, 4 — гексоген

Однако при уменьшении размера зерна ВВ, насколько это возможно практически, дефектность уменьшается и размеры дефектов приближаются к размерам зерна. При этом можно предположить, что гетерогенные ВК все более приближаются по своему физическому состоянию к гомогенной системе. Известно, что в гомогенных ВВ детонационный процесс развивается по механизму адиабатического взрыва: при сжатии ударной волной ВВ происходит достаточный для возбуждения быстрой реакции разогрев. В гетерогенных ВК, вероятно, реализуется смешанный механизм детонации, причем в зависимости от дисперсности и дефектности кристаллического ВВ соотношение очагового и адиабатического механизмов может изменяться. Подтверждением этому является увеличение параметра  $n$  с уменьшением размера частиц ВВ (снижением дефектности ВВ) до значений, характерных для растворов ВВ. Исходя из этих представлений следует, что для определения  $n$  и  $d_{к0}$  одного размера зерна ВВ недостаточно. Существенное влияние на эти характеристики должна оказывать дефектность кристаллов ВВ.

Для определения влияния дефектности кристаллов ВВ (как самостоятельного фактора) на детонационную способность ВК были экспериментально исследованы и сопоставлены концентрационные зависимости  $d_k$  двух ВК, содержащих гексоген одной фракции (160–200 мкм)

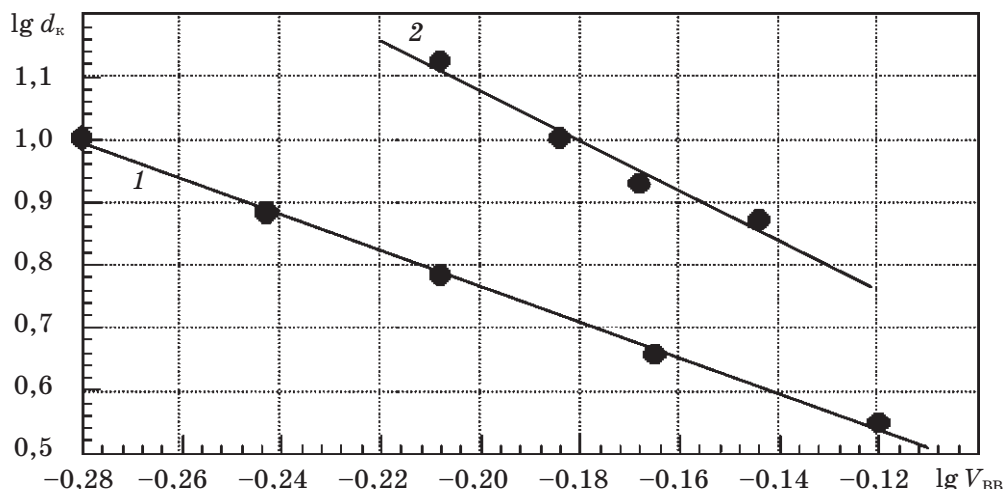


Рис. 2.14. Логарифмическая зависимость  $d_k$  бинарных смесей гексогена (фракция 160–200 мкм) различной дефектности с СКТН от объемной доли гексогена: 1 — штатный, 2 — малодефектный

и низкомолекулярный полисилоксан (СКТН). При этом гексоген использовался двух видов: первый — полученный рассевом штатного продукта и второй — малодефектный, полученный по специальной методике кристаллизацией из раствора аммиачной селитры в концентрированной азотной кислоте.

Показано (рис. 2.14), что для ВК с малодефектным гексогеном параметр  $n$  составляет 3,60;  $d_{k0}$  — 2,2 мм, а для ВК с гексогеном, высеянным из штатного продукта, — 2,90 и 1,5 мм соответственно.

Таким образом, дефектность кристаллов ВВ оказывает существенное влияние на детонационную способность ВК. С уменьшением дефектности ВВ их критический диаметр детонации  $d_{k0}$  и параметр  $n$  ВК увеличиваются.

Для учета совместного влияния дефектности и дисперсности ВВ на их детонационную способность было предложено использовать удельную поверхность ВВ, измеренную методом низкотемпературной газовой адсорбции ( $S_{ад}$ ). В качестве адсорбата, в частности, использовался криптон, размер молекулы которого составляет  $3,96 \cdot 10^{-10}$  м. Полученные этим способом значения адсорбционной удельной поверхности ВВ учитывают в целом реальную дефектность кристаллов (поры, трещины, ступени роста, выходы дислокаций и др.), отражают общее количество «горячих точек», имеющих размеры  $\sim 10^{-6}$  м, и обычно в 3–10 раз превышают величину геометрической удельной поверхности ВВ.

Экспериментальные данные по влиянию  $S_{ад}$  ВВ на детонационную способность ВК представлены на рис. 2.15, 2.16 и в табл. 2.29. При этом

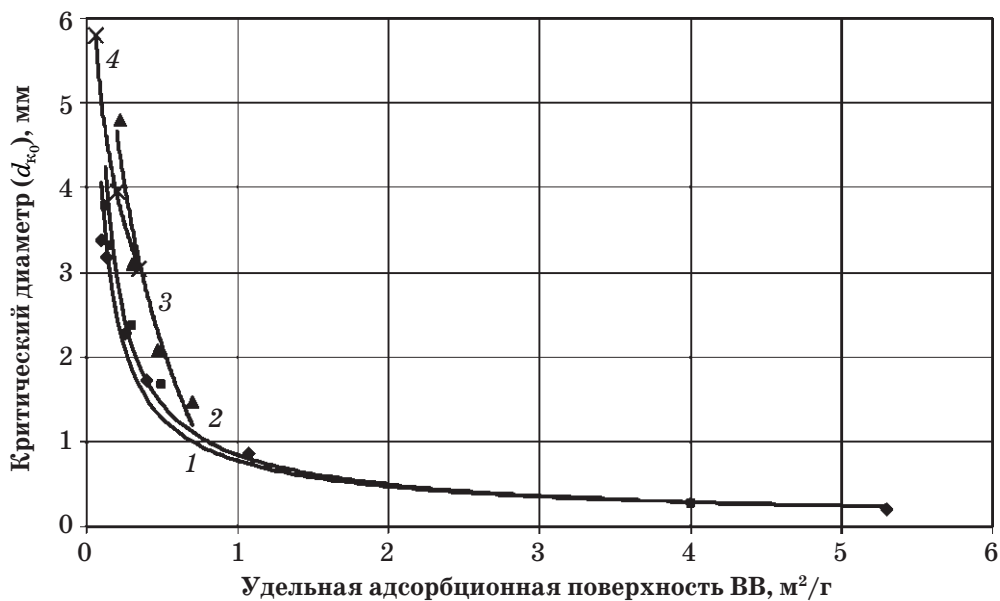


Рис. 2.15. Зависимость  $d_{k0}$  для ряда ВВ от их удельной адсорбционной поверхности:  
1 — октоген; 2 — тетрил; 3 — гексоген; 4 — ТЭН

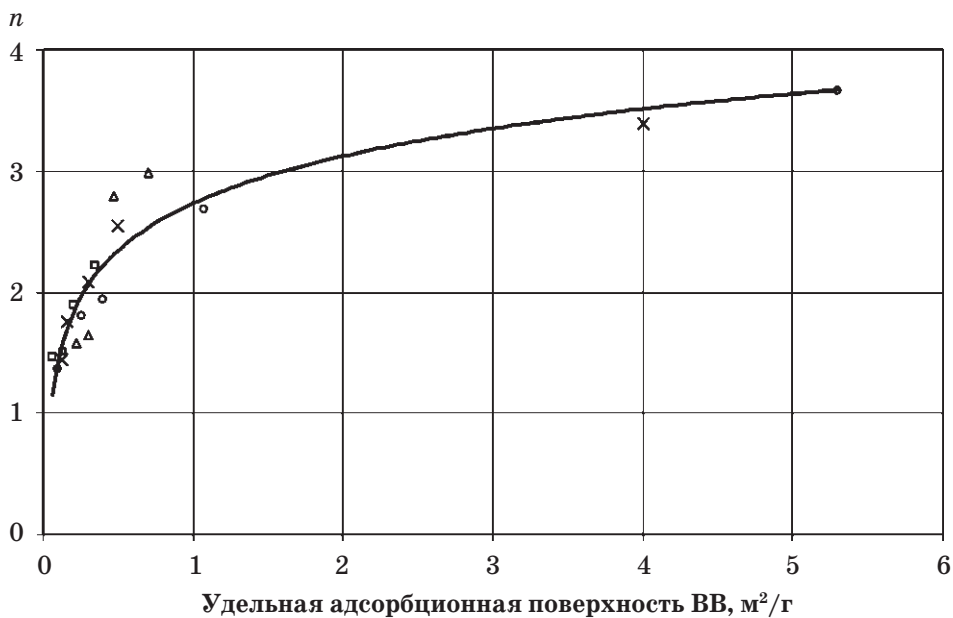


Рис. 2.16. Зависимость параметра  $n$  для бинарных смесей ряда ВВ с СКТН  
от удельной адсорбционной поверхности ВВ:  
 $\Delta$  — октоген;  $\circ$  — ТЭН;  $\times$  — гексоген;  $\square$  — тетрил

зависимости критического диаметра детонации чистых ВВ ( $d_{к0}$ ) и параметра  $n$  их смесей с СКТН от  $S_{ад}$  ВВ аппроксимируются следующими уравнениями:

$$\frac{1}{d_{к0}} = \frac{1}{d_{мк}} + 0,91S_{ад}; \quad (2.78)$$

$$n = 2,65 + 1,2 \lg S_{ад}, \quad (2.79)$$

где  $d_{мк}$  — критический диаметр детонации монокристалла ВВ, мм: для ТЭНа — 5 мм, гексогена — 7 мм, октогена — 18 мм.

Т а б л и ц а 2.29

Удельная поверхность различных фракций ряда ВВ и значения  $d_{к0}$  и параметра  $n$  для их смесей с СКТН

ВВ	Фракция, мкм	Удельная поверхность ВВ, м <sup>2</sup> /г		$d_{к0}$ , мм	$n_{эксп.}$
		Адсорбционная $S_{ад}$	Измеренная по газопрооницаемости $S_g$		
Гексоген	3–5	4,00	0,900	0,27	3,39
	0–60	0,495	0,131	1,67	2,55
	90–160	0,300	0,060	2,37	2,09
	200–250	0,160	0,037	3,31	1,76
	250–350	0,123	0,028	3,78	1,44
ТЭН	6–9	5,30	0,435	0,20	3,66
	0–90	1,07	0,098	0,86	2,68
	90–160	0,40	0,043	1,73	1,94
	200–250	0,26	0,034	2,29	1,80
	400–500	0,13	0,017	3,18	1,51
	500–600	0,10	0,014	3,38	1,36
Октоген	0–90	0,70	0,158	1,47	2,99
	90–160	0,47	0,101	2,08	2,79
	200–250	0,30	0,050	3,10	1,64
	400–500	0,17	0,024	4,80	1,58
Тетрил	90–160	0,35	0,084	3,04	2,22
	200–315	0,20	0,039	3,95	1,89
	400–500	0,09	0,020	5,79	1,46

При затруднениях в определении значений  $S_{ад}$  ВВ  $d_k$  может быть рассчитан приближенно, без учета микродефектов кристаллов ВВ, с использованием удельной поверхности, определяемой по газопроницаемости ВВ ( $S_g$ ) и измеряемой достаточно просто на приборе ПСХ-12. Опытные данные по влиянию  $S_g$  на детонационную способность ВВ представлены в табл. 2.29 и на рис. 2.17, 2.18.

Результаты обработки опытных данных показали, что зависимости критических диаметров чистых ВВ ( $d_{к0}$ ) и параметра  $n$  их смесей с СКГН от  $S_g$  описываются следующими уравнениями:

$$d_{к0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b};$$

$$n = 3,84 + 1,39 \lg S_g, \quad (2.80)$$

где  $a$  — критический диаметр детонации ВВ при  $S_g = 1,0 \text{ м}^2/\text{г}$ , мм;  $S_1$  — удельная поверхность ВВ, равная  $1,0 \text{ м}^2/\text{г}$  ( $10\,000 \text{ см}^2/\text{г}$ );  $b$  — коэффициент: для бензотрифуроксана  $a = 0,06 \text{ мм}$ ,  $b = 1,23$ ; ТЭНа  $a = 0,08 \text{ мм}$ ,  $b = 0,93$ ; гексогена  $a = 0,26 \text{ мм}$ ,  $b = 0,78$ ; октогена  $a = 0,38 \text{ мм}$ ,  $b = 0,64$ ; тетрила  $a = 0,79 \text{ мм}$ ,  $b = 0,44$ ; CL-20  $a = 0,43 \text{ мм}$ ,  $b = 0,51$ ; DNTF  $a = 0,07 \text{ мм}$ ,  $b = 0,66$ ; НТФ  $a = 0,15 \text{ мм}$ ,  $b = 0,83$ ; FOX-7  $a = 0,55 \text{ мм}$ ,  $b = 0,60$ .

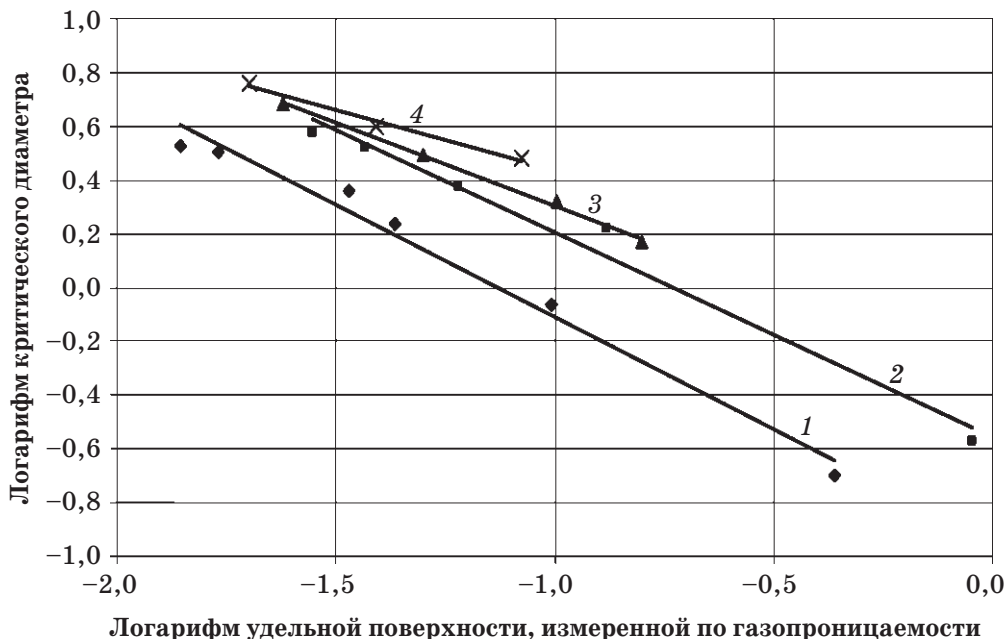


Рис. 2.17. Зависимость  $\lg d_{к0}$  ряда ВВ от  $\lg S_g$ :

1 — ТЭН; 2 — гексоген; 3 — октоген; 4 — тетрил



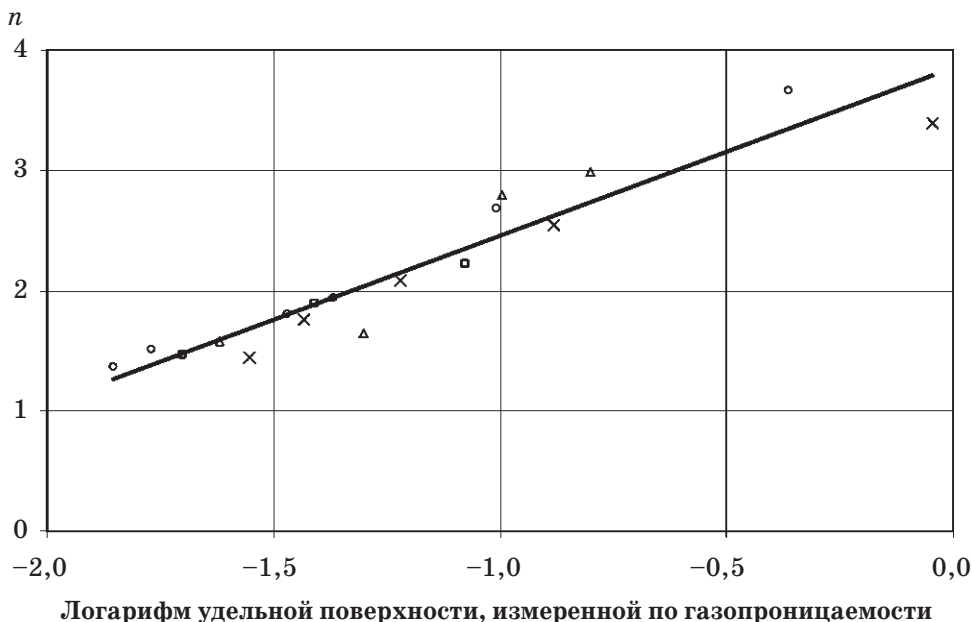


Рис. 2.18. Зависимость параметра  $n$  для бинарных смесей ряда ВВ с СКТН от  $\lg S_g$ :

Δ — октоген; ○ — ТЭН; × — гексоген; □ — тетрилл

Полученные выражения действительны для  $S_g$  в интервале от 0,01 до 1,0 м<sup>2</sup>/г.

Таким образом, результаты исследований свидетельствуют о существенной роли очагового механизма взрывчатого превращения при детонации гетерогенных систем с реальными дефектными кристаллами ВВ.

Предложенная нами форма зависимости (2.78), как отмечается в работе [201], находит объяснение в теории критического диаметра детонации, разработанной И. Ф. Кобылкиным, В. С. Соловьевым и др. [95, 202, 203].

### 2.3.2. ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ ИНЕРТНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК

Были изучены суспензии ВВ в сплошных органических средах (жидкости, полимеры), которые применяются в современных энергетических материалах. Зависимость критического диаметра детонации таких суспензий от концентрации ВВ описывается уравнением (2.75). Критический диаметр детонации чистого ВВ ( $d_{к0}$ ) определяется уравнением (2.76).

Влияние свойств инертных органических добавок на критический диаметр детонации ВВ было показано на бинарных смесях (суспензиях) гексогена фракции 90–160 мкм, высеянной из одной партии штатного продукта, с СКТН, полидивинилизопреном, глицерином, тетрабромэтаном, дибутилфталатом, дибромбензолом, этиленом бромистым и др.

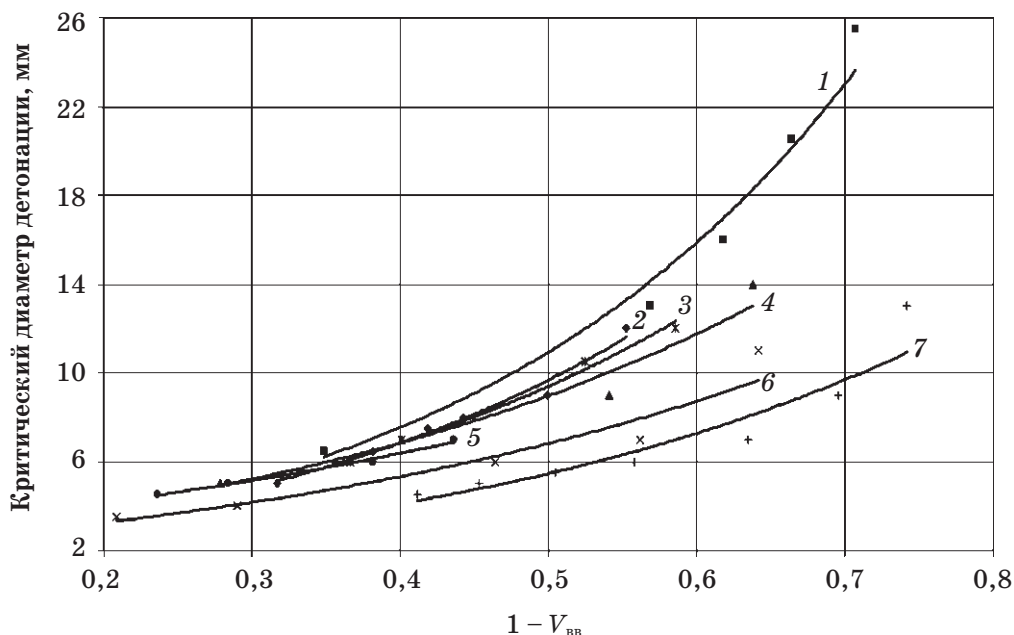


Рис. 2.19. Зависимость  $d_k$  суспензий гексогена фракции 90–160 мкм от объемной доли органической фазы ( $1 - V_{ВВ}$ ):

1 — полидивинилизопрен; 2 — полисилоксан; 3 — дибутилфталат; 4 — глицерин; 5 — дибромбензол; 6 — тетрабромэтан; 7 — бромистый этилен

Были исследованы концентрационные зависимости  $d_k$  при пористости композиций 0,5–1 % (рис. 2.19).

На рис. 2.19 видно, что степень изменения критического диаметра суспензий с увеличением объемной доли жидкой фазы различна для разных органических веществ.

В табл. 2.30 приведены экспериментальные значения параметра  $n$  из уравнения (2.75) для исследованных суспензий, а также плотность ( $\rho_{ж}$ ) и объемная скорость звука ( $C_0$ ) выбранных органических жидкостей и полимеров.

Результаты исследования представлены на рис. 2.20, из которого видно, что параметр  $n$ , определяемый углами наклона прямых, соответствующих логарифмической зависимости критического диаметра ВК от объемной доли ВВ, можно связать корреляционной зависимостью с акустической жесткостью добавок, связанной с их сжимаемостью в ударной волне. Полученная зависимость описывается линейным уравнением

$$n = A_1 - 3 \cdot 10^{-4} \rho_{ж} C_0. \quad (2.81)$$

Коэффициенты этого уравнения определены методом наименьших квадратов. Для исследованной фракции гексогена 90–160 мкм коэффициент  $A_1 = 2,3$ .

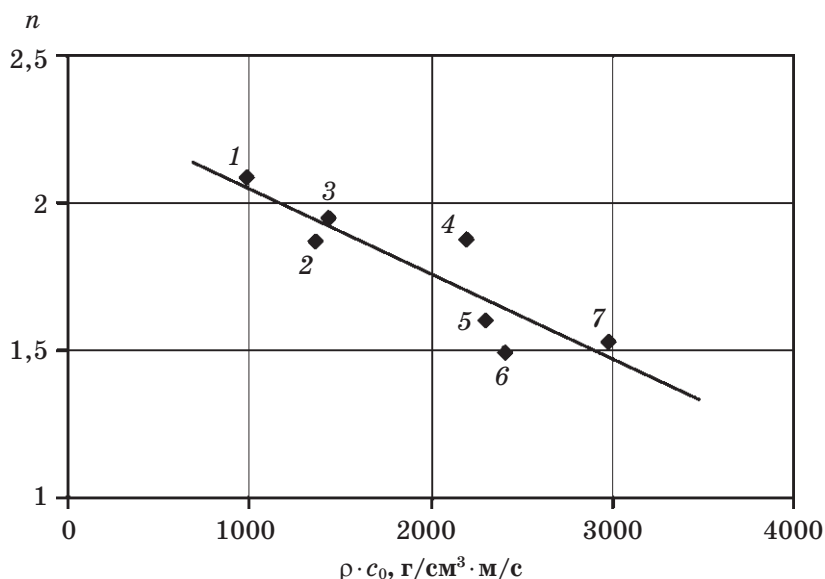
Т а б л и ц а 2.30

**Свойства органических жидкостей, полимеров и параметр  $n$   
для суспензий гексогена фракции 90–160 мкм в них**

Среда	$\rho_{\text{ж}}, \text{г/см}^3$	$C_0, \text{м/с}$	$n_{\text{эксп.}}$
Полисилоксан	0,98	1010*	2,09
Полидивинилизопрен	0,92	1479*	1,87
Глицерин	1,26	1910	1,49
Тетрабромэтан	2,96	1005	1,53
Дибутилфталат	1,05	1366*	1,95
Дибромбензол	1,96	1120*	1,88
Бромистый этилен	2,18	1058*	1,60

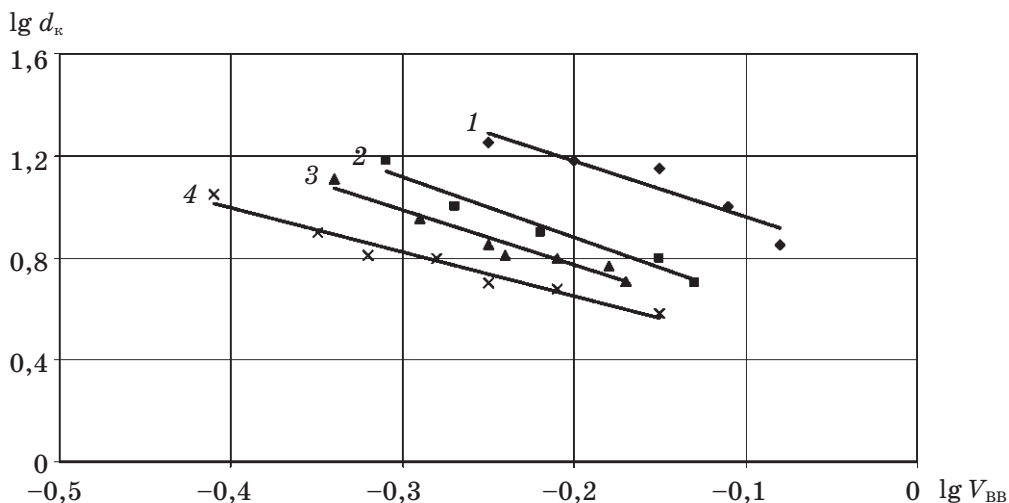
\* Скорость звука определялась экспериментально.

Для изучения влияния химической природы кристаллических ВВ на параметр  $n$  и коэффициент  $A_1$  были получены узкие фракции гексогена, октогена, ТЭНа и тетрила со средним размером зерна 100 мкм. В качестве добавки использовался низкомолекулярный полисилоксановый каучук марки СКТН. Исследовалось влияние разбавления указанных



**Рис. 2.20.** Зависимость параметра  $n$  для суспензий гексогена фракции 90–160 мкм в органических средах (жидкости, полимеры) от их акустической жесткости:

1 — полисилоксан, 2 — полидивинилизопрен, 3 — дибутилфталат, 4 — дибромбензол, 5 — бромистый этилен, 6 — глицерин, 7 — тетрабромэтан



**Рис. 2.21.** Зависимость критического диаметра ВК от степени разбавления ВВ полисилоксановым каучуком СКТН для различных ВВ со средним размером зерна 100 мкм: 1 — тетрил; 2 — октоген; 3 — гексоген; 4 — ТЭН

ВВ инертной органической добавкой на критический диаметр композиций. Результаты эксперимента представлены на рис. 2.21.

Результаты обработки экспериментальных данных, представленные в табл. 2.31, показали, что вид ВВ слабо влияет на параметр  $n$  и коэффициент  $A_1$  уравнения (2.81).

*Таблица 2.31*

**Значения параметра  $n$  и коэффициента  $A_1$  для смесей кристаллических ВВ (средний размер зерна 100 мкм) с СКТН**

ВВ	$n_{\text{эксп.}}$	$A_1$
Гексоген	2,1	2,4
Октоген	2,4	2,7
ТЭН	2,0	2,3
Тетрил	2,2	2,5

Таким образом, для смесей любого взрывчатого вещества, имеющего отрицательный кислородный баланс, с инертной органической добавкой значение параметра  $n$  можно рассчитать по дисперсности ВВ и акустической жесткости добавки.

Полученные результаты подтверждают теоретические представления о том, что в гетерогенных системах на основе бризантных ВВ

с малым временем разложения (гексоген, ТЭН и др.) инертные органические добавки (жидкости, полимерное связующее, воск и т. д.), имеющие толщину прослойки между частицами ВВ порядка нескольких микрон, успевают сжиматься и разгоняться в зоне химической реакции детонационной волны [88]. Параметр  $n$  определяется акустической жесткостью инертной органической добавки, связанной с ее ударной сжимаемостью, а также величиной удельной поверхности ВВ.

Ниже представлены аналитические зависимости параметра  $n$  от удельной поверхности ВВ и характеристик инертной органической добавки:

$$n = 2,95 + 1,2 \lg S_{\text{ад}} - 0,3 \rho_{\text{д}} C_0, \quad (2.82)$$

либо

$$n = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3 \rho_{\text{д}} C_0, \quad (2.83)$$

где  $C_0, \rho_{\text{д}}$  — скорость звука в инертной органической добавке, км/с и ее плотность, г/см<sup>3</sup>;  $S_{\text{ад}}, S_g$  — удельная поверхность ВВ, м<sup>2</sup>/г.

### 2.3.3. ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ ИНЕРТНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК

Исследовалась детонационная способность взрывчатых композиций (ВК) на основе ТЭНа и гексогена с инертными неорганическими добавками различного вида: металлами, оксидами и солями. Ранее было показано, что влияние инертных органических добавок на детонационную способность гетерогенных взрывчатых систем определяется их акустической жесткостью, связанной с ударной сжимаемостью [88]. В данной работе выявлялись определяющие физические свойства неорганических добавок.

В базовые беспористые пластичные взрывчатые композиции (ВК): ТЭН (0,44 м<sup>2</sup>/г или 0,53 м<sup>2</sup>/г)/полидиметилсилоксановый каучук (СКТ) 70/30 % мас. и гексоген (0,10 м<sup>2</sup>/г)/СКТ 80/20 % мас. вводили W, Fe, Ni, Cu, Ag, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, NiO, PbO<sub>2</sub>, WO<sub>3</sub>, BaSO<sub>4</sub>, PbCO<sub>3</sub>, NaCl, KBr, KCl. Содержание неорганических добавок в смесях варьировалось от 1 до 60 % мас., их плотность составляла 1,98–19,17 г/см<sup>3</sup>, среднемассовый размер частиц 1–500 мкм.

Основные результаты экспериментов приведены на рис. 2.22 и 2.23.

Результаты исследований показали, что зависимость критического диаметра детонации ВВ от степени их разбавления инертными веществами, как органическими, так и неорганическими, является единой. Для неорганических инертных компонентов определяющими характеристиками являются: плотность, связанная с затратами энергии на разгон частиц в детонационной волне, и дисперсность, связанная, по-

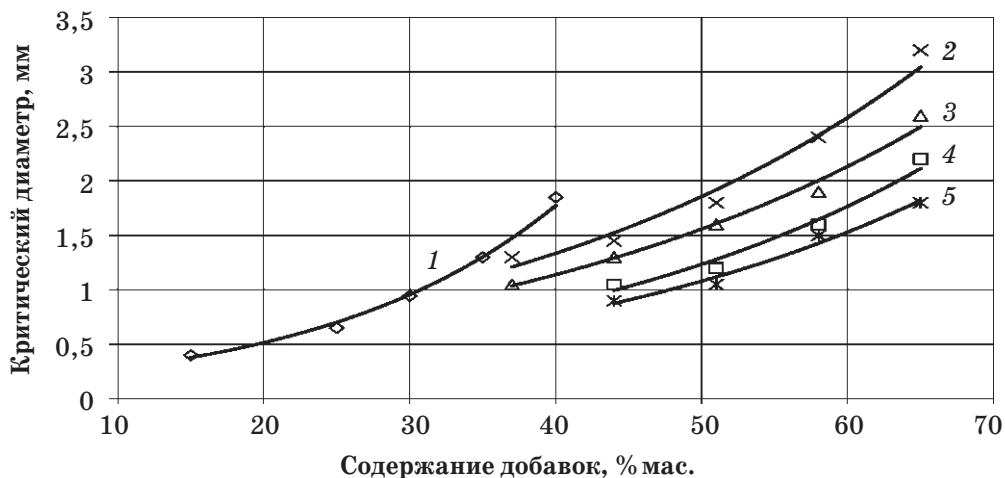


Рис. 2.22. Зависимость критических диаметров детонации смесей на основе ТЭНа ( $4385 \text{ см}^2/\text{г}$ ) от суммарного содержания инертных добавок в смеси: 1 — КТ; 2 — КТ + NaCl (485 мкм); 3 — КТ + NaCl (220 мкм); 4 — КТ + Cu (15 мкм); 5 — КТ + W (7 мкм)

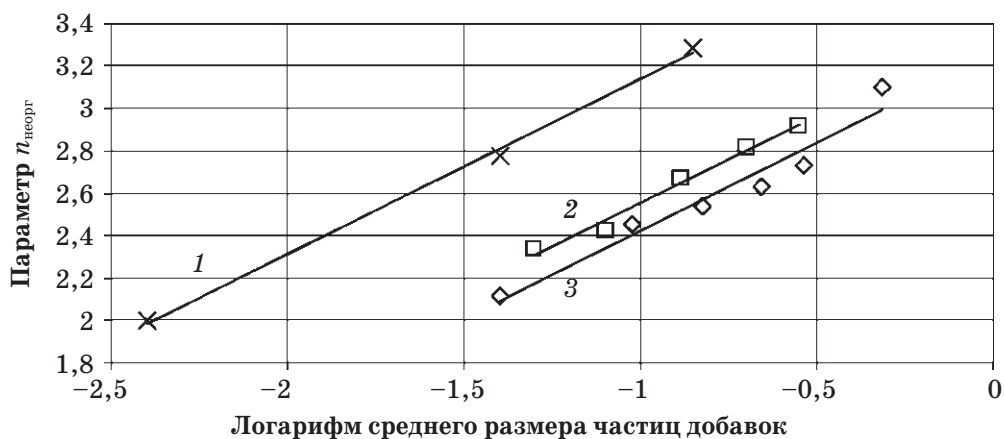


Рис. 2.23. Зависимость параметра  $n_{\text{неорг}}$  от логарифма среднего размера частиц добавок: 1 — Fe ( $7,85 \text{ г/см}^3$ ); 2 — KBr ( $2,75 \text{ г/см}^3$ ); 3 — NaCl ( $2,16 \text{ г/см}^3$ )

видимому, с характером диссипации энергии волны разрежения и скоростью звука в расширяющихся продуктах взрыва. Критический диаметр детонации ВК тем меньше, чем меньше размер частиц добавок и ниже их плотность.

При этом параметр  $n$  сложных взрывчатых композиций (ВК), содержащих как органические, так и неорганические добавки, рассчитывается по формулам:

$$n = A(n_{\text{орг}}) + B(n_{\text{неорг}}); \quad (2.84)$$

$$n_{\text{орг}} = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3\rho_{\text{од}}C_0; \quad (2.85)$$

$$n_{\text{неорг}} = g + 0,114\rho_{\text{нд}} + 0,897 \lg r; \quad (2.86)$$

$$A = \frac{\beta}{\beta + \gamma}, \quad B = \frac{\gamma}{\beta + \gamma}, \quad (2.87)$$

где  $\rho_{\text{од}}$  — плотность органической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{\text{нд}}$  — плотность неорганической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $r$  — средний размер частиц неорганической добавки, мм;  $\beta$ ,  $\gamma$  — массовые доли органической и неорганической добавки в ВК соответственно;  $g$  — коэффициент: для металлов и оксидов  $g = 3,46$ , для солей  $g = 3,32$ .

#### 2.3.4. ВОДНЫЕ СУСПЕНЗИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВВ

Известно, что в связи с крупными авариями были приняты более строгие меры к транспортировке ВВ. Обязательным условием перевозки больших количеств индивидуальных мощных ВВ стала их флегматизация водой. Много работ было проведено по оценке взрывобезопасности водных суспензий кристаллических ВВ по таким известным критериям, как чувствительность к механическим воздействиям (удар и трение), ударно-волновая чувствительность, быстрый и медленный нагрев и др. [95]. В то же время по такому важному критерию, как детонационная способность, исследований мало. В данном разделе приведены результаты изучения детонационной способности водных суспензий твердых ВВ, которая определяет возможность распространения детонации от очага инициирования в объем суспензии. Мерой детонационной способности является критический диаметр детонации ( $d_k$ ), ниже которого устойчивая детонация во взрывчатых материалах не распространяется.

Цель исследований заключалась как в непосредственном получении экспериментальных величин критических диаметров детонации водных суспензий наиболее важных штатных ВВ, так и в разработке метода расчета, позволяющего оценивать детонационную способность водных суспензий различных кристаллических ВВ при варьировании дисперсности ВВ и его содержания в суспензии.

Экспериментально определялись критические диаметры детонации суспензий ТЭНа, гексогена и октогена различной дисперсности в воде. Удельная поверхность каждого образца порошкообразного ВВ ( $S_g$ ) определялась по его газопроницаемости на приборе ПСХ-12. Суспензии готовились в аппарате вибровакuumным способом. Агрегативная и седиментационная устойчивость суспензий обеспечивалась загущением их

небольшой добавкой водорастворимого полимера (агар-агар, 1,5 % мас. к воде), практически не влияющей на величину критического диаметра детонации суспензий. Однородность суспензий контролировалась методом весового анализа.

Заряды суспензий изготавливались в тонкостенных лавсановых трубках различного диаметра. Таким образом определялись критические диаметры детонации суспензий ВВ практически без оболочки. Экспериментально устанавливался минимальный диаметр заряда, ниже которого устойчивая детонация в зарядах не распространялась. Точность определения  $d_k$  составляла 0,5 мм.

Исследовалось влияние вида, дисперсности и содержания (в % мас. и в объемных долях) твердых взрывчатых веществ на критические диаметры детонации их суспензий в воде. В табл. 2.32–2.36 приведены величины критических диаметров детонации исследованных водных суспензий ТЭНа и гексогена в зависимости от содержания ВВ (% мас.) с различной удельной поверхностью ( $S_g$ ).

Таблица 2.32

**Критические диаметры детонации водных суспензий ТЭНа ( $S_g = 660 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас.	30	35	40	45	50	55
$d_k$ , мм	32,0	22,0	16,0	13,0	11,0	8,0

Таблица 2.33

**Критические диаметры детонации водных суспензий ТЭНа ( $S_g = 4300 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас.	30	35	40	45	50
$d_k$ , мм	25,0	19,0	10,0	8,0	6,0

Таблица 2.34

**Критические диаметры детонации водных суспензий ТЭНа ( $S_g = 6900 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас.	30	35	40	45	50
$d_k$ , мм	26,0	14,0	7,0	3,5	2,5

Таблица 2.35

**Критические диаметры детонации  
водных суспензий гексогена ( $S_g = 1600 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас.	50	55	60	65
$d_k$ , мм	17,0	12,0	10,0	7,0



**Критические диаметры детонации  
водных суспензий гексогена ( $S_g = 5230 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас.	40	45	50	55
$d_k$ , мм	25,0	17,0	10,0	7,0

Критические диаметры детонации взрывчатых композиций (ВК) с инертными органическими добавками различного вида определяются объемной долей ВВ:

$$d_k = \frac{d_{k0}}{V_{\text{ВВ}}^n},$$

где  $d_k$  — критический диаметр детонации ВК;  $d_{k0}$  — критический диаметр чистого ВВ при его реальной дисперсности и дефектности кристаллов и высокой плотности (пористость 0,1–2 %);  $V_{\text{ВВ}}$  — объемная доля ВВ в ВК;  $n$  — параметр, определяемый дисперсностью ВВ и акустической жесткостью инертной органической жидкости, связанной с ее ударной сжимаемостью.

Анализ полученных результатов показал, что критические диаметры детонации водных суспензий также определяются объемной долей ВВ и согласуются с выше указанной формулой. На рис. 2.24, *а* приведены зависимости критических диаметров детонации водных суспензий от объемной доли ТЭНа с различной удельной поверхностью. На рис. 2.24, *б* приведена логарифмическая форма этих зависимостей. Последняя необходима для определения тангенса угла наклона прямой, соответствующего параметру  $n$  приведенного уравнения.

На рис. 2.25, *а*, 2.25, *б* приведены аналогичные графики для водных суспензий на основе гексогена.

По приведенному методу расчета, разработанному для суспензий ВВ в органических средах (2.3.2), были рассчитаны параметры  $n$  для исследованных водных суспензий ВВ. В табл. 2.37 сопоставлены экспериментальные и рассчитанные значения параметра  $n$  для водных суспензий ТЭНа и гексогена.

Из табл. 2.37 видно, что экспериментальные и расчетные значения параметра  $n$  близки между собой. Средняя относительная погрешность расчета критических диаметров детонации водных суспензий ТЭНа и гексогена составила 17 %. Следовательно, можно сказать, что разработанный метод расчета критических диаметров детонации для суспензий ВВ в органических средах можно использовать и для водных суспензий ВВ.

Предложенный метод расчета был подтвержден также при исследовании водных суспензий октогена.

Таблица 2.37

Величины параметра  $n$  для водных суспензий ТЭНа и гексогена

Суспензии	Параметр $n$	
	расч.	эксп.
ТЭНа ( $660 \text{ см}^2/\text{г}$ )	2,05	2,18
ТЭНа ( $4300 \text{ см}^2/\text{г}$ )	3,18	3,17
ТЭНа ( $6900 \text{ см}^2/\text{г}$ )	3,46	3,22
Гексогена ( $1600 \text{ см}^2/\text{г}$ )	2,58	2,69
Гексогена ( $5320 \text{ см}^2/\text{г}$ )	3,29	3,03

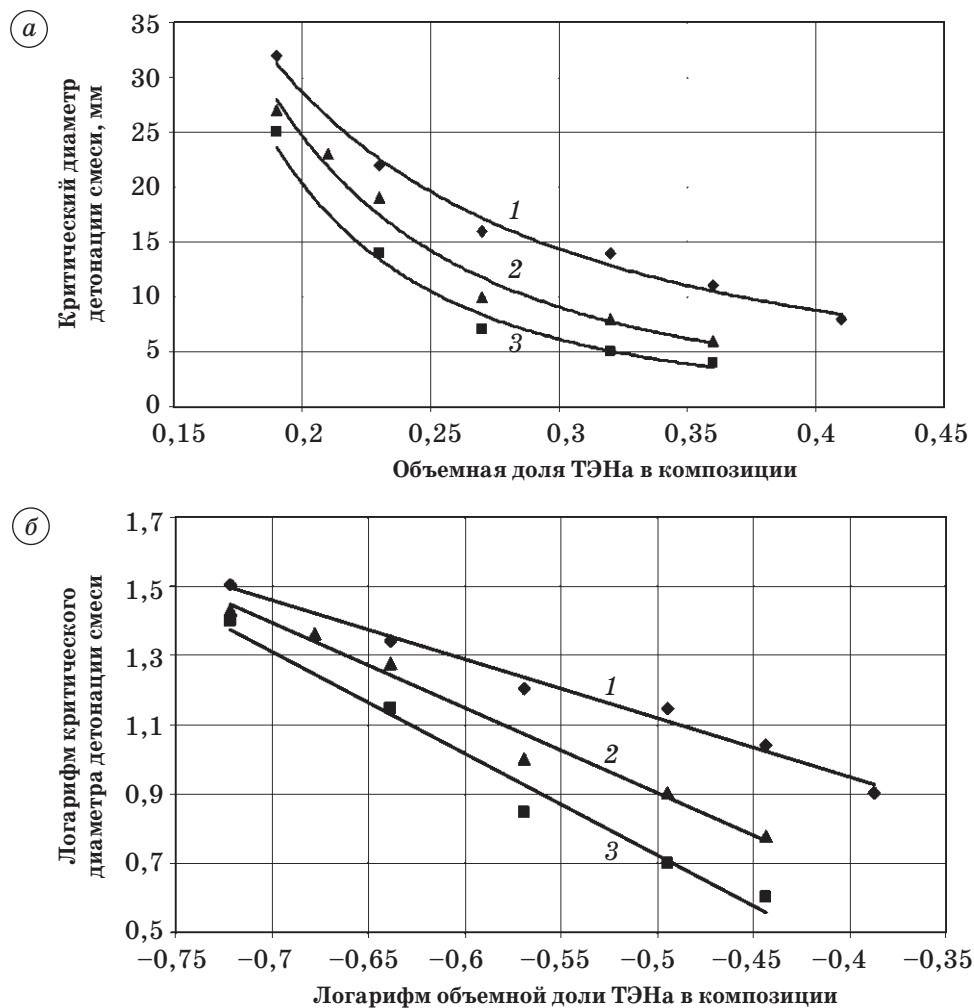


Рис. 2.24. Зависимость  $d_k$  водных суспензий от объемной доли ТЭНа с различной  $S_g$ :  
1 —  $660 \text{ см}^2/\text{г}$ ; 2 —  $4300 \text{ см}^2/\text{г}$ ; 3 —  $6900 \text{ см}^2/\text{г}$  (а); логарифмическая форма зависимости (б)

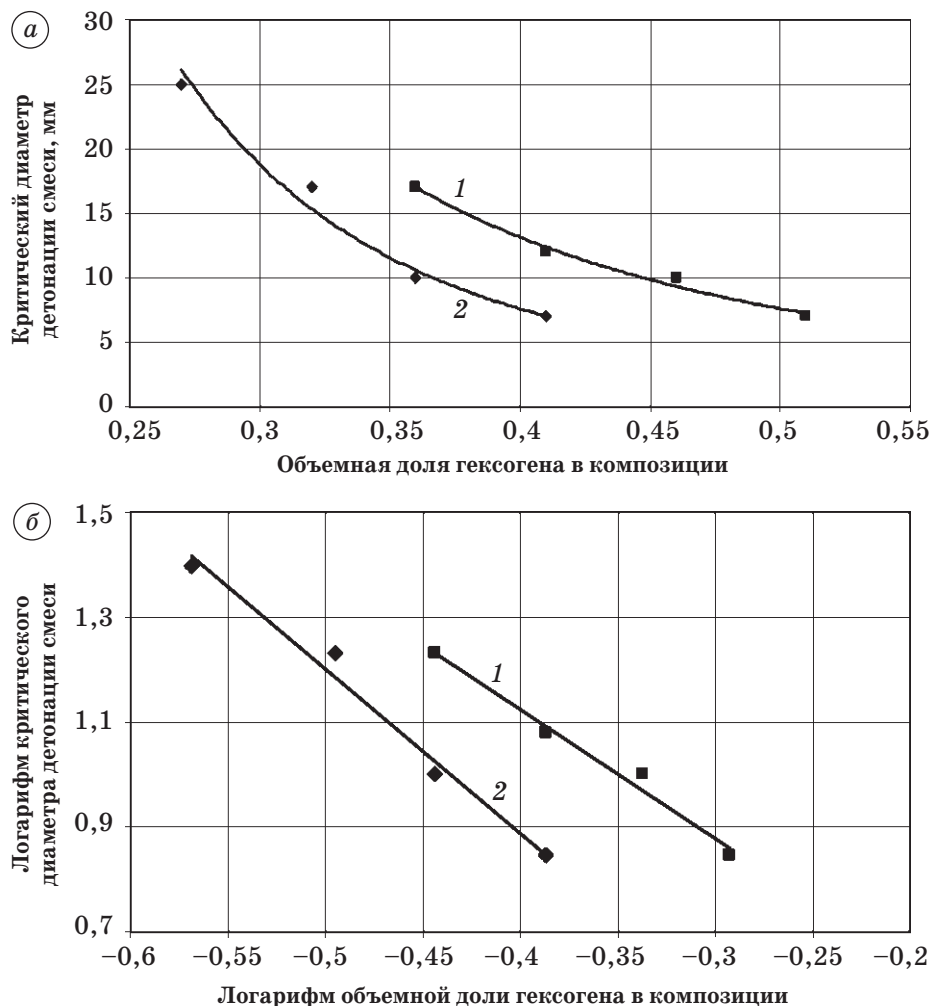


Рис. 2.25. Зависимость  $d_k$  водных суспензий от объемной доли гексогена с различной  $S_g$ : 1 — 1600 см<sup>2</sup>/г; 2 — 5230 см<sup>2</sup>/г (а); логарифмическая форма зависимости (б)

Экспериментально определялись критические диаметры детонации водных суспензий октогена различной дисперсности (удельная поверхность октогена  $S_g$  менялась от 500 до 3400 см<sup>2</sup>/г). В табл. 2.38, 2.39 и на рис. 2.26 приведены полученные результаты.

В табл. 2.40 представлены экспериментальные и расчетные значения параметра  $n$  для водных суспензий октогена.

Полученные новые экспериментальные данные по детонационной способности водных суспензий твердых ВВ (ТЭНа, гексогена, октогена) предложены для использования в комплексной оценке взрывобезопасности при их производстве и транспортировке.

Таблица 2.38

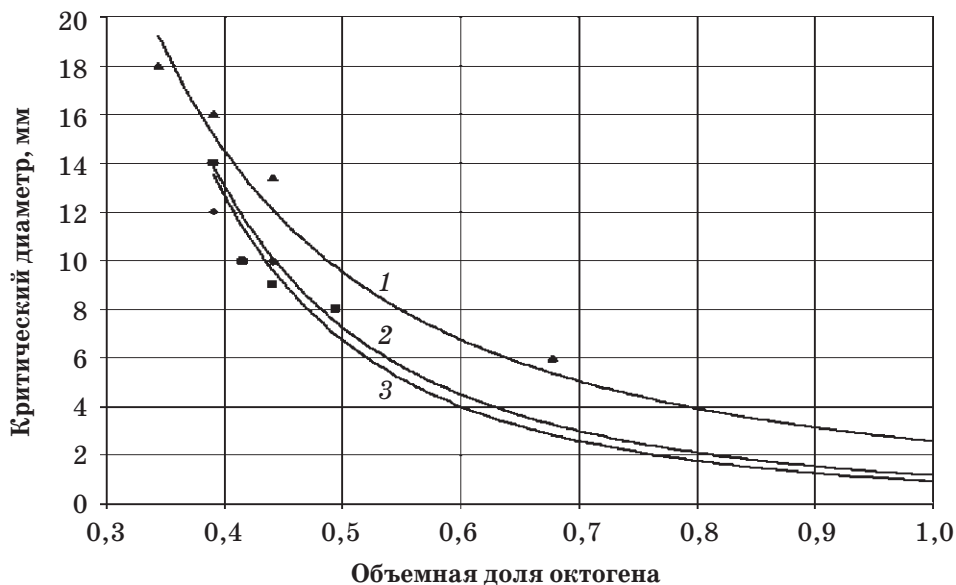
**Критические диаметры детонации  
водных суспензий октогена ( $S_g = 500$  и  $S_g = 1700 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас. ( $S_g = 500 \text{ см}^2/\text{г}$ )	$d_{\text{к}}$ , мм	Содержание ВВ, % мас. ( $S_g = 1700 \text{ см}^2/\text{г}$ )	$d_{\text{к}}$ , мм
80,0	6,0	65,0	8,0
60,0	13,5	60,0	9,0
55,0	16,0	57,5	10,0
50,0	18,0	55,0	14,0

Таблица 2.39

**Критические диаметры детонации  
водных суспензий октогена ( $S_g = 2400$  и  $S_g = 3400 \text{ см}^2/\text{г}$ )**

Содержание ВВ, % мас. ( $S_g = 2400 \text{ см}^2/\text{г}$ )	$d_{\text{к}}$ , мм	Содержание ВВ, % мас. ( $S_g = 3400 \text{ см}^2/\text{г}$ )	$d_{\text{к}}$ , мм
65,0	8,0	60,0	9,0
60,0	10,0	57,5	10,0
57,5	10,0	55,0	12,0
55,0	12,0	50,0	17,0



**Рис. 2.26.** Зависимость критических диаметров детонации водных суспензий от объемной доли октогена с удельной поверхностью ( $S_g$ ):

1 —  $500 \text{ см}^2/\text{г}$ , 2 —  $1700 \text{ см}^2/\text{г}$ , 3 —  $2400 \text{ см}^2/\text{г}$ . Сплошные линии — расчет, точки — эксперимент

Т а б л и ц а 2.40

Величины параметра  $n$  для водных суспензий октогена

Суспензии октогена	Параметр $n$	
	расч.	эксп.
Октоген (500 см <sup>2</sup> /г)	1,88	1,86
Октоген (1700 см <sup>2</sup> /г)	2,62	2,54
Октоген (2400 см <sup>2</sup> /г)	2,83	2,75
Октоген (3400 см <sup>2</sup> /г)	3,04	2,94

Как видно из рис. 2.26 и табл. 2.40, расчет удовлетворительно согласуется с экспериментом. Средняя погрешность расчёта критических диаметров детонации суспензий октогена составила 9,2 %.

Таким образом установлена зависимость критических диаметров детонации водных суспензий от содержания и дисперсности ВВ.

Впервые разработан единый метод расчета критических диаметров детонации суспензий кристаллических ВВ в сплошных органических средах (жидкости, полимеры) и воде.

Разработан способ приготовления однородных седиментационно устойчивых водных суспензий кристаллических ВВ в аппарате вибровакуумным способом с загущением их небольшой добавкой водорастворимого полимера (агар-агар).

### 2.3.5. ОСНОВНЫЕ СПОСОБЫ РЕГУЛИРОВАНИЯ ДЕТОНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ

**Вид ВВ.** Главным фактором, определяющим детонационную способность взрывчатых композиций, является вид ВВ — основы ВК. В табл. 2.41 приведены критические диаметры детонации высокодисперсных индивидуальных ВВ различного химического строения при малой пористости зарядов 0,1–2 %.

Из таблицы видно, что из индивидуальных ВВ малым  $d_k$  обладают энергонасыщенные ВВ, имеющие высокие положительные энтальпии образования, либо небольшие энергии активации термораспада, такие как полиазотистые гетероароматические соединения и нитраты спиртов.

**Дисперсность ВВ.** Эффективным способом регулирования детонационной способности взрывчатого материала является изменение дисперсности ВВ. Зависимость критического диаметра детонации индивидуального ВВ ( $d_{k0}$ , мм) от удельной поверхности ВВ ( $S_g$ , м<sup>2</sup>/г) выражается формулой (2.76). На рис. 2.27 в качестве примера приведена такая зависимость, обобщенная для монодисперсного и полидисперсного октогена.

Таблица 2.41

**Критические диаметры детонации  
ряда высокодисперсных индивидуальных ВВ**

ВВ	$d_k$ (мм) при различных размерах кристаллов ВВ		
	3 мкм	10 мкм	20 мкм
Тетрил	0,80	1,30	1,75
FOX-7	0,55	1,05	1,60
CL-20	0,45	0,75	1,05
Октоген	0,40	0,75	1,20
Гексоген	0,25	0,60	0,85
ТЭН	0,08	0,20	0,40
DNTF	0,07	0,15	0,25
Бензотрифуроксан	0,06	0,15	0,30

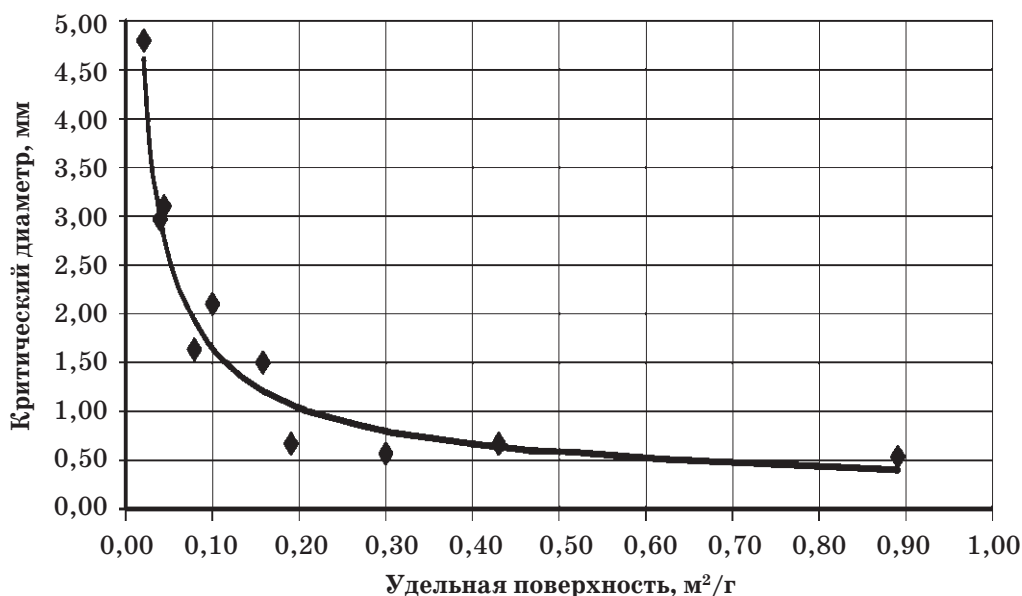


Рис. 2.27. Зависимость критических диаметров детонации октогена от его удельной поверхности ( $S_d$ )

**Концентрация ВВ во взрывчатом материале.** Детонационная способность взрывчатого материала регулируется также концентрацией ВВ в нем. Для эластичных ВВ оптимальная концентрация ВВ — 82–88 % мас. Зависимость критического диаметра детонации взрывчатых композиций с инертными добавками ( $d_k$ ) от объемной доли ВВ ( $V_{ВВ}$ )

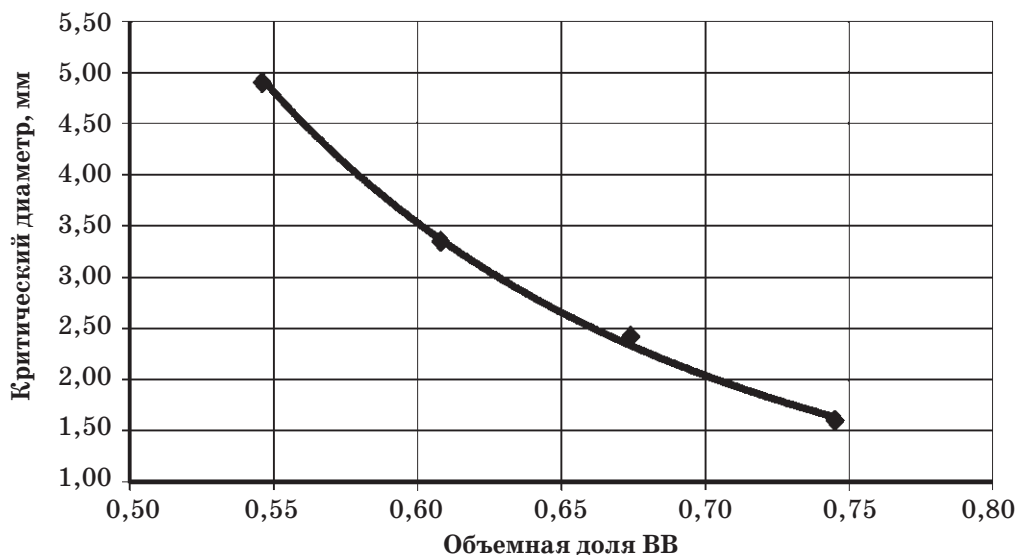


Рис. 2.28. Зависимость  $d_k$  ВК на основе октогена ( $S_g = 0,89 \text{ м}^2/\text{г}$ ) от объемной доли ВВ

выражается формулой (2.75). На рис. 2.28 в качестве примера приведена указанная зависимость для ВК: высокодисперсный октоген/СКТ.

**Пористость заряда.** Детонационную способность взрывчатого материала можно также регулировать пористостью заряда. Пористость заряда ( $\Pi$ ) рассчитывается по формуле:  $\Pi = 1 - \rho_0 / \rho_{\max}$ , где  $\rho_0$  — реальная плотность заряда,  $\text{г}/\text{см}^3$ ;  $\rho_{\max}$  — максимальная плотность состава,  $\text{г}/\text{см}^3$ .

В табл. 2.42 даны для примера значения критических диаметров детонации составов на основе гексогена и тетрила с СКТ и чистого тетрила.

На рис. 2.29 приведены соответствующие графики.

Результаты исследования показали, что зависимости критического диаметра детонации гетерогенных ВК и чистых кристаллических ВВ от пористости заряда описываются общим уравнением

$$d_{\text{кпор}} = d_{\text{к}} \cdot 10^{K_n \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\max}}\right)}, \quad (2.88)$$

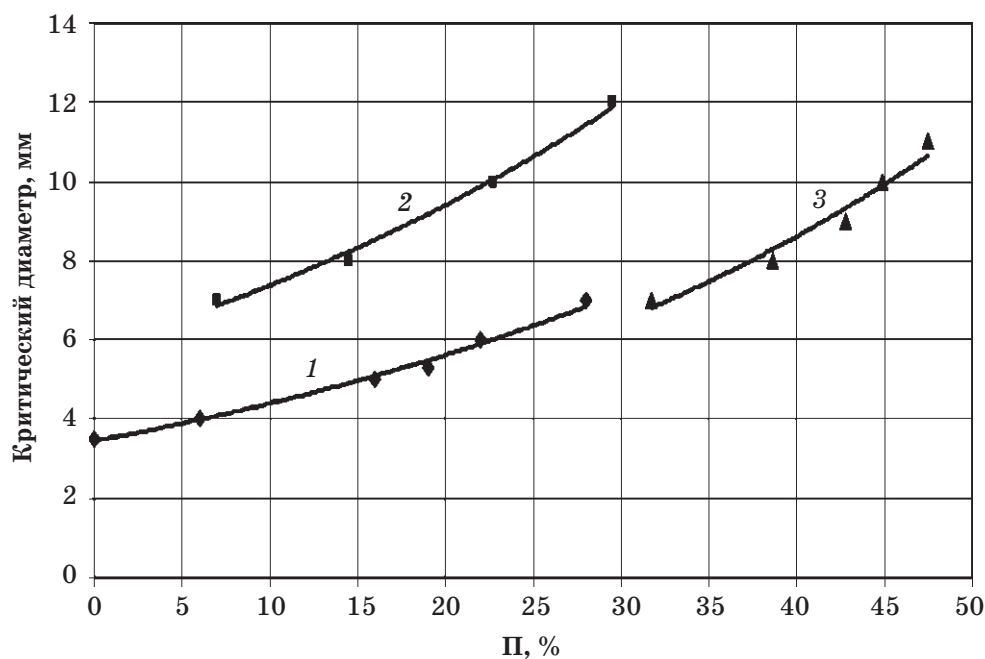
где  $d_{\text{кпор}}$  — критический диаметр детонации композиции при реальной плотности заряда  $\rho_0$ ;  $d_{\text{к}}$  — критический диаметр композиции при ее максимальной плотности  $\rho_{\max}$ ;  $K_n$  — коэффициент.

Методом наименьших квадратов для всех исследованных взрывчатых композиций были определены коэффициенты  $K_n$ , значения которых составили 1,04–1,23. Ввиду того что разница между ними незначительна,

Таблица 2.42

## Влияние пористости на критический диаметр детонации ВК

Состав ВК, % мас.	П, %	$d_k$ , мм
Гексоген (фракция 160–200 мкм) / СКТ 85/15	0	3,5
	6,0	4,0
	16,0	5,0
	19,0	5,3
	22,0	6,0
	28,0	7,0
Тетрил (фракция 250–315 мкм) / СКТ 90/10	7,0	7,0
	14,5	8,0
	22,7	10,0
	29,5	12,0
Тетрил (фракция 250–315 мкм)	31,7	7,0
	38,6	8,0
	42,8	9,0
	44,9	10,0
	47,5	11,0

Рис. 2.29. Зависимость  $d_k$  ВК и ВВ от пористости заряда:

1 — гексоген (160–200 мкм)/СКТ 85/15; 2 — тетрил (250–315 мкм)/СКТ 90/10; 3 — тетрил (250–315 мкм)



для практических расчетов был принят единый средний коэффициент  $K_n = 1,14$ . Таким образом, полученное уравнение можно использовать для определения критического диаметра детонации ВК и чистых ВВ при заданной плотности заряда в следующем виде:

$$d_{\text{кпор}} = d_{\text{к}} \cdot 10^{1,14 \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\text{max}}} \right)} \quad (2.89)$$

**Тяжелые высокодисперсные инертные неорганические добавки.** Известно, что введение небольших количеств тяжелых высокодисперсных неорганических добавок несколько повышает детонационную способность ВК (эффект сенсibilизации). Авторами исследовалась зависимость критических диаметров детонации взрывчатых смесей на основе штатных ВВ: ТЭНа и гексогена от вида и содержания ( $\gamma$ ) тяжелых высокодисперсных неорганических добавок (металлов, оксидов и солей), их дисперсности ( $r$ ) и плотности ( $\rho_{\text{пл}}$ ).

В базовые беспористые пластичные взрывчатые композиции: ТЭН ( $S_g = 0,5285 \text{ м}^2/\text{г}$ )/полидиметилсилоксановый каучук марки СКТ (70/30 % мас.) и гексоген ( $S_g = 0,1000 \text{ м}^2/\text{г}$ ) / СКТ (80/20 % мас.) вводили порошкообразные Fe, Ni, Cu,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , NiO,  $\text{PbO}_2$ ,  $\text{WO}_3$ ,  $\text{BaSO}_4$ ,  $\text{PbCO}_3$ . Содержание неорганических добавок в смесях варьировалось от 1–40 % мас., их плотность составляла 4–19 г/см<sup>3</sup>, среднемассовый размер частиц 0,1–5 мкм.

Критические диаметры детонации взрывчатых смесей определяли экспериментально методом подрыва сплошных шнуровых зарядов различного диаметра на свинцовой пластине — свидетеле с точностью 0,05 мм. Значение критического диаметра детонации для каждой смеси подтверждалось из пяти параллельных опытов.

В табл. 2.43–2.45 приведены критические диаметры детонации смесей, содержащих, соответственно, тяжелые высокодисперсные металлы, оксиды и соли.

Таблица 2.43

**Критические диаметры детонации смесей на основе ТЭНа и гексогена с тяжелыми высокодисперсными металлами**

Смесь	Добавка	Размер частиц добавки, мкм	Критический диаметр детонации смеси, мм						
			Содержание добавки в смеси, % мас.						
			0	1	2,5	5	10	15	20
ТЭН (0,5285 м <sup>2</sup> /г)/ СКТ 70/30 % мас.	Fe	4,0	0,75	—	—	0,55	0,60	0,65	0,75
	Ni	4,6		0,55	0,50	0,60	0,65	0,70	0,80
	Cu	4,9		—	—	0,60	0,60	0,65	0,75

Окончание табл. 2.43

Смесь	Добавка	Размер частиц добавки, мкм	Критический диаметр детонации смеси, мм						
			Содержание добавки в смеси, % мас.						
			0	1	2,5	5	10	15	20
Гексоген (0,1000 м <sup>2</sup> /г)/ СКТ 80/20 % мас.	Fe	4,0	5,25	—	—	4,65	4,70	4,75	5,00
	Cu	4,9		—	—	4,40	4,50	4,70	4,75

Таблица 2.44

**Критические диаметры детонации смесей на основе ТЭНа  
и гексогена с тяжелыми высокодисперсными оксидами**

Смесь	Добавка	Размер частиц добавки, мкм	Критический диаметр детонации смеси, мм						
			Содержание добавки в смеси, % мас.						
			0	1	2,5	5	10	15	20
ТЭН (0,5285 м <sup>2</sup> /г)/ СКТ 70/30 % мас.	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2,4	0,75	0,55	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70
	WO <sub>3</sub>	4,2		—	—	0,60	0,65	0,70	0,80
	NiO	4,9		—	—	0,55	0,60	0,70	0,75
	PbO <sub>2</sub>	4,8		—	—	0,55	0,60	0,65	0,75
Гексоген (0,1000 м <sup>2</sup> /г) / СКТ 80/20 % мас.	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2,4	5,25	4,00	3,80	3,90	4,05	4,10	4,25
	WO <sub>3</sub>	4,2		—	—	4,35	4,45	4,55	4,70
	NiO	4,9		—	—	4,15	4,20	4,20	4,25
	PbO <sub>2</sub>	4,8		4,15	4,00	4,30	4,35	4,45	4,55

Таблица 2.45

**Критические диаметры детонации смесей на основе ТЭНа  
с тяжелыми высокодисперсными солями**

Смесь	Добавка	Размер частиц добавки, мкм	Критический диаметр детонации смеси, мм						
			Содержание добавки в смеси, % мас.						
			0	1	2,5	5	10	15	20
ТЭН (0,5285 м <sup>2</sup> /г)/ СКТ 70/30 % мас.	BaSO <sub>4</sub>	2,2	0,75	0,60	0,55	0,60	0,65	0,65	0,70
	PbCO <sub>3</sub>	1,3		0,60	0,55	0,50	0,60	0,65	0,70

Как видно из табл. 2.43–2.45, для всех исследованных в работе неорганических добавок с размером частиц менее 5 мкм и плотностью более 4 г/см<sup>3</sup> при их содержании до 20 % мас. проявляется эффект сенсibilизации.

На рис. 2.30 и 2.31 показаны концентрационные зависимости критического диаметра детонации на примере смесей на основе высокодисперсного ТЭНа с добавками Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и Fe.

На рис. 2.30 и 2.31 видно, что экспериментальная зависимость критического диаметра детонации смесей от содержания неорганической добавки до 20 % мас. имеет экстремальный характер с минимумом при

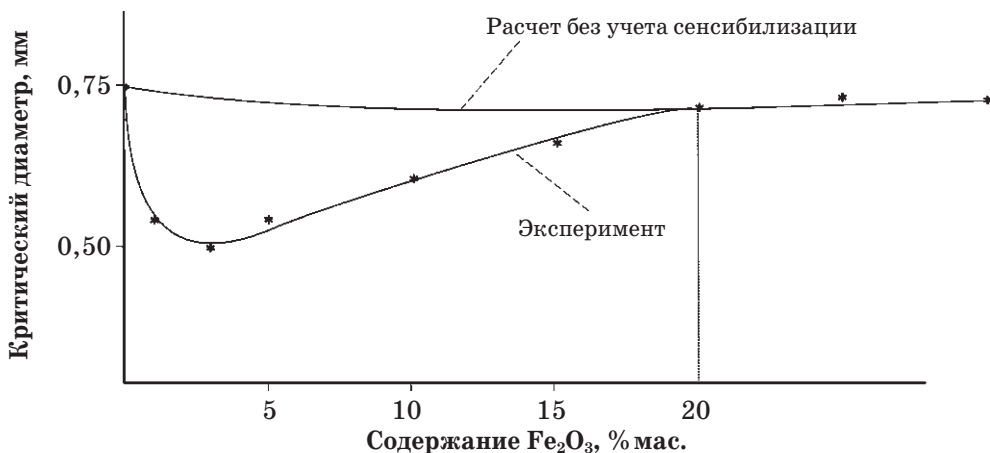


Рис. 2.30. Зависимость критического диаметра детонации смеси ТЭН ( $S_g = 0,5285 \text{ м}^2/\text{г}$ )/СКТ / Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (2,4 мкм) от содержания Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

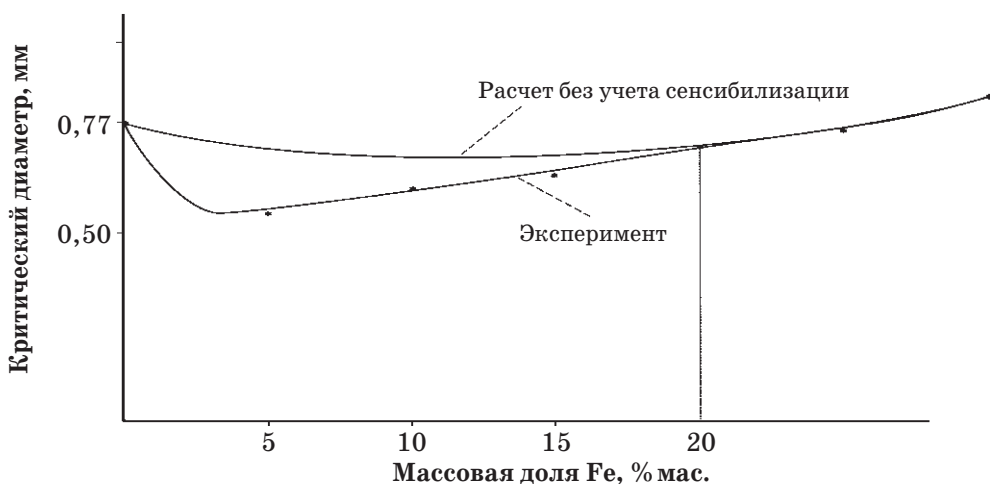


Рис. 2.31. Зависимость критического диаметра детонации смеси ТЭН ( $S_g = 0,5285 \text{ м}^2/\text{г}$ )/СКТ / Fe (4,0 мкм) от содержания Fe

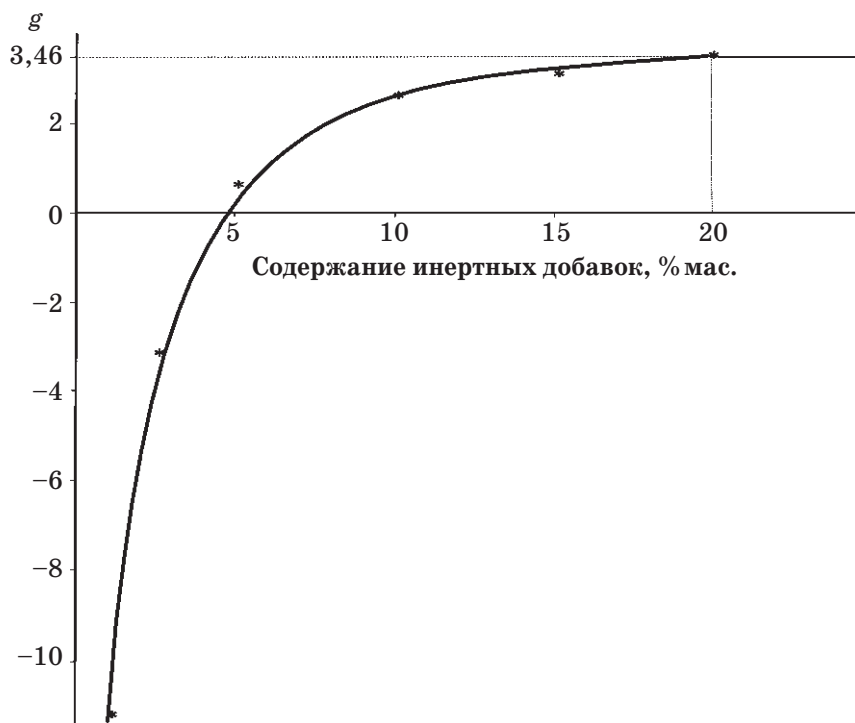


Рис. 2.32. Зависимость коэффициента  $g$  от содержания тяжелых высокодисперсных металлов и оксидов в смесях на основе ТЭНа и гексогена

2–3 % и находится значительно ниже зависимости, рассчитанной по формулам (2.84)–(2.87), не учитывающей эффекта сенсibilизации. При содержании добавки выше 20 % мас. расчетная и экспериментальная зависимости совпадают.

Эффект сенсibilизации может быть учтен в значении коэффициента  $g$  в формуле (2.86). Зависимость коэффициента  $g$  от массовой доли высокодисперсных тяжелых металлов и их оксидов представлена на рис. 2.32. Аналогичная зависимость получена для высокодисперсных тяжелых неорганических солей.

На этом рисунке видно, что зависимость коэффициента  $g$  от содержания добавки с размером частиц 0,1–5 мкм до 20 % мас. имеет вид кривой насыщения. При содержании добавки выше 20 % мас. значения коэффициента  $g$  соответствуют полученным ранее для добавок с размером частиц 5–500 мкм: для металлов и оксидов  $g = 3,46$ , для солей  $g = 3,32$ .

Путем математической обработки опытных данных получена зависимость

$$g = \frac{4,51\gamma - m}{0,004 + \gamma}, \quad (2.90)$$

где  $m$  — коэффициент: для металлов и оксидов  $m = 0,196$ , для солей  $m = 0,225$ .

**Бинарные смеси высокодисперсных ВВ.** Эффективным способом регулирования детонационной способности взрывчатых композиций является использование в их составе бинарных смесей кристаллических ВВ, одно из которых имеет высокие энергетические характеристики, а другое — малый критический диаметр детонации. При этом могут применяться как бинарные смеси грубодисперсного ВВ с высокодисперсным, так и смеси двух высокодисперсных ВВ.

При использовании *бинарных смесей грубодисперсного ВВ с высокодисперсным* зависимости критических диаметров детонации этих смесей и составов на их основе от соотношения ВВ в смесях имеют S-образный вид. Пример такой зависимости приведен на рис. 2.33 (ВК — взрывчатые композиции: бинарная смесь ВВ/СКТ).

В табл. 2.46, также в качестве примера, приведены критические диаметры детонации чистых смесей грубодисперсного октогена (100 мкм, 0,04 м<sup>2</sup>/г) с высокодисперсным ТЭНом (4 мкм, 0,75 м<sup>2</sup>/г) и взрывчатых композиций (ВК), содержащих эти смеси и полисилоксановый каучук СКТ.

Т а б л и ц а 2.46

**Критические диаметры детонации чистых смесей октогена (0,04 м<sup>2</sup>/г) с ТЭНом (0,75 м<sup>2</sup>/г) и композиций: (смесь октогена с ТЭНом) / СКТ (% мас.)**

Содержание ТЭНа в смеси ВВ, % мас.	Объемная доля ТЭНа в смеси ВВ	$d_k$ , мм чистая смесь ВВ	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 85/15	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 80/20	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 75/25	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 70/30
0	0	2,50	3,70	4,33	5,27	6,30
20	0,212	2,30	3,46	4,11	5,05	6,10
40	0,417	1,45	2,64	3,46	4,25	5,20
60	0,617	0,36	0,85	1,62	2,40	3,33
80	0,811	0,26	0,62	0,77	0,85	1,16
100	1	0,11	0,38	0,46	0,54	0,79

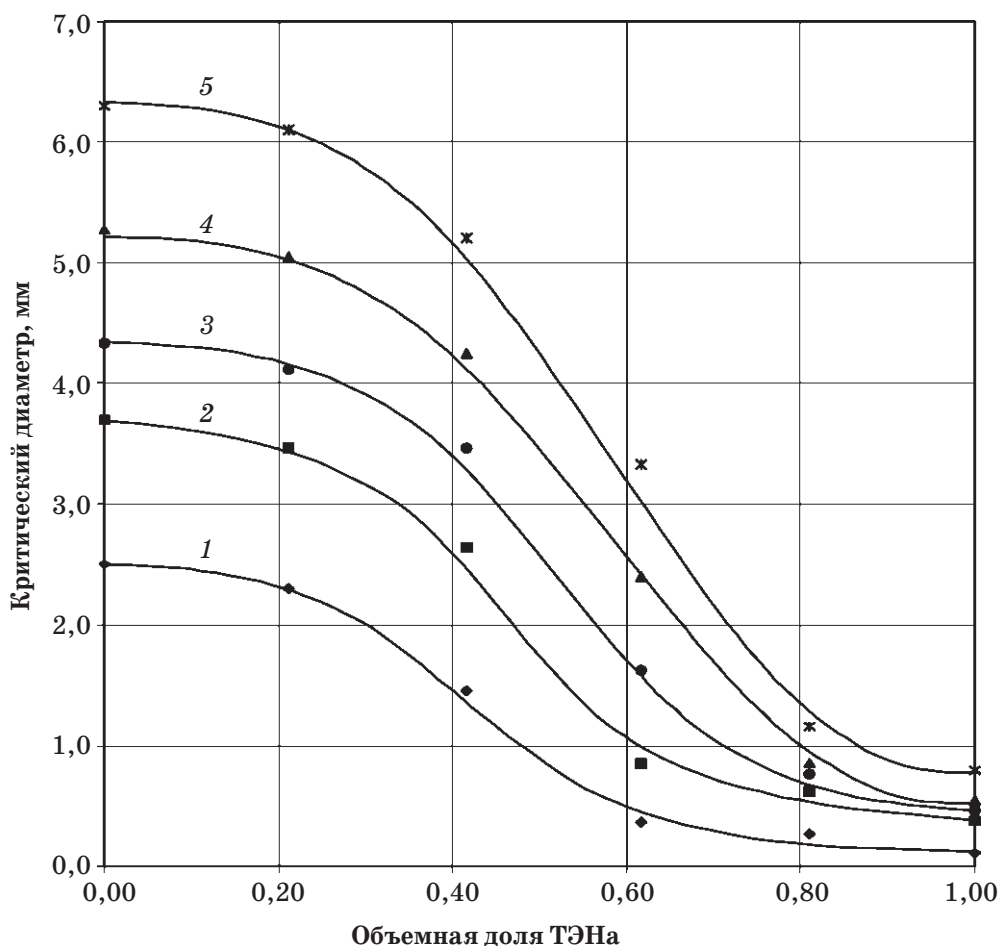
На основе данных табл. 2.46 построены графические зависимости  $d_k$  смесей октогена с ТЭНом и ВК на их основе от объемной доли ТЭНа в смесях (см. рис. 2.33).

Данные зависимости аппроксимируются функцией Лапласа и могут быть выражены следующими уравнениями:

$$d_{\kappa_c} = d_{\kappa_1} e^{bV_2^2}; \quad b = \ln \frac{d_{\kappa_2}}{d_{\kappa_1}}; \quad (2.91)$$

$$d_{\kappa_0}^{(c)} = d_{\kappa_0}^{(1)} e^{bV_2^2}; \quad b = \ln \frac{d_{\kappa_0}^{(2)}}{d_{\kappa_0}^{(1)}}; \quad (2.92)$$

где  $d_{\kappa_1}$  — критический диаметр детонации ВК на основе ВВ с меньшей детонационной способностью;  $d_{\kappa_2}$  — критический диаметр детонации ВК на основе ВВ с большей детонационной способностью;  $d_{\kappa_c}$  — критический диаметр детонации ВК на основе бинарной смеси ВВ;  $V_2$  — объемная доля ВВ с большей детонационной способностью в бинарной смеси ВВ;



**Рис. 2.33.** Зависимость  $d_{\kappa}$  смесей октогена (100 мкм,  $S_g = 0,04 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с ТЭНом (4 мкм,  $S_g = 0,75 \text{ м}^2/\text{г}$ ) и ВК на их основе от объемной доли ТЭНа в смесях:  
1 — бинарные смеси ВВ; 2 — ВК 85/15; 3 — ВК 80/20; 4 — ВК 75/25; 5 — ВК 70/30

$d_{к_0}^{(1)}$  — критический диаметр детонации чистого ВВ с меньшей детонационной способностью;  $d_{к_0}^{(2)}$  — критический диаметр детонации чистого ВВ с большей детонационной способностью;  $d_{к_0}^{(c)}$  — критический диаметр детонации чистой бинарной смеси ВВ.

При использовании *бинарных смесей высокодисперсных (микронных) ВВ* зависимости критических диаметров детонации этих смесей и составов на их основе от соотношения ВВ в смесях являются неаддитивными и представлены в качестве примера на рис. 2.34.

В табл. 2.47, также в качестве примера, приведены критические диаметры детонации чистых смесей высокодисперсного октогена (3 мкм, 0,97 м<sup>2</sup>/г) с высокодисперсным ТЭНом (4 мкм, 0,77 м<sup>2</sup>/г) и ВК, содержащих эти смеси и полисилоксановый каучук СКТ.

Таблица 2.47

**Критические диаметры детонации чистых смесей октогена (0,97 м<sup>2</sup>/г) с ТЭНом (0,77 м<sup>2</sup>/г) и композиций: (смесь октогена с ТЭНом) / СКТ (% мас.)**

Содержание ТЭНа в смеси ВВ, % мас.	Объемная доля ТЭНа в смеси ВВ	$d_k$ , мм чистая смесь ВВ	$d_k$ , мм смесь ВВ / СКТ 85/15	$d_k$ , мм смесь ВВ / СКТ 80/20	$d_k$ , мм смесь ВВ / СКТ 75/25	$d_k$ , мм смесь ВВ / СКТ 70/30
0	0	0,46	1,68	2,38	3,33	4,74
12	0,128	0,35	1,16	1,75	2,42	3,33
25	0,263	0,26	0,95	1,62	2,37	3,21
35	0,366	0,24	0,85	1,16	2,04	3,00
50	0,518	0,18	0,62	0,85	1,62	2,12
65	0,666	0,16	0,58	0,79	0,95	1,56
75	0,763	0,14	0,54	0,62	0,79	1,16
100	1	0,11	0,38	0,46	0,54	0,79

Как видно на рис. 2.34, полученные зависимости для ВК на основе смесей высокодисперсного октогена с высокодисперсным ТЭНом имеют иной вид, чем для ВК с грубодисперсным октогеном (см. рис. 2.33). Наибольшее различие наблюдается в характере снижения  $d_k$  на начальном участке кривых — до 20 % об. ТЭНа. Это имеет не только важное теоретическое значение, так как эти зависимости отражают изменение времени разложения компонентов в детонационной волне, но и практическое — существенное снижение  $d_k$  путем введения

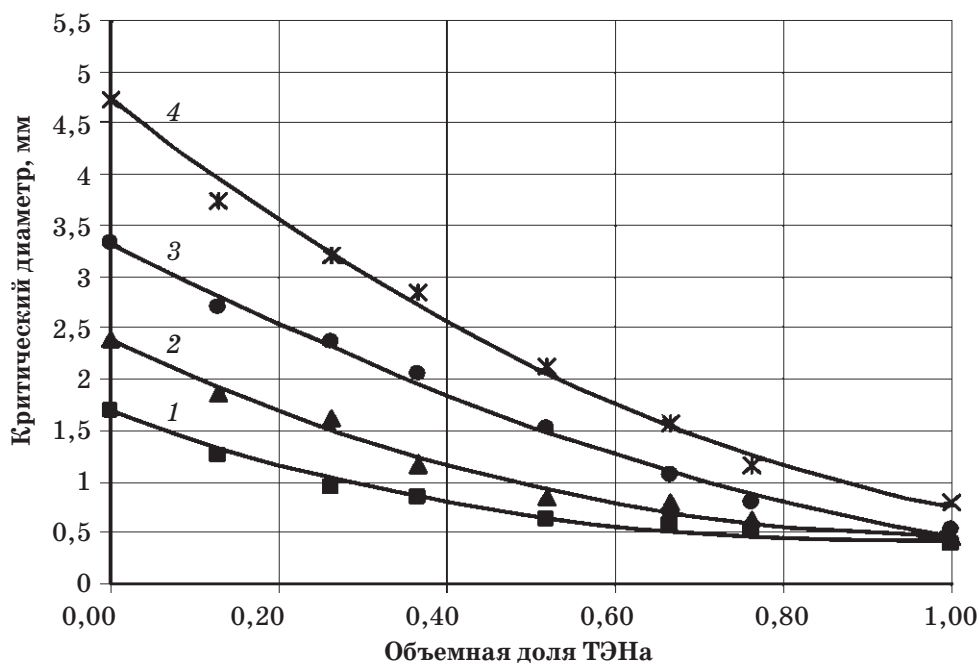


Рис. 2.34. Зависимость  $d_k$  ВК на основе смесей октогена (3 мкм,  $S_g = 0,97 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с ТЭНом (4 мкм,  $S_g = 0,77 \text{ м}^2/\text{г}$ ) от объемной доли ТЭНа в смесях:  
1 — ВК 85/15; 2 — ВК 80/20; 3 — ВК 75/25; 4 — ВК 70/30

небольшого количества ВВ с высокой детонационной способностью в ВК. Для уточнения данной зависимости в интервале 0–25 % мас. ТЭНа были более подробно исследованы ВК на основе смесей высокодисперсного октогена с высокодисперсным ТЭНом (табл. 2.48, рис. 2.35).

Таблица 2.48

Критические диаметры детонации композиций:  
(смесь октогена — 0,90 м<sup>2</sup>/г с ТЭНом — 0,72 м<sup>2</sup>/г) / СКТ (% мас.)

Содержание ТЭНа в смеси ВВ, % мас.	Объемная доля ТЭНа в смеси ВВ	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 80/20	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 75/25	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 70/30
0	0	2,50	3,35	4,78
5	0,054	2,30	3,12	4,25
10	0,108	2,10	2,90	4,00
15	0,161	1,80	2,70	3,80
20	0,213	1,70	2,60	3,70
100	1	0,60	0,70	0,80



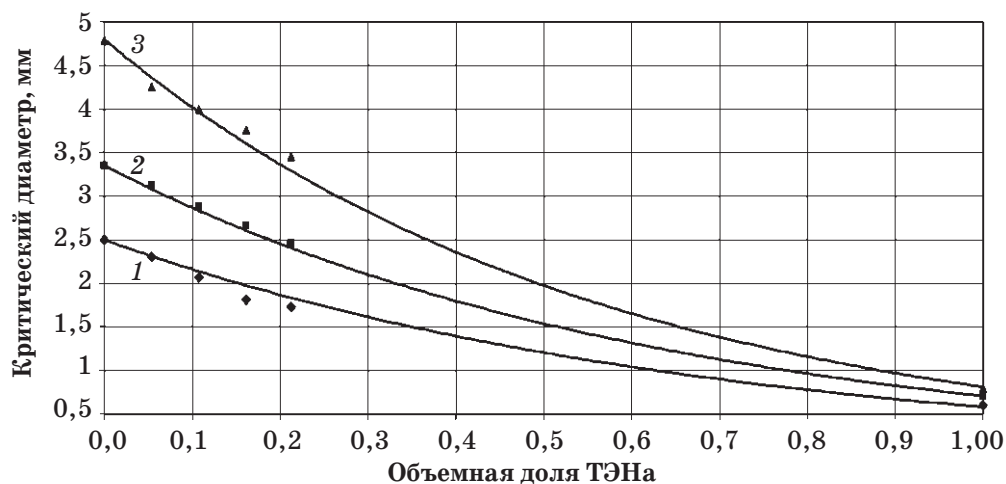


Рис. 2.35. Зависимость  $d_k$  ВК на основе смесей октогена ( $0,90 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с ТЭНом ( $0,72 \text{ м}^2/\text{г}$ ) от объемной доли ТЭНа в смесях:  
1 — ВК 80/20; 2 — ВК 75/25; 3 — ВК 70/30

Как видно на рисунке, проведенные дополнительные исследования в области малых концентраций ТЭНа подтвердили установленную зависимость для смесей *высокодисперсного* октогена с *высокодисперсным* ТЭНом и составов на основе этих смесей.

Полученные результаты далее были дополнены исследованием *высокодисперсных* смесей FOX-7 с ТЭНом (табл. 2.49, рис. 2.36) и FOX-7 с DNTF (табл. 2.50, рис. 2.37).

Т а б л и ц а 2.49

**Критические диаметры детонации чистых смесей FOX-7 ( $0,80 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с ТЭНом ( $0,77 \text{ м}^2/\text{г}$ ) и ВК: (смесь FOX-7 с ТЭНом) / СКТ (% мас.)**

Содержание ТЭНа в смеси ВВ, % мас.	Объемная доля ТЭНа в смеси ВВ	$d_k$ , мм чистая смесь ВВ	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 77,5/22,5	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 75/25	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 72,5/27,5	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 70/30
0	0	0,67	5,20	7,10	9,50	12,10
2	0,021	0,63	4,90	6,50	8,50	—
5	0,053	0,56	4,50	5,40	7,40	8,10
20	0,210	0,50	3,20	4,00	4,70	5,80
40	0,415	0,36	2,10	2,40	3,00	3,60
60	0,620	0,20	1,20	1,50	1,80	2,30
80	0,810	0,16	0,75	0,90	1,10	1,30
100	1	0,10	0,51	0,54	0,70	0,79

Таблица 2.50

Критические диаметры детонации чистых смесей FOX-7 ( $0,65 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с DNTF ( $0,59 \text{ м}^2/\text{г}$ ) и композиций: (смесь FOX-7 с DNTF) / СКТ (% мас.)

Содержание DNTF в смеси ВВ, % мас.	Объемная доля DNTF в смеси	$d_k$ , мм чистая смесь ВВ	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 80/20	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 77,5/22,5	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 75/25	$d_k$ , мм смесь ВВ/СКТ 72,5/27,5
0	0	0,95	4,70	5,50	6,40	8,50
5	0,05	0,87	3,90	4,50	5,30	6,40
20	0,20	0,70	2,80	3,10	3,70	4,50
40	0,40	0,45	1,80	2,00	2,30	2,80
60	0,60	0,24	1,30	1,50	1,80	2,30
80	0,80	0,19	1,05	1,15	1,45	1,75
100	1	0,13	0,74	0,88	1,00	1,30

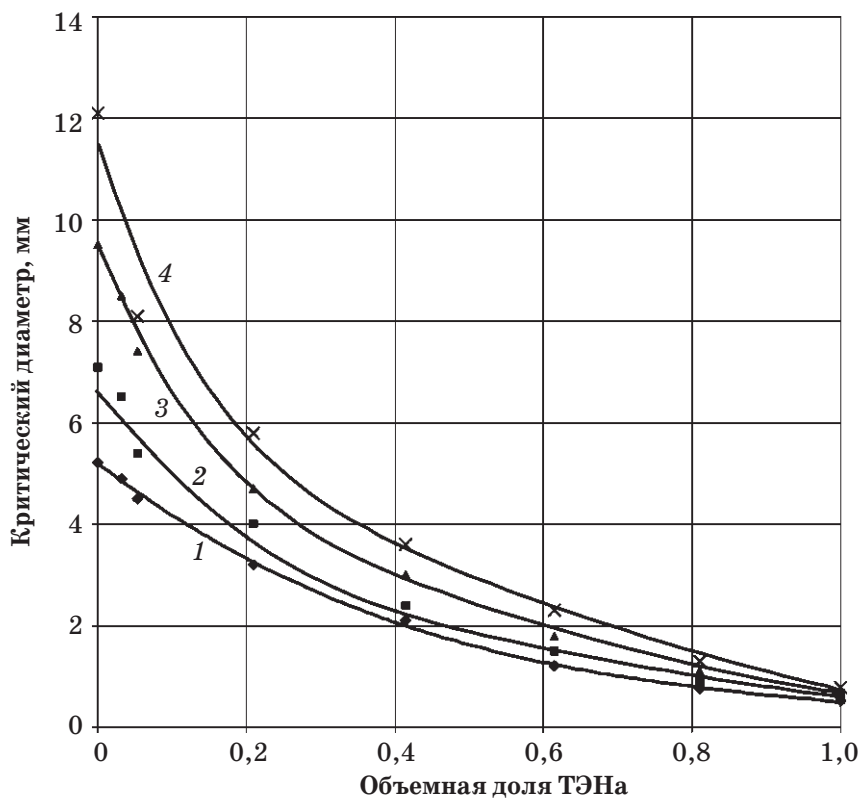


Рис. 2.36. Зависимость  $d_k$  ВК на основе смесей FOX-7 ( $0,80 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с ТЭНом ( $0,77 \text{ м}^2/\text{г}$ ) от объемной доли ТЭНа в смесях:  
1 — ВК 77,5/22,5; 2 — ВК 75/25; 3 — ВК 72,5/27,5; 4 — ВК 70/30

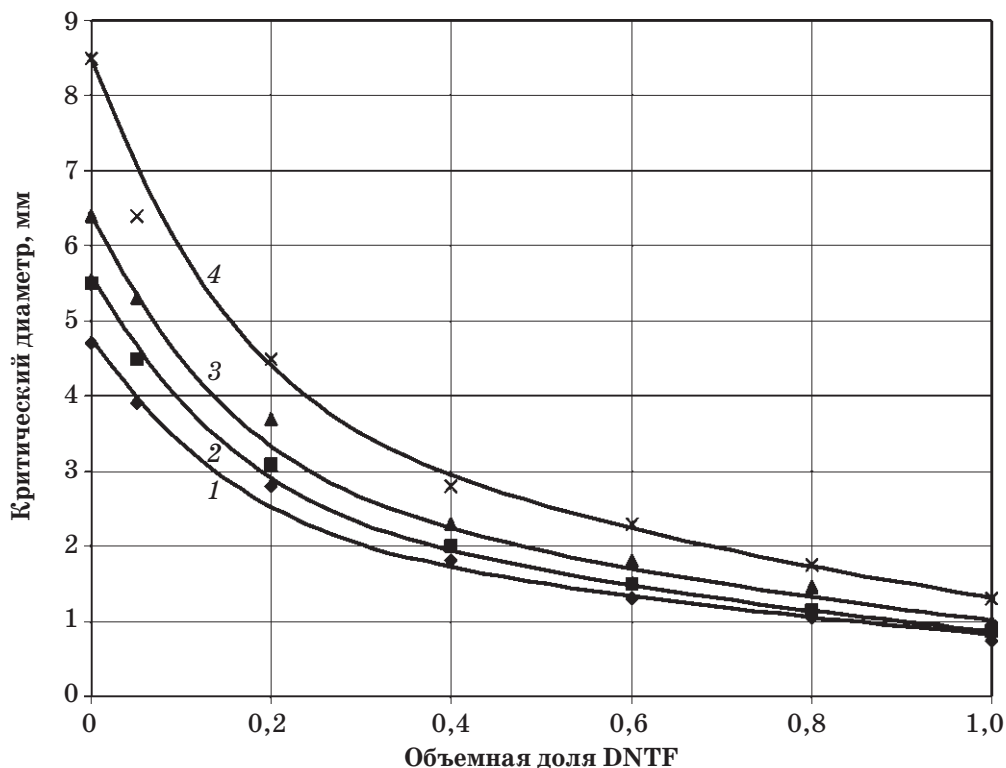


Рис. 2.37. Зависимость  $d_k$  ВК на основе смесей FOX-7 ( $0,65 \text{ м}^2/\text{г}$ ) с DNTF ( $0,59 \text{ м}^2/\text{г}$ ) от объемной доли DNTF в смесях:

1 — ВК 80/20; 2 — ВК 77,5/22,5; 3 — ВК 75/25; 4 — ВК 72,5/27,5

Как видно на рис. 2.36, 2.37 полученные зависимости для высокодисперсных смесей FOX-7/ТЭН и FOX-7/DNTF и составов на их основе имеют такой же вид, как и для высокодисперсной смеси октоген/ТЭН и ВК на основе этой смеси.

На рис. 2.38 представлены аналогичные зависимости для исследованных чистых высокодисперсных бинарных смесей ВВ. Как видно, изученные зависимости имеют одинаковый характер как для взрывчатых композиций, так и для чистых бинарных смесей ВВ.

В целом по результатам проведенных исследований можно сделать вывод, что для бинарных смесей, содержащих высокодисперсные (микронные) взрывчатые вещества, а также для ВК на их основе зависимость критических диаметров детонации от соотношения ВВ в смесях является неаддитивной и свидетельствует о преимущественном влиянии кинетики разложения компонента с большей детонационной способностью в зоне химической реакции детонационной волны.

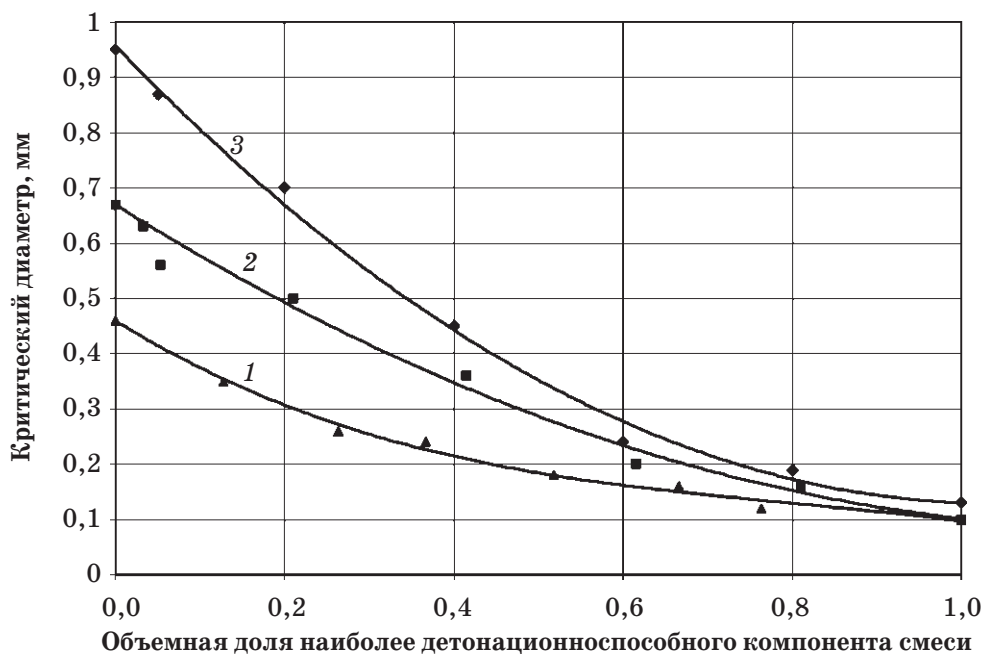


Рис. 2.38. Детонационная способность чистых высокодисперсных бинарных смесей:  
1 — октоген/ТЭН; 2 — FOX-7/ТЭН; 3 — FOX-7/DNTF

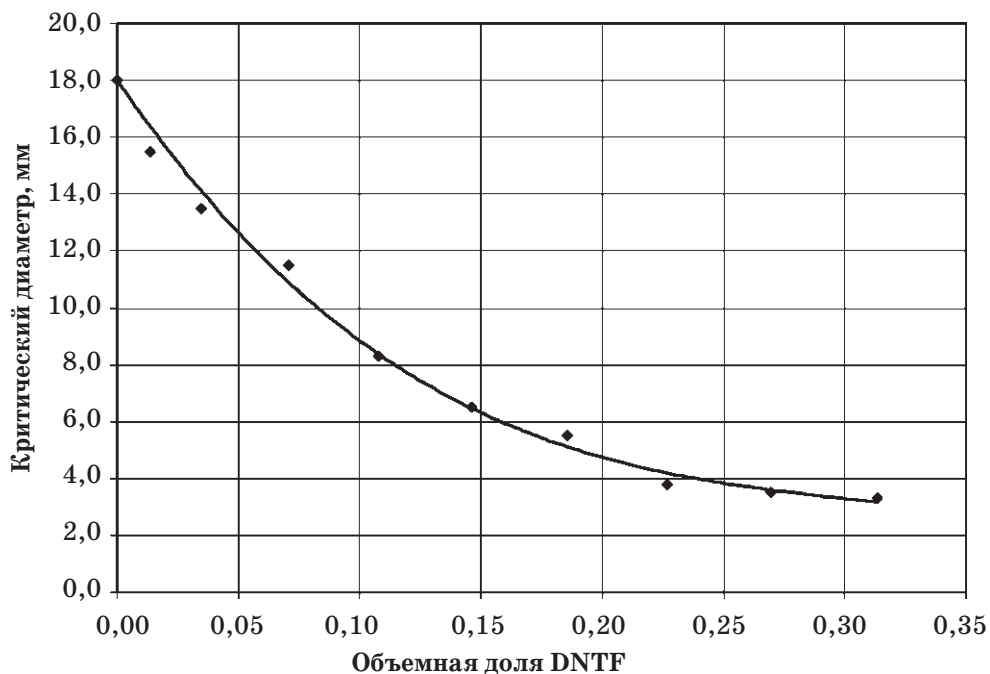


Рис. 2.39. Зависимость  $d_k$  растворов DNTF в нитрометане от объемной доли DNTF

Для сравнения на рис. 2.39 представлена полученная нами зависимость для гомогенной системы — растворов DNTF в нитрометане, имеющая такой же вид, что и для исследованных гетерогенных систем — бинарных смесей микронных ВВ. Однако при молекулярном смешении компонентов наблюдается более сильное снижение критического диаметра детонации системы с увеличением содержания ВВ с большей детонационной способностью.

Все полученные зависимости для бинарных микронных смесей ВВ и ВК на их основе с удовлетворительной точностью (средняя погрешность 10 %) описываются уравнениями

$$d_{\kappa c} = d_{\kappa 1} (1 - V_2^q) + d_{\kappa 2} V_2^q; \quad (2.93)$$

$$d_{\kappa 0}^{(c)} = d_{\kappa 0}^{(1)} (1 - V_2^q) + d_{\kappa 0}^{(2)} V_2^q, \quad (2.94)$$

где  $q$  — безразмерный коэффициент; остальные обозначения даны в формулах (2.91), (2.92).

Для определения значений показателя степени  $q$  уравнения (2.93), (2.94) были преобразованы в линейный вид:

$$\lg(d_{\kappa 1} - d_{\kappa c}) = \lg(d_{\kappa 1} - d_{\kappa 2}) + q \lg V_2;$$

$$\lg(d_{\kappa 0}^{(1)} - d_{\kappa 0}^{(c)}) = \lg(d_{\kappa 0}^{(1)} - d_{\kappa 0}^{(2)}) + q \lg V_2.$$

По полученным экспериментальным данным для всех бинарных смесей ВВ различного химического строения и ВК на их основе были построены графики, соответствующие этим линейным уравнениям. На рис. 2.40 в качестве примера приведены графики для смеси FOX-7/ТЭН и ВК с СКТ на основе этой смеси.

Для каждой пары различных ВВ и ВК на их основе построенные линии практически параллельны, что свидетельствует о близости значений коэффициента  $q$  для смесей ВВ и составов на основе конкретной пары ВВ. По полученным результатам значения коэффициента  $q$  составляют:

- для бинарных смесей октогена с ТЭНом и составов на основе этих смесей — 0,50;
- для бинарных смесей FOX-7 с ТЭНом и составов на основе этих смесей — 0,38;
- для бинарных смесей FOX-7 с DNTF и составов на основе этих смесей — 0,36.

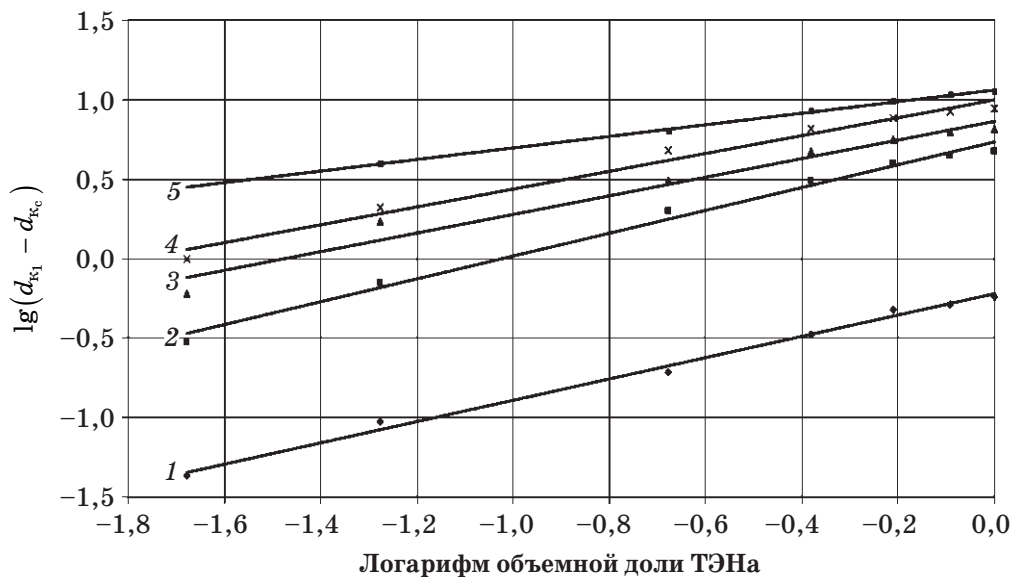


Рис. 2.40. Зависимость  $\lg(d_{k1} - d_{kc})$  от  $\lg V_2$ :

1 — чистые смеси FOX-7/ТЭН; 2 — ВК 77,5/22,5; 3 — ВК 75/25; 4 — ВК 72,5/27,5; 5 — ВК 70/30

Указанные значения коэффициента  $q$  для различных пар ВВ должны определяться соотношением критических диаметров детонации индивидуальных ВВ в этих парах. На рис. 2.41 представлена зависимость величины  $q$  от соотношения  $d_{k0}^{(1)}/d_{k0}^{(2)}$ .

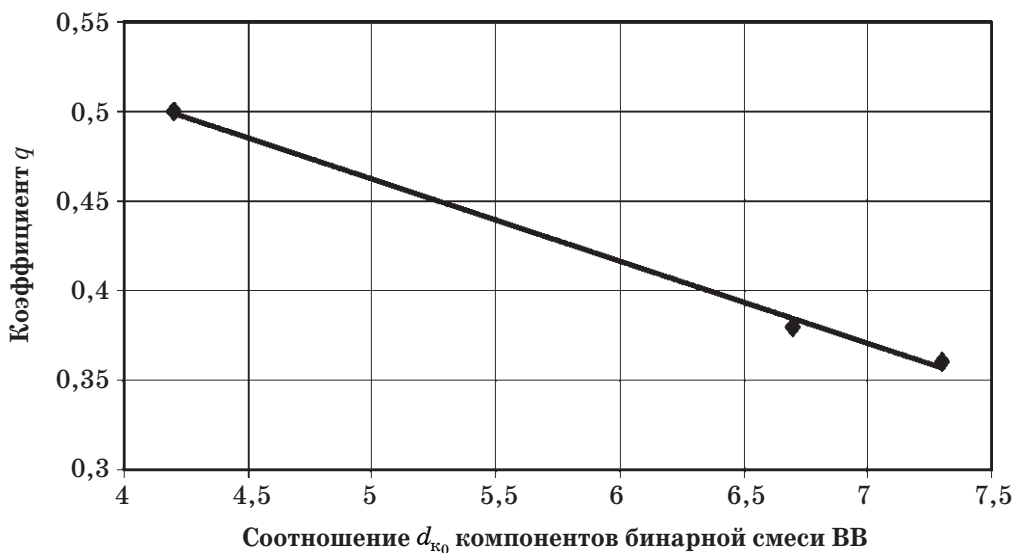


Рис. 2.41. Зависимость коэффициента  $q$  от соотношения  $d_{k0}^{(1)}/d_{k0}^{(2)}$

Полученная зависимость аппроксимируется уравнением

$$q = 0,69 - 0,046 \frac{d_{\kappa_0}^{(1)}}{d_{\kappa_0}^{(2)}}. \quad (2.95)$$

Формулы (2.93)–(2.95) хорошо описывают эксперимент при соотношении  $d_{\kappa_0}^{(1)}/d_{\kappa_0}^{(2)}$  от 3,0 до 8,0.

Практическое значение полученных результатов (раздел 2.3) состоит в возможности тонкого регулирования критических диаметров детонации взрывчатых композиций, используемых, например, в системах разделения космических аппаратов, путем целенаправленной научно обоснованной компоновки ВК. Результаты исследований открывают новые пути создания перспективных высокоэнергетических материалов для современной аэрокосмической техники.

### 2.3.6. МЕТОД РАСЧЕТА КРИТИЧЕСКИХ ДИАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТА

На основе результатов выполненных исследований разработан метод расчета критических диаметров детонации взрывчатых материалов, включая эластичные ВВ. Ниже приведена система уравнений, последовательно используемых в расчете.

а) Критический диаметр детонации взрывчатых композиций (ВК) с инертными компонентами ( $d_{\kappa}$ , мм) рассчитывается при максимальной плотности заряда ( $\rho_{\max}$ , г/см<sup>3</sup>) по формуле

$$d_{\kappa} = \frac{d_{\kappa_0}}{V_{\text{ВВ}}^n},$$

где  $d_{\kappa_0}$  — критический диаметр чистого (индивидуального) ВВ при реальной дисперсности и дефектности кристаллов и малой пористости ВВ, равной 0,1–2 %, мм;  $V_{\text{ВВ}}$  — объемная доля ВВ в композиции;  $n$  — параметр, определяемый дисперсностью ВВ и физическими свойствами добавок.

б) Критический диаметр детонации индивидуального ВВ ( $d_{\kappa_0}$ ) определяется с учетом адсорбционной удельной поверхности ВВ ( $S_{\text{ад}}$ , м<sup>2</sup>/г) по формуле

$$\frac{1}{d_{\kappa_0}} = \frac{1}{d_{\text{МК}}} + 0,91S_{\text{ад}},$$

где  $d_{\text{МК}}$  — критический диаметр детонации монокристалла ВВ, мм.

в) При отсутствии значения  $S_{\text{ад}}$  критический диаметр детонации ВВ  $d_{\kappa_0}$  может быть рассчитан приближенно, без учета дефектности

кристаллов, с использованием удельной поверхности, определяемой по газопроницаемости ВВ ( $S_g$ , м<sup>2</sup>/г), например на приборе ПСХ-12, по формуле

$$d_{\kappa_0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b},$$

где  $a$  — критический диаметр детонации ВВ при  $S_g = 1,0$  м<sup>2</sup>/г, мм;  $S_1$  — удельная поверхность ВВ, равная 1,0 м<sup>2</sup>/г (10 000 см<sup>2</sup>/г);  $b$  — коэффициент: для бензотрифуроксана  $a = 0,06$  мм,  $b = 1,23$ ; ТЭНа  $a = 0,08$  мм,  $b = 0,93$ ; гексогена  $a = 0,26$  мм,  $b = 0,78$ ; октогена  $a = 0,38$  мм,  $b = 0,64$ ; тетрила  $a = 0,79$  мм,  $b = 0,44$ ; CL-20  $a = 0,43$  мм,  $b = 0,51$ ; DNTF  $a = 0,07$  мм,  $b = 0,66$ ; НТФ  $a = 0,15$  мм,  $b = 0,83$ ; FOX-7  $a = 0,55$  мм,  $b = 0,60$ .

Полученные выражения действительны для  $S_g$  в интервале от 0,01 до 1,0 м<sup>2</sup>/г.

г) Для органических инертных компонентов (добавок, связующих) определяющей характеристикой является их акустическая жесткость, связанная с ударной сжимаемостью. Параметр  $n$  для ВК с этими добавками рассчитывается по формулам

$$n = 2,95 + 1,2 \lg S_{\text{ад}} - 0,3 \rho_{\text{д}} C_0, \text{ либо } n = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3 \rho_{\text{д}} C_0,$$

где  $C_0$ ,  $\rho_{\text{д}}$  — объемная скорость звука в органической добавке, км/с и ее плотность, г/см<sup>3</sup>.

д) Для неорганических добавок определяющими характеристиками являются плотность и дисперсность, что связано с характером ускорения частиц продуктами взрыва и изменением скоростей волн разрежения при расширении продуктов. При этом параметр  $n$  сложных взрывчатых композиций, содержащих как органические, так и неорганические добавки, рассчитывается по формулам

$$n = A(n_{\text{орг}}) + B(n_{\text{неорг}});$$

$$n_{\text{орг}} = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3 \rho_{\text{од}} C_0;$$

$$n_{\text{неорг}} = g + 0,114 \rho_{\text{нд}} + 0,897 \lg r;$$

$$A = \frac{\beta}{\beta + \gamma}; \quad B = \frac{\gamma}{\beta + \gamma},$$

где  $\rho_{\text{од}}$  — плотность органической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{\text{нд}}$  — плотность неорганической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $r$  — средний размер частиц неорганической



добавки, мм;  $\beta$ ,  $\gamma$  — массовые доли органической и неорганической добавки в ВК, соответственно;  $g$  — коэффициент: для металлов и оксидов  $g = 3,46$ , для солей  $g = 3,32$ .

е) Для высокодисперсных тяжелых неорганических добавок с  $r$  менее 5 мкм и  $\rho_{\text{нд}}$  более 4 г/см<sup>3</sup> при их содержании до 20 % мас. (при этом проявляется эффект сенсibilизации ВК):

$$g = \frac{4,51\gamma - m}{0,004 + \gamma},$$

где  $m$  — коэффициент: для металлов, оксидов  $m = 0,196$ , для солей  $m = 0,225$ .

ж) Критический диаметр детонации взрывчатой композиции, рассчитанный при ее максимальной плотности  $d_{k(\rho_{\text{max}})}$ , приводится к реальной плотности заряда  $d_k(\rho_0)$  по формуле:

$$d_{k(\rho_0)} = d_{k(\rho_{\text{max}})} \cdot 10^{1,14 \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\text{max}}} \right)}.$$

Для пористого заряда индивидуального ВВ в данной формуле вместо  $d_{k(\rho_{\text{max}})}$  следует подставить  $d_{k_0}$ , рассчитанный по пункту б) или в).

Разработанный метод расчета дает среднюю относительную погрешность для критических диаметров детонации композиций с органическими добавками 7–10 %, для сложных систем, включающих органические и неорганические добавки — 15–20 %. При этом суммарное содержание добавок — до 50 % мас., дисперсность неорганических добавок — от 1 до 500 мкм.

### Примеры расчета

**Пример 1.** Рассчитать критический диаметр детонации взрывчатой композиции, содержащей 80,8 об. % октогена со средним размером зерна 100 мкм ( $S_g \approx 0,10$  м<sup>2</sup>/г) и 19,2 об. % парафина, при пористости ВК 36 %.

Критический диаметр беспористой гетерогенной ВК с инертной добавкой (при  $\rho_{\text{max}}$ ):

$$d_k = \frac{d_{k_0}}{V_{\text{ВВ}}^n}.$$

Критический диаметр чистого октогена с удельной поверхностью  $S_g = 0,10$  м<sup>2</sup>/г

$$d_{k_0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b}; \quad d_{k_0} = 0,38 \cdot 0,10^{-0,64} = 1,66 \text{ мм}.$$

Параметр  $n$  для ВК октоген/парафин:

$$n = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3 \rho_d C_0;$$

$$n = 4,14 + 1,39 \lg 0,1 - 0,3 \cdot 0,90 \cdot 2,1 = 2,18$$

(для парафина  $\rho_d = 0,90$  г/см<sup>3</sup>;  $C_0 = 2,1$  км/с);

$$d_k = \frac{1,66}{0,808^{2,18}} = 2,64 \text{ мм.}$$

Критический диаметр пористого заряда ВК (при  $\rho_0$ ):

$$d_{k(\rho_0)} = d_{k(\rho_{\max})} \cdot 10^{1,14 \left( 1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\max}} \right)};$$

$$d_{k(\rho_0)} = 2,64 \cdot 10^{1,14 \cdot 0,36} = 6,8 \text{ мм.}$$

Экспериментальное значение 7 мм [212].

**Пример 2.** Рассчитать критические диаметры детонации взрывчатых композиций: CL-20 ( $S_g = 0,04$  м<sup>2</sup>/г)/полисилоксан (СКТ) 75/25 % мас. и DNTF ( $S_g = 0,40$  м<sup>2</sup>/г)/СКТ 75/25 % мас. при малой пористости заряда (0,1–2 %).

Критический диаметр детонации беспористой ВК с инертной добавкой (при  $\rho_{\max}$ ):

$$d_k = \frac{d_{k_0}}{V_{\text{вв}}^n}.$$

Критический диаметр чистого CL-20 с удельной поверхностью  $S_g = 0,04$  м<sup>2</sup>/г

$$d_{k_0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b}; \quad d_{k_0} = 0,43 \cdot 0,04^{-0,51} = 2,22 \text{ мм.}$$

Критический диаметр чистого DNTF с удельной поверхностью  $S_g = 0,40$  м<sup>2</sup>/г:

$$d_{k_0} = 0,07 \cdot 0,40^{-0,66} = 0,13 \text{ мм.}$$

Максимальная плотность ВК CL-20/СКТ 75/25 % мас.: 1,608 г/см<sup>3</sup>.

Максимальная плотность ВК DNTF/СКТ 75/25 % мас.: 1,540 г/см<sup>3</sup>.

Объемная доля CL-20:  $V_{\text{вв}} = 0,75 \cdot 1,608 / 2,044 = 0,59$ .

Объемная доля DNTF:  $V_{\text{вв}} = 0,75 \cdot 1,54 / 1,90 = 0,61$ .

Параметр  $n$  для ВК CL-20/СКТ:

$$n = 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3 \rho_d C_0;$$

$$n = 4,14 + 1,39 \lg 0,04 - 0,3 \cdot 0,98 \cdot 1,01 = 1,90$$

(для СКТ  $\rho_d = 0,98$  г/см<sup>3</sup>;  $C_0 = 1,01$  км/с).

Параметр  $n$  для ВК DNTF/СКТ:

$$n = 4,14 + 1,39 \lg 0,40 - 0,3 \cdot 0,98 \cdot 1,01 = 3,29.$$

Критический диаметр детонации ВК CL-20/СКТ:

$$d_k = \frac{2,22}{0,59^{1,90}} = 6,0 \text{ мм.}$$

Экспериментальное значение 5,8 мм.

Критический диаметр детонации ВК DNTF/СКТ:

$$d_k = \frac{0,13}{0,61^{3,29}} = 0,7 \text{ мм.}$$

Экспериментальное значение 0,8 мм.

**Пример 3.** Рассчитать критический диаметр детонации взрывчатой композиции, содержащей 70,0 % мас. ТЭНа ( $S_g = 0,44$  м<sup>2</sup>/г), 30 % мас. полисилоксана (СКТ) и 15,0 % мас. (сверх 100 %) NaCl (220 мкм) при малой пористости заряда (0,1–2 %).

Компоненты: ТЭН ( $S_g = 0,44$  м<sup>2</sup>/г,  $\rho_{\text{МК}} = 1,77$  г/см<sup>3</sup>), СКТ ( $\rho_{\text{од}} = 0,98$  г/см<sup>3</sup>,  $C_0 = 1,01$  км/с), NaCl ( $\rho_{\text{нд}} = 2,16$  г/см<sup>3</sup>,  $r = 0,22$  мм).

Состав (в пересчете на 100 %): 60,9 % мас. ТЭНа, 26,1 % мас. СКТ, 13,0 % мас. NaCl.

Максимальная плотность состава: 1,49 г/см<sup>3</sup>.

Критический диаметр малопористого (0,1–2 %) ВК с инертными добавками (при плотности близкой к  $\rho_{\text{max}}$ ):

$$d_k = \frac{d_{k0}}{V_{\text{ВВ}}^n}.$$

Критический диаметр чистого ТЭНа с удельной поверхностью  $S_g = 0,44$  м<sup>2</sup>/г:

$$d_{\kappa_0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b}; \quad d_{\kappa_0} = 0,08 \cdot 0,44^{-0,93} = 0,17 \text{ мм.}$$

Объемная доля ТЭНа:  $V_{\text{вв}} = 0,609 \cdot 1,49 / 1,77 = 0,513$ .

Расчет параметра  $n$  проводим по формулам

$$\begin{aligned} n &= A(n_{\text{орг}}) + B(n_{\text{неорг}}); \\ n_{\text{орг}} &= 4,14 + 1,39 \lg S_g - 0,3\rho_{\text{од}}C_0; \\ n_{\text{неорг}} &= g + 0,114\rho_{\text{нд}} + 0,897 \lg r; \\ A &= \frac{\beta}{\beta + \gamma}; \quad B = \frac{\gamma}{\beta + \gamma}, \end{aligned}$$

где  $\rho_{\text{од}}$  — плотность органической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $\rho_{\text{нд}}$  — плотность неорганической добавки, г/см<sup>3</sup>;  $r$  — средний размер частиц неорганической добавки, мм;  $\beta, \gamma$  — массовые доли органической и неорганической добавки в ВК соответственно;  $g$  — коэффициент (для солей  $g = 3,32$ ):

$$\begin{aligned} n_{\text{орг}} &= 4,14 + 1,39 \lg 0,44 - 0,3 \cdot 0,98 \cdot 1,01 = 3,35; \\ n_{\text{неорг}} &= 3,32 + 0,114 \cdot 2,16 + 0,897 \lg 0,22 = 2,98; \\ A &= \frac{0,261}{0,261 + 0,13} = 0,67; \quad B = \frac{0,13}{0,261 + 0,13} = 0,33; \\ n &= 0,67 \cdot 3,35 + 0,33 \cdot 2,98 = 3,23; \\ d_{\kappa} &= \frac{d_{\kappa_0}}{V_{\text{вв}}^n} = \frac{0,17}{0,513^{3,23}} = 1,5 \text{ мм.} \end{aligned}$$

Экспериментальное значение 1,4 мм.

### 2.3.7. ОПЫТНЫЕ И РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ КРИТИЧЕСКИХ ДИАМЕТРОВ ДЕТОНАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ВВ И КОМПОЗИЦИЙ

В результате проведенных исследований изучена детонационная способность ряда кристаллических энергетических веществ различной дисперсности. Установлен единый вид зависимости критических диаметров детонации ВВ от их удельной поверхности и определены коэффициенты этой зависимости для исследованных ВВ. Найдены экспериментально-расчетные величины критических диаметров детонации мелкокристаллических (микронных) ВВ различного химического строения (ТЭН,

гексоген, октоген, тетрил, БТФ, CL-20, DNTF, НТФ, FOX-7). Экспериментально доказано, что исследованные микронные ВВ имеют критический диаметр детонации менее 1 мм и могут найти практическое применение в системах инициирования, детонационных разводках, устройствах взрывной логики, в детонирующих шнурах, удлинённых кумулятивных зарядах, а также в системах разделения космических аппаратов.

В данном разделе приведены опытные величины критических диаметров детонации различных ВВ и композиций.

### CL-20

Исследовалась зависимость  $d_{к0}$  CL-20 от его удельной поверхности  $S_g$  в интервале 400–8000 см<sup>2</sup>/г. Содержание CL-20 в смесях с СКТ варьировалось от 65 до 80 % мас. В табл. 2.51 приведены полученные экспериментальные значения  $d_k$  исследуемых смесей. На рис. 2.42 приведены линейные концентрационные зависимости  $d_k$  в логарифмических координатах для указанных смесей.

Т а б л и ц а 2.51

Критические диаметры детонации смесей CL-20 с СКТ

Удельная поверхность ВВ ( $S_g$ ), см <sup>2</sup> /г	Критический диаметр детонации смеси, мм			
	Содержание ВВ, % мас.			
	65	70	75	80
400	8,50	7,00	5,80	4,40
1000	7,70	5,85	4,95	3,80
1550	5,25	4,55	3,80	2,70
8000	3,60	2,70	1,95	—

Критические диаметры детонации чистого CL-20 ( $d_{к0}$ ) рассчитывали из экспериментальных данных для смесей по уравнению  $d_k = \frac{d_{к0}}{V_{ВВ}^n}$  (2.75).

Полученные результаты приведены в табл. 2.52.

Т а б л и ц а 2.52

Критические диаметры детонации чистого CL-20

$S_g$ , см <sup>2</sup> /г	$d_{к0}$ , мм	$S_g$ , см <sup>2</sup> /г	$d_{к0}$ , мм
400	2,10	1550	1,20
1000	1,60	8000	0,45

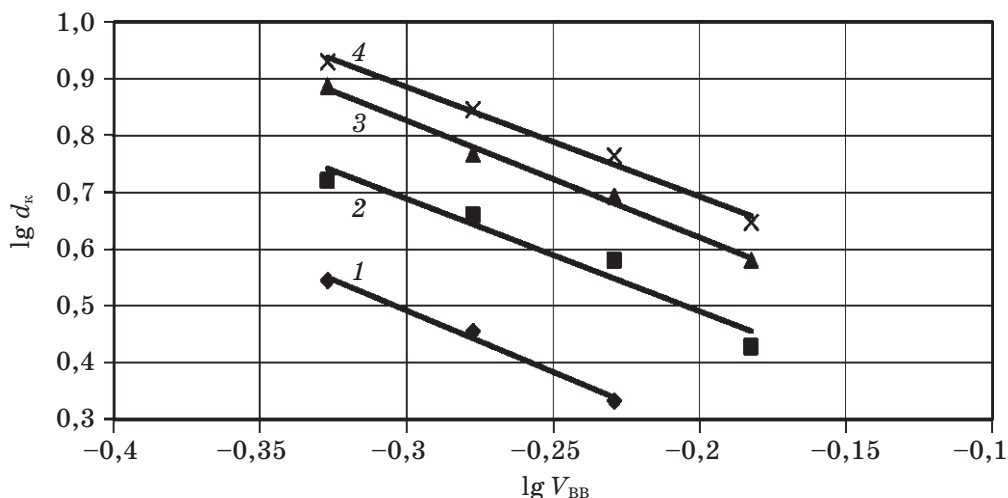


Рис. 2.42. Зависимость  $d_k$  смесей CL-20 с СКТ от содержания ВВ с различной  $S_g$  (см<sup>2</sup>/г):  
1 — 8000; 2 — 1550; 3 — 1000; 4 — 400

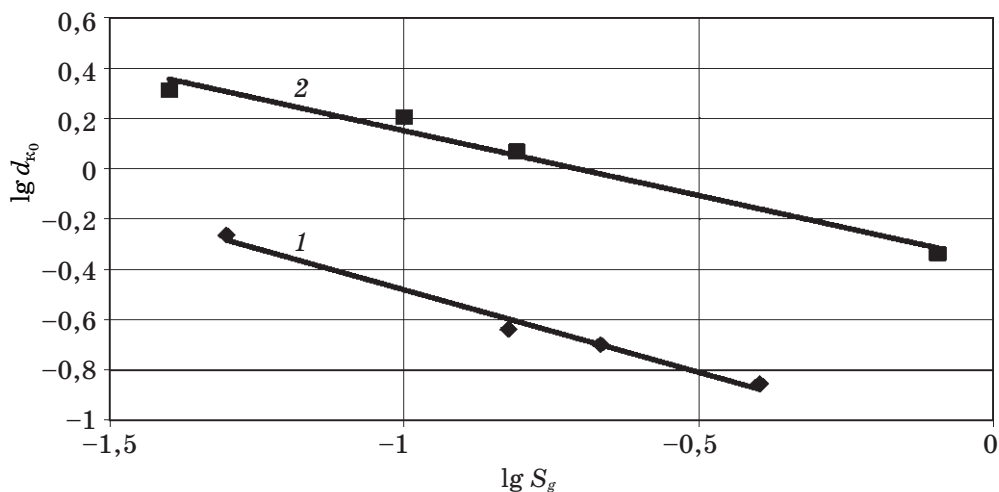


Рис. 2.43. Зависимость  $d_{k0}$  DNTF и CL-20 от  $S_g$ :  
1 — DNTF; 2 — CL-20

Зависимость  $d_{k0}$  CL-20 от  $S_g$  в логарифмических координатах представлена на рис. 2.43. Для сравнения там же показана зависимость для DNTF.

Для CL-20 определены коэффициенты уравнения  $d_{k0} = a \left( \frac{S_g}{S_1} \right)^{-b}$  (2.76):

$a = 0,43$  мм,  $b = 0,51$ . Из штатных ВВ наиболее близкие к ним значения коэффициентов получены для октогена.

**DNTF**  
(динитродифуразанилфуроксан)

Аналогично изучалась зависимость  $d_{к0}$  DNTF от его дисперсности. В табл. 2.53 приведены измеренные значения  $d_{к}$  исследуемых смесей DNTF с СКТ.

Т а б л и ц а 2.53

Критические диаметры детонации смесей DNTF с СКТ

Удельная поверхность ВВ ( $S_g$ ), см <sup>2</sup> /г	Критический диаметр детонации смеси, мм			
	Содержание ВВ, % мас.			
	65	70	75	80
500	3,50	2,40	1,85	1,55
1500	1,80	1,65	1,00	0,70
2150	1,60	1,30	0,95	—
4000	1,50	0,95	0,75	—

На рис. 2.44 приведены полученные линейные концентрационные зависимости в логарифмических координатах, которые также соответствуют уравнению (2.75).

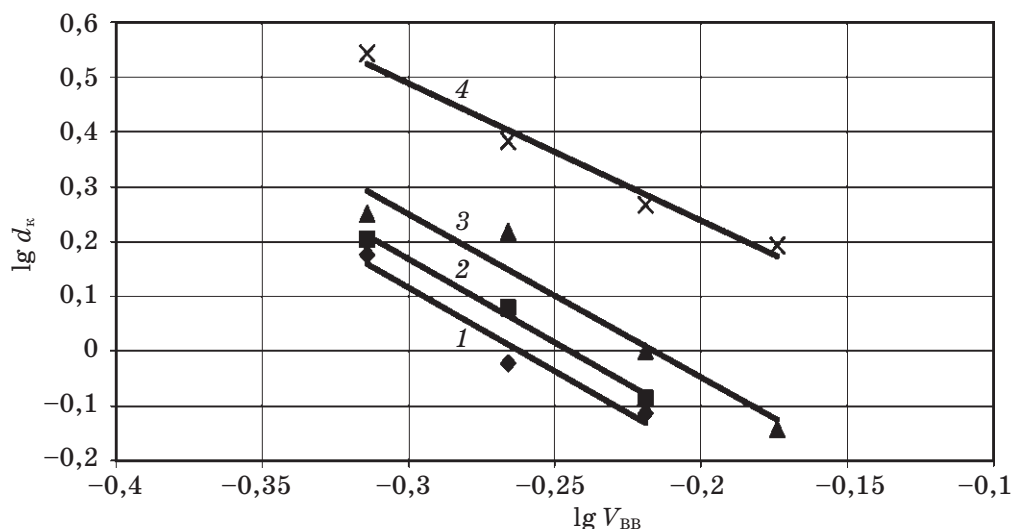


Рис. 2.44. Зависимость  $d_{к}$  смесей DNTF с СКТ от содержания ВВ с различной  $S_g$  (см<sup>2</sup>/г):  
1 — 4000; 2 — 2150; 3 — 1500; 4 — 500

Полученные результаты ( $d_{к0}$ ) для чистого DNTF приведены в таблице 2.54.

Т а б л и ц а 2.54

**Критические диаметры детонации чистого DNTF**

$S_g, \text{см}^2/\text{г}$	$d_{к0}, \text{мм}$
500	0,55
1500	0,25
2150	0,20
4000	0,15

Зависимость  $d_{к0}$  чистого DNTF от  $S_g$  представлена на рис. 2.43.

Для DNTF также были определены коэффициенты уравнения (2.76):  $a = 0,07 \text{ мм}$ ,  $b = 0,66$ . Из штатных ВВ наиболее близкие к ним значения коэффициентов получены для ТЭНа. Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что наиболее высокой детонационной способностью из изученных ВВ обладают высокодисперсные DNTF и ТЭН.

**ТЭН**

В табл. 2.55 приведены опытные критические диаметры детонации смесей высокодисперсного ТЭНа с СКТ.

Т а б л и ц а 2.55

**Критические диаметры детонации смесей ТЭНа с СКТ**

Удельная поверхность ВВ ( $S_g$ ), $\text{см}^2/\text{г}$	Критический диаметр детонации смеси, мм			
	Содержание ВВ в смеси, % мас.			
	70	75	80	85
4700	1,60	0,95	0,54	0,46
7700	0,79	0,54	0,46	0,38

На рис. 2.45 приведена концентрационная зависимость  $d_{к}$  ВК на основе высокодисперсного ТЭНа с удельной поверхностью  $S_g = 7700 \text{ см}^2/\text{г}$  и СКТ (от 70 до 85 % мас. ТЭНа).

Из рис. 2.45 определен критический диаметр ( $d_{к0}$ ) ТЭНа с  $S_g = 7700 \text{ см}^2/\text{г}$  (средний размер частиц 3 мкм), равный 0,10 мм.

В табл. 2.56 приведены критические диаметры детонации чистого монодисперсного и полидисперсного ТЭНа.

По результатам исследований зависимости  $d_{к0}$  от  $S_g$  для ТЭНа были определены значения коэффициентов  $a = 0,08 \text{ мм}$ ,  $b = 0,93$  уравнения (2.75).



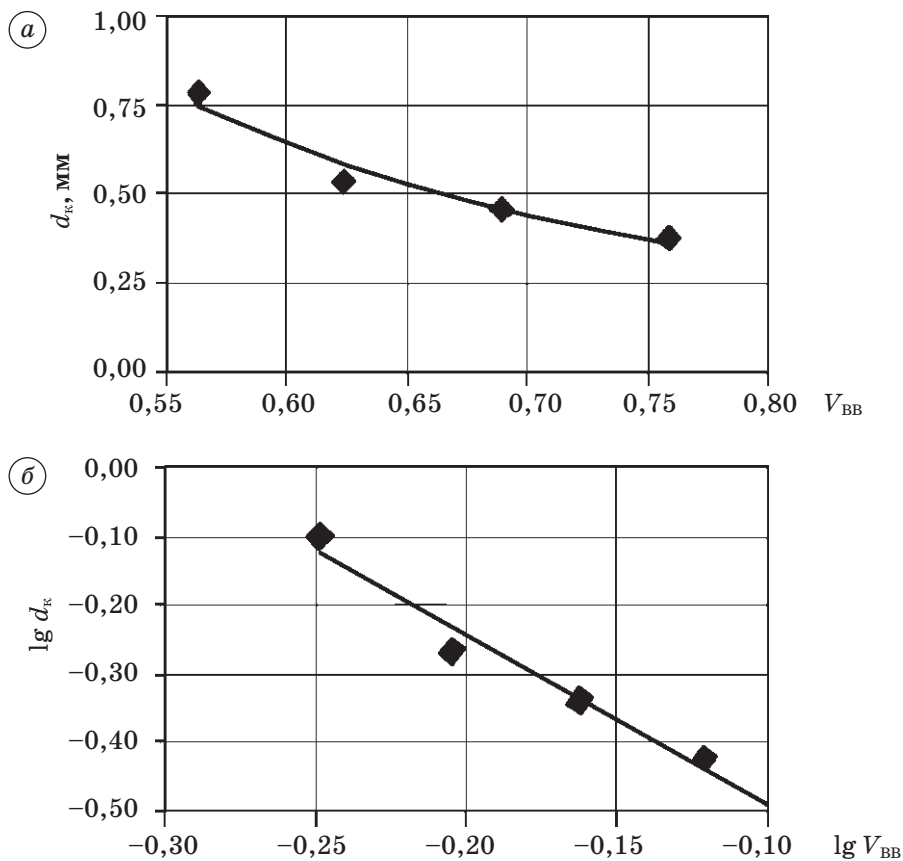


Рис. 2.45. Зависимость критических диаметров детонации ВК от объемной доли ВВ (а); логарифмическая форма этой зависимости (б)

Т а б л и ц а 2.56

**Критические диаметры детонации чистого ТЭНа**

$S_g, \text{см}^2/\text{г}$	$d_{k0}, \text{мм}$
<b>Монодисперсный ТЭН (фракции):</b>	
140 (500–600 мкм)	3,38
170 (400–500 мкм)	3,18
340 (200–250 мкм)	2,29
430 (90–160 мкм)	1,73
980 (0–90 мкм)	0,86
<b>Полидисперсный ТЭН:</b>	
4700	0,12
7700	0,10
10000	0,09

### Октоген

В табл. 2.57 приведены экспериментальные критические диаметры детонации смесей октогена с СКТ.

Таблица 2.57

#### Критические диаметры детонации смесей октогена с СКТ

Удельная поверхность ВВ ( $S_g$ ), см <sup>2</sup> /г	Критический диаметр детонации смеси, мм			
	Содержание ВВ в смеси, % мас.			
	70	75	80	85
400	7,25	6,30	5,47	4,53
800	7,90	6,56	4,72	3,50
1900	5,60	3,92	2,67	1,90
8900	4,90	3,35	2,42	1,60
14000	4,72	3,33	2,35	1,68

В табл. 2.58 приведены критические диаметры детонации чистого октогена различной дисперсности.

Получена обобщенная зависимость  $d_{к0}$  индивидуального (чистого) октогена (монодисперсного и полидисперсного) от его удельной поверхности ( $S_g$ ), представленная на рис. 2.46.

Таблица 2.58

#### Критические диаметры детонации чистого октогена различной дисперсности

$S_g$ , см <sup>2</sup> /г	$d_{к0}$ , мм
Полидисперсный октоген:	
400	2,97
800	1,64
1900	0,70
3000	0,60
4300	0,65
8900	0,55
Монодисперсный октоген (фракции):	
1580 (0–90 мкм)	1,50
1010 (90–160 мкм)	2,10
450 (200–250 мкм)	3,10
200 (400–500 мкм)	4,80

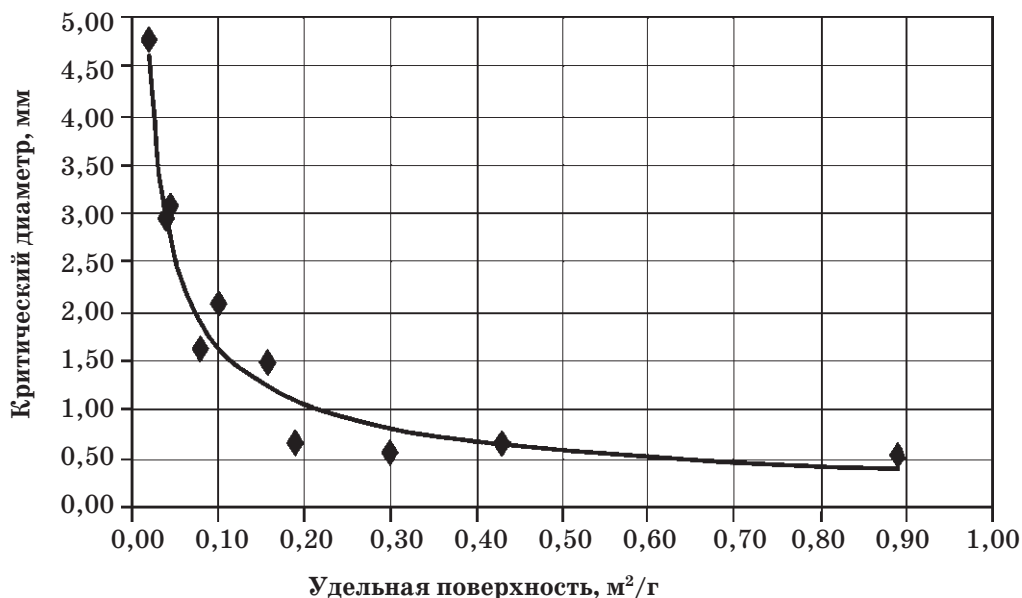


Рис. 2.46. Обобщенная зависимость критических диаметров детонации чистого октогена от его удельной поверхности ( $S_g$ )

На рис. 2.47 представлена эта зависимость в логарифмической форме (среднеквадратическое отклонение  $S = 0,11$ ; коэффициент корреляции  $r = 0,97$ ). Как видно из этого графика, полученная зависимость соответствует уравнению (2.76).

Анализ полученных результатов позволил определить значения коэффициентов уравнения (2.76) для октогена:  $a = 0,38$  мм,  $b = 0,64$ .

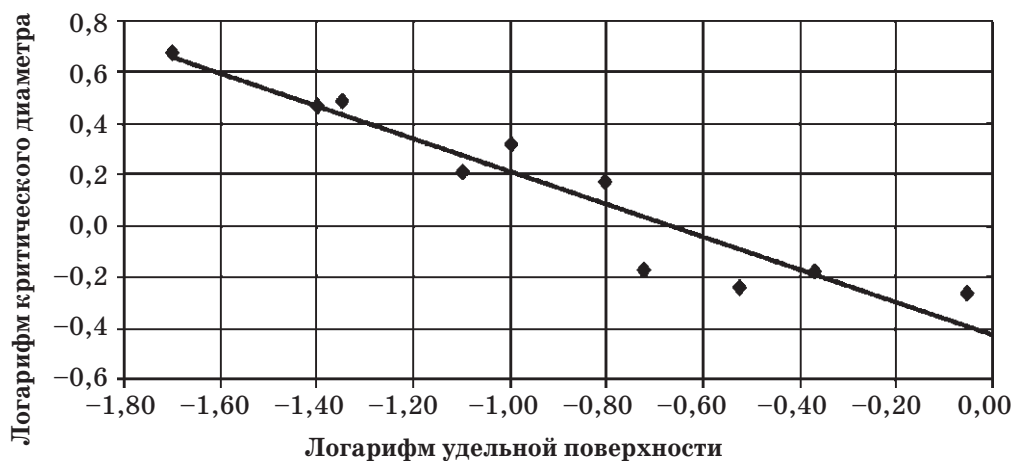


Рис. 2.47. Обобщенная зависимость критических диаметров детонации чистого октогена от его удельной поверхности (логарифмическая форма)

### Гексоген и тетрил

В табл. 2.59 приведены экспериментальные критические диаметры детонации смесей гексогена и тетрила с СКТ.

Таблица 2.59

#### Критические диаметры детонации смесей гексогена и тетрила с СКТ

ВВ	Удельная поверхность ВВ ( $S_g$ ), $\text{см}^2/\text{г}$	Критический диаметр детонации смеси, мм					
		Содержание ВВ в смеси, % мас.					
		60	70	75	80	85	90
Гексоген	280	—	—	7,5	6,5	—	—
	370	13,0	—	7,5	6,5	—	—
	600	12,0	8,0	6,5	5,0	—	—
	1310	11,5	—	—	—	3,0	—
	9000	—	1,8	1,5	—	—	—
Тетрил	390	—	—	—	8,0	6,5	5,5
	840	—	—	—	—	5,5	4,5

В табл. 2.60 приведены критические диаметры детонации чистых гексогена и тетрила.

Таблица 2.60

#### Критические диаметры детонации чистых гексогена и тетрила

$S_g$ , $\text{см}^2/\text{г}$	$d_{к0}$ , мм
Монодисперсный гексоген (фракции):	
280 (250–350 мкм)	3,78
370 (200–250 мкм)	3,31
600 (90–160 мкм)	2,37
1310 (0–60 мкм)	1,67
9000 (3–5 мкм)	0,27
Монодисперсный тетрил (фракции):	
200 (400–500 мкм)	5,79
390 (200–315 мкм)	3,95
840 (90–160 мкм)	3,04

Анализ полученных результатов позволил определить значения коэффициентов уравнения (2.76) для гексогена:  $a = 0,26$  мм,  $b = 0,78$  и тетрила:  $a = 0,79$  мм,  $b = 0,44$ .

**FOX-7**

В табл. 2.61 приведены опытные критические диаметры детонации смесей FOX-7 с СКТ.

Т а б л и ц а 2.61

**Критические диаметры детонации смесей FOX-7 с СКТ**

$S_g$ FOX-7, см <sup>2</sup> /г	Критические диаметры детонации смесей FOX-7 с СКТ, мм								
	Соотношение компонентов в смесях: FOX-7/СКТ, % мас.								
	85/15	82/18	80/20	78/22	77,5/22,5	76/24	75/25	73/27	70/30
650	9,60	—	16,00	18,50	—	21,20	—	—	—
1500	—	7,70	8,70	—	11,20	—	13,00	—	19,30
2900	3,50	4,60	5,55	—	7,00	—	9,10	—	—
8000	—	4,15	4,95	—	5,80	—	8,70	9,70	—

Расчетно-экспериментальные значения критических диаметров детонации высокоплотных зарядов индивидуального FOX-7 приведены в табл. 2.62. Там же для сравнения при тех же условиях приведены данные для октогена и ТЭНа.

Т а б л и ц а 2.62

**Критические диаметры детонации индивидуальных FOX-7, октогена и ТЭНа при их высокой относительной плотности (0,98–0,995)**

$S_{g,}$ см <sup>2</sup> /г	Критические диаметры детонации $d_{к0}$ , мм		
	FOX-7	Октоген	ТЭН
650	2,85	2,15	1,00
1500	1,90	1,25	0,50
2900	1,00	0,75	0,25
8000	0,75	0,45	0,10

Зависимость критического диаметра детонации FOX-7 ( $d_{к0}$ ) от его удельной поверхности показана на рис. 2.48.

Анализ результатов исследований показывает, что при увеличении размера частиц ВВ от 4 до 100 мкм критический диаметр детонации высокоплотных зарядов меняется: для FOX-7 от 0,75 до 4,40 мм, для октогена — от 0,45 до 3,45 мм, для ТЭНа — от 0,10 до 1,90 мм. Таким образом, при различной дисперсности ВВ критический диаметр детонации

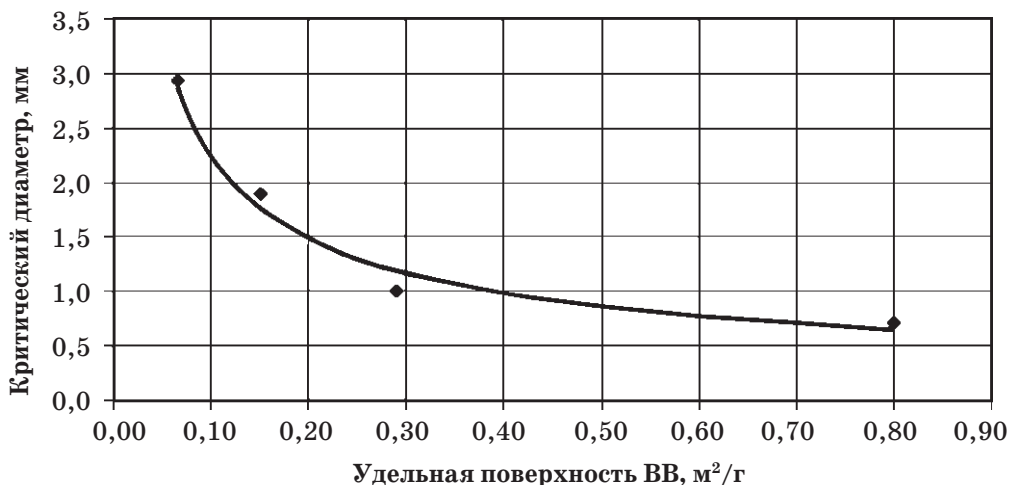


Рис. 2.48. Зависимость критических диаметров детонации чистого FOX-7 от  $S_g$

индивидуального FOX-7 в 1,3–1,7 раза больше, чем  $d_{к0}$  октогена и в 2,3–7,5 раза больше, чем  $d_{к0}$  ТЭНа.

Установлены значения коэффициентов уравнения (2.76) для FOX-7:  $a = 0,55$  мм,  $b = 0,60$  мм. Выявлен аномально высокий темп роста критического диаметра детонации FOX-7 при его разбавлении инертными веществами из-за низкой ударно-волновой чувствительности FOX-7. В связи с этим значение свободного члена в уравнении (2.83) для расчетов ВК на основе FOX-7 принято равным 5,47 вместо 4,14.

### НТФ (динитродифуразанилфуразан)

В табл. 2.63 приведены экспериментальные критические диаметры детонации смесей НТФ с СКТ.

Таблица 2.63

Критические диаметры детонации смесей НТФ с СКТ

Удельная поверхность НТФ ( $S_g$ ), см²/г	Критические диаметры детонации смесей, мм						
	Содержание НТФ, % мас.						
	65	66	69	70	72	73	75
500	6,8	—	—	5,6	—	5,1	4,4
2300	—	3,8	3,2	—	2,8	—	2,1
4000	—	3,0	2,3	—	1,8	—	1,7
6500	—	2,5	1,7	—	1,5	—	1,2

В табл. 2.64 приведены критические диаметры детонации индивидуального НТФ при его различной дисперсности.

Т а б л и ц а 2.64

**Критические диаметры детонации индивидуального НТФ**

$S_g$ , см <sup>2</sup> /г	$d_{к0}$ , мм
500	1,75
2300	0,50
4000	0,35
6500	0,19

Установлены значения коэффициентов уравнения (2.76) для НТФ:  $a = 0,15$  мм,  $b = 0,83$ .

Экспериментальные и рассчитанные по разработанному методу значения критических диаметров детонации различных взрывчатых составов приведены в табл. 2.65.

Т а б л и ц а 2.65

**Опытные и расчетные значения критического диаметра детонации взрывчатых композиций с инертными органическими добавками**

№	Состав, % мас.	Порис- тость, %	$d_k$ эксп., мм	$d_k$ расч. по $S_g$		$d_k$ расч. по $S_{ад}$	
				$S_g$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм	$S_{ад}$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм
Гексоген/полисилоксан							
1	80,0/20,0	1,0	5,0	0,06	4,7	0,30	5,2
2	77,0/23,0	1,0	6,0		6,0		5,9
3	75,0/25,0	1,0	6,5		6,5		6,4
4	72,0/28,0	0,8	7,5		7,2		7,2
5	70,0/30,0	0,8	8,0		7,8		7,8
6	65,0/35,0	0,8	9,0		9,5		9,4
7	60,0/40,0	0,5	12,0		11,9		11,6
Гексоген/полидивинилизопрен							
8	78,7/21,3	1,0	6,5	0,06	6,0	0,30	5,5
9	60,0/40,0	0,5	13,0		12,0		11,0
10	55,0/45,0	0,5	16,0		15,0		14,0
11	50,0/50,0	0,2	20,5		19,0		18,0
12	45,0/55,0	0,2	27,0		25,0		23,0

Продолжение табл. 2.65

№	Состав, % мас.	Порис- тость, %	$d_k$ эксп., мм	$d_k$ расч. по $S_g$		$d_k$ расч. по $S_{ад}$	
				$S_g$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм	$S_{ад}$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм
Гексоген/глицерин							
13	78,9/21,1	2,5	5,0	0,06	4,5	0,30	4,5
14	68,3/31,7	2,0	7,0		6,0		6,0
15	55,0/45,0	1,5	9,0		8,5		8,0
16	45,0/55,0	1,0	14,0		13,0		12,0
Гексоген/тетрабромэтан							
17	70,0/30,0	1,5	3,5	0,06	3,4	0,30	3,5
18	60,0/40,0	1,0	4,0		4,0		4,0
19	41,5/58,5	0,5	6,0		6,0		6,0
20	32,4/67,6	0,5	7,0		8,0		7,5
21	25,5/74,5	0,3	11,0		11,0		10,0
Гексоген/дибутилфталат							
22	75,0/25,0	1,5	6,0	0,06	6,0	0,30	6,0
23	72,2/27,8	1,5	7,0		6,5		6,5
24	61,1/38,9	1,0	10,5		10,0		9,5
25	55,1/44,9	1,0	12,0		13,0		12,0
Гексоген/дибромбензол							
26	75,0/25,0	2,5	4,5	0,06	4,0	0,30	4,0
27	70,0/30,0	2,0	5,0		4,5		4,5
28	60,0/40,0	1,0	6,0		5,5		5,5
29	54,5/45,5	1,0	7,0		6,5		6,5
Гексоген/этилен бромистый							
30	68,8/31,2	2,0	4,5	0,06	4,0	0,30	4,0
31	65,0/35,0	1,5	5,0		4,5		4,5
32	60,2/39,8	1,5	5,5		5,0		5,0
33	55,0/45,0	1,0	6,0		6,0		6,0
34	47,0/53,0	1,0	7,0		7,5		7,0
35	40,3/59,7	0,5	9,0		9,5		9,0
36	34,9/65,1	0,3	13,0		12,0		11,0
Гексоген/полисилоксан							
37	75,0/25,0	1,0	1,5	0,90	1,7	4,00	1,3
38	70,5/29,5	0,5	1,8		2,4		1,8



Продолжение табл. 2.65

№	Состав, % мас.	Порис- тость, %	$d_k$ эксп., мм	$d_k$ расч. по $S_g$		$d_k$ расч. по $S_{ад}$	
				$S_g$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм	$S_{ад}$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм
Гексоген/полисилоксан							
39	85,0/15,0	2,0	3,0	0,131	2,8	0,495	3,4
40	67,0/33,0	1,0	8,0		7,0		7,2
41	60,6/39,4	0,5	12,0		10,0		10,0
42	56,8/43,2	0,5	14,0		12,5		12,2
Гексоген/полисилоксан							
43	78,9/21,1	1,0	7,0	0,037	7,5	0,160	7,0
44	73,5/26,5	1,0	8,0		9,0		8,5
45	66,7/33,3	0,7	10,0		11,0		10,0
46	60,0/40,0	0,5	13,0		14,0		13,0
47	55,0/45,0	0,5	15,0		17,0		15,5
48	50,0/50,0	0,3	20,5		22,0		19,0
Гексоген/полисилоксан							
49	80,0/20,0	1,0	6,5	0,0275	8,0	0,123	7,0
50	75,6/24,4	1,0	7,5		9,0		8,0
ТЭН/полисилоксан							
51	75,0/25,0	1,0	1,0	0,435	1,0	—	—
52	70,0/30,0	1,0	1,4		1,4	—	—
53	65,0/35,0	0,5	1,8		1,9	—	—
ТЭН/полисилоксан							
54	75,0/25,0	2,0	3,0	—	—	1,07	3,2
55	70,2/29,8	1,5	4,0	—	—		4,1
56	64,9/35,1	1,5	5,0	—	—		5,4
57	59,8/40,2	0,5	7,0	—	—		7,0
58	48,4/51,6	0,5	14,0	—	—		14,5
ТЭН/полисилоксан							
59	80,0/20,0	2,5	4,0	—	—	0,40	4,5
60	62,1/37,9	1,0	7,0	—	—		8,7
61	52,4/47,6	0,5	11,0	—	—		13,7
62	48,0/52,0	0,5	15,0	—	—		17,7
ТЭН/полисилоксан							
63	80,0/20,0	2,8	5,0	—	—	0,26	5,0

Продолжение табл. 2.65

№	Состав, % мас.	Порис- тость, %	$d_{\kappa}$ эксп., мм	$d_{\kappa}$ расч. по $S_g$		$d_{\kappa}$ расч. по $S_{ад}$	
				$S_g$ , м²/г	$d_{\kappa}$ , мм	$S_{ад}$ , м²/г	$d_{\kappa}$ , мм
64	75,0/25,0	2,0	5,5	—	—	0,26	6,0
65	63,4/36,6	1,5	7,5	—	—		9,0
66	54,9/45,1	1,0	11,0	—	—		13,0
67	50,0/50,0	1,0	17,0	—	—		17,0
Октоген/полисилоксан							
68	80,0/20,0	1,0	5,0	0,158	4,5	0,70	4,0
69	75,0/25,0	0,5	6,0		6,0		5,0
Октоген/полисилоксан							
70	85,0/15,0	2,0	5,0	0,101	4,5	0,47	4,5
71	80,0/20,0	1,5	6,0		5,5		5,5
72	75,0/25,0	1,5	8,0		7,0		7,0
Октоген/полисилоксан							
73	85,0/15,0	2,5	5,0	0,05	6,0	0,30	6,0
74	80,0/20,0	1,5	6,0		7,0		7,0
75	75,0/25,0	0,5	7,0		8,5		8,5
Октоген/полисилоксан							
76	85,0/15,0	2,5	8,0	0,024	8,0	0,17	8,5
77	80,0/20,0	2,0	9,0		9,5		10,0
78	74,6/25,4	2,0	10,0		11,0		11,5
79	65,0/35,0	1,0	16,0		15,0		16,5
Тетрил/полисилоксан							
80	90,0/10,0	1,0	5,5	0,039	5,0	0,20	5,0
81	85,0/15,0	0,7	6,5		5,5		6,0
82	80,0/20,0	0,7	8,0		7,0		7,0
Тетрил/полисилоксан							
83	90,0/10,0	1,0	4,5	0,084	4,0	0,35	4,0
84	85,0/15,0	0,7	5,5		4,5		5,0
Тетрил/полисилоксан							
85	90,0/10,0	7,0	7,0	0,039	6,0	0,20	6,0
86	90,0/10,0	13,5	8,0		7,0		7,0
87	90,0/10,0	22,7	10,0		9,0		9,0
88	90,0/10,0	29,5	12,0		10,0		11,0

## 2.3. КРИТИЧЕСКИЕ ДИАМЕТРЫ ДЕТОНАЦИИ ВЗРЫВЧАТЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Окончание табл. 2.65

№	Состав, % мас.	Порис- тость, %	$d_k$ эксп., мм	$d_k$ расч. по $S_g$		$d_k$ расч. по $S_{ад}$	
				$S_g$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм	$S_{ад}$ , м <sup>2</sup> /г	$d_k$ , мм
Тетрил чистый							
89		31,7	7,0	0,039	7,5	0,20	8,0
90		44,9	10,0		10,5		11,5
91		47,5	11,0		11,5		12,5
Гексоген/полисилоксан							
92	85,0/15,0	0,1	3,5	0,09	3,4	—	—
93	85,0/15,0	6,0	4,0		4,0	—	—
94	85,0/15,0	16,0	5,0		5,0	—	—
95	85,0/15,0	19,0	5,3		5,5	—	—
96	85,0/15,0	22,0	6,0		6,0	—	—
97	85,0/15,0	28,0	7,0		7,0	—	—
Октоген/парафин [212]							
98	90/10	36,0	7,0	0,10	6,8	—	—
99	78/22	21,0	8,0		8,3	—	—
Гексоген/парафин [212]							
100	95,0/5,0	38,7	5,0	0,12	4,7	—	—
101	90,0/10,0	32,3	5,0		5,0	—	—
102	80,0/20,0	16,7	5,0		5,3	—	—
103	76,0/24,0	9,4	5,0		5,3	—	—
104	72,0/28,0	1,2	5,0		5,2	—	—

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### ОПЫТНЫЕ И РАСЧЕТНЫЕ ПЛОТНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ

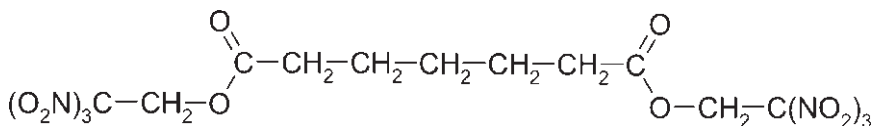
В приложении приведен расчет плотностей монокристаллов взрывчатых веществ (ВВ) различного химического строения по методу, изложенному в разделе 1.3. Для сопоставления приведены опытные значения плотности монокристаллов.

Сравнительный анализ показывает применимость данного метода расчета для широкого спектра химических структур и достаточную для практики точность.

#### Алифатические соединения

1. Pimelic acid bis-(2,2,2-trinitroethyl)ester,  $C_{11}H_{14}O_{16}N_6$ ,

$M = 486,28$  г/моль



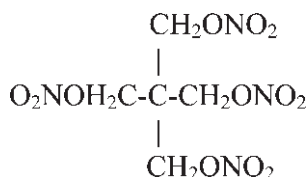
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-CH_2-$	14,77	7	$-C(NO_2)_3$	75,40	2
$-C(=O)-O-$	21,83	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 7 + 21,83 \cdot 2 + 75,40 \cdot 2 = 297,85 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

$$\text{Плотность монокристалла: } \rho_{\text{мк}} = \frac{M}{V} = \frac{486,28}{297,85} = 1,63 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,63 г/см<sup>3</sup> [67].

2. Pentaerythritol tetranitrate, PETN,  $C_5H_8O_{12}N_4$ ,  $M = 316,14$  г/моль

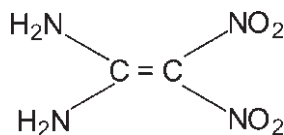
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\diagup C \diagdown$	-8,92	1	$-CH_2ONO_2$	46,77	4

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 46,77 \cdot 4 - 8,92 = 178,16 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 316,14/178,16 = 1,77$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,773 г/см<sup>3</sup> [67].

3. 1,1-Diamino-2,2-dinitroethylene, FOX-7,  $C_2H_4O_4N_4$ ,  
 $M = 148,08$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\diagup C =$	4,47	1	$-NH_2$	11,96	2
$=C(NO_2)_2$	50,17	1			

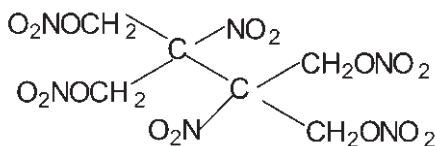
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,47 + 50,17 + 11,96 \cdot 2 = 78,56 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 148,08/78,56 = 1,88$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,885 г/см<sup>3</sup> [66].

4. 1, 2-Tetrakis-(nitrooxomethylene) dinitroethane, TkNxMDNE,  $C_6H_8O_{16}N_6$ ,  $M = 420,16$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2\text{ONO}_2$	46,77	4	$\geq \text{CNO}_2$	18,64	2

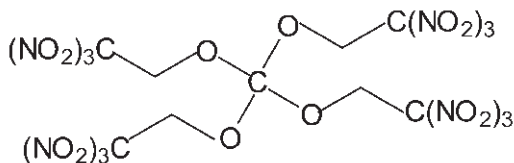
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 46,77 \cdot 4 + 18,64 \cdot 2 = 224,36 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 420,16/224,36 = 1,87$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,870 г/см<sup>3</sup> [9].

5. Tetrakis-(охо-2,2,2-тринитроэтил)метане, TkTNECb,  $C_9H_8O_{28}N_{12}$ ,  $M = 732,22$  г/моль



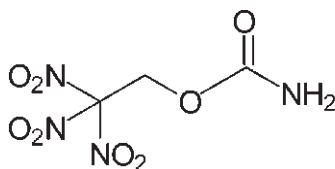
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{O}=\text{C}=\text{O}-$	37,27	1	$-\text{CH}_2-$	14,77	4
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	4			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 37,27 + 14,77 \cdot 4 + 75,40 \cdot 4 = 397,95 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 732,22/397,95 = 1,84$  г/см<sup>3</sup>.

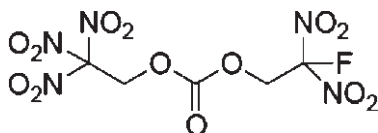
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,810 г/см<sup>3</sup> [9].

6. O-2,2,2-trinitroethylurethane, TNECb,  $C_3H_4O_8N_4$ , $M = 224,09$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	1	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1
$-\text{C} \begin{smallmatrix} \text{O} \\ \text{O}- \end{smallmatrix}$	21,83	1	$-\text{NH}_2$	11,96	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 + 21,83 + 11,96 + 75,40 = 123,96 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 224,09/123,96 = 1,81$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,820 г/см<sup>3</sup> [77].7. 2-Fluoro-2,2-dinitroethyl-(2,2,2-trinitroethyl)carbonate,  $C_5H_4O_{13}N_5F$ , $M = 361,11$  г/моль

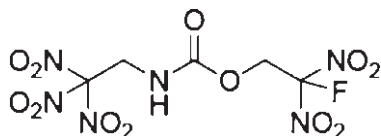
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{O}=\text{C} \begin{smallmatrix} \text{O}- \\ \text{O}- \end{smallmatrix}$	24,38	1	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 24,38 + 14,77 \cdot 2 + 75,40 + 63,85 = 193,17 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 361,11/193,17 = 1,87$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,85 г/см<sup>3</sup> [77].

8. O-2-Fluoro-2,2-dinitroethyl-N-(2,2,2-trinitroethyl)carbamate,  
 $C_5H_5O_{12}N_6F$ ,  $M = 360,12$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1
$-\text{C} \begin{smallmatrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O}- \end{smallmatrix}$	21,83	1	$-\text{NH}-$	6,03	1
			$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	1

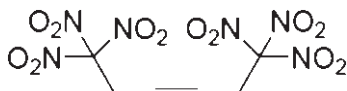
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 21,83 + 6,03 + 75,40 + 63,85 = 196,65 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 360,12/196,65 = 1,83$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,81 г/см<sup>3</sup> [77].

9. 1,1,1,6,6,6-Гексанитрогекс-3-ин,  $C_6H_4O_{12}N_6$ ,  $M = 352,13$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\equiv \text{C}-$	7,92	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2
$-\text{CH}_2-$	14,77	2			

Мольный объем:

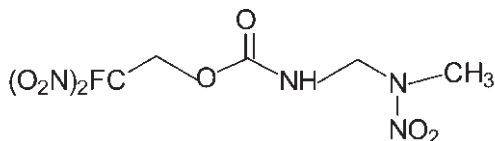
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,92 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 75,40 \cdot 2 = 196,18 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 352,13/196,18 = 1,79$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,80 г/см<sup>3</sup> [77].

10. O-2-Fluoro-2,2-dinitroethyl-N(3-nitro-3-azabutyl)carbamate,  
 $C_5H_8O_8N_5F$ ,  $M = 285,14$  г/моль





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	1
$-\text{C}\begin{smallmatrix} \text{O} \\ \text{O} \end{smallmatrix}$	21,83	1	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$-\text{NH}-$	6,03	1	$-\text{CH}_3$	28,52	1

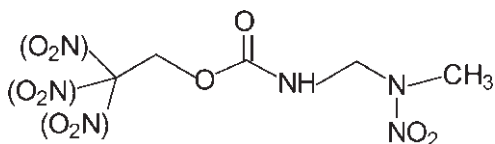
Молярный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 21,83 + 6,03 + 63,85 + 17,69 + 28,52 = 167,46 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 285,14/167,46 = 1,70 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,71 \text{ г/см}^3$  [77].

11. O-2,2,2-trinitroethyl-N(3-nitro-3-azabutyl)carbamate,  $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_{10}\text{N}_6$ ,  
 $M = 312,15 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1
$-\text{C}\begin{smallmatrix} \text{O} \\ \text{O} \end{smallmatrix}$	21,83	1	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$-\text{NH}-$	6,03	1	$-\text{CH}_3$	28,52	1

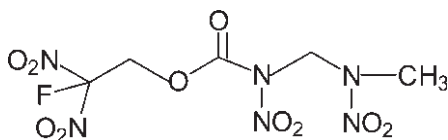
Молярный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 21,83 + 6,03 + 75,40 + 17,69 + 28,52 = 179,01 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 312,15/179,01 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,74 \text{ г/см}^3$  [77].

12. O-2-Fluoro-2,2-dinitroethyl-N-nitro(3-nitro-3-azabutyl)carbamate,  
 $C_5H_7O_{10}N_6F$ ,  $M = 330,14$  г/моль

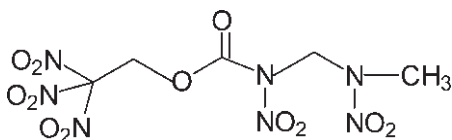


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$>\text{NNO}_2$	17,69	2
$-\text{C} \begin{smallmatrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O} \end{smallmatrix}$	21,83	1	$-\text{CH}_3$	28,52	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	1	$>\text{NNO}_2 \dots >\text{C}=\text{O}$	3,88	1
			$>\text{NNO}_2 \dots >\text{NNO}_2$	1,24	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 21,83 + 63,85 +$   
 $+ 17,69 \cdot 2 + 28,52 + 3,88 + 1,24 = 184,24$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 330,14/184,24 = 1,79$  г/см<sup>3</sup>.  
 Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,77 г/см<sup>3</sup> [77].

13. O-2,2,2-trinitroethyl-N-nitro(3-nitro-3-azabutyl)carbamate,  
 $C_5H_7O_{12}N_7$ ,  $M = 357,15$  г/моль

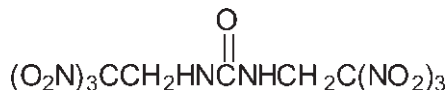


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$>\text{NNO}_2$	17,69	2
$-\text{C} \begin{smallmatrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O} \end{smallmatrix}$	21,83	1	$-\text{CH}_3$	28,52	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1	$>\text{NNO}_2 \dots >\text{C}=\text{O}$	3,88	1
			$>\text{NNO}_2 \dots >\text{NNO}_2$	1,24	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 21,83 + 75,40 +$   
 $+ 17,69 \cdot 2 + 28,52 + 3,88 + 1,24 = 195,79$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 357,15/195,79 = 1,82 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,82 \text{ г/см}^3$  [77].

14. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)urea, BTNEU,  $\text{C}_5\text{H}_6\text{O}_{13}\text{N}_8$ ,  $M = 386,15 \text{ г/моль}$



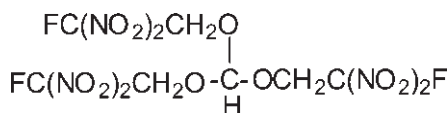
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2	$-\text{NH}-$	6,03	2
$-\text{CH}_2-$	14,77	2	$\begin{matrix} (\text{N}) \\ \diagup \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagdown \\ (\text{N}) \end{matrix}$	14,89	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 14,89 = 207,29 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 386,15/207,29 = 1,86 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,86 \text{ г/см}^3$  [67].

15. 2-Fluoro-2,2-dinitroethyl orthoformate,  $\text{C}_7\text{H}_7\text{O}_{15}\text{N}_6\text{F}_3$ ,  
 $M = 472,15 \text{ г/моль}$

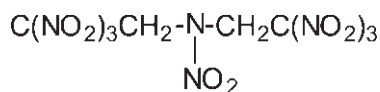


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	3	$\begin{matrix} \text{O}- \\ \diagup \\ \text{HC}-\text{O}- \\ \diagdown \\ \text{O}- \end{matrix}$	34,61	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	3			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 34,61 + 63,85 \cdot 3 + 14,77 \cdot 3 = 270,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

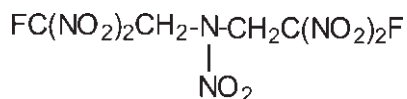
Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 472,15/270,47 = 1,75 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,76 \text{ г/см}^3$  [10].

**16. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)nitramine, BTNEN, C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>14</sub>N<sub>8</sub>,** $M = 388,12$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$-\text{CH}_2^-$	14,77	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 17,69 = 198,03 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 388,12/198,03 = 1,96$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,96 г/см<sup>3</sup> [10].**17. Bis-(2-fluoro-2,2-dinitroethyl)nitramine, C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>10</sub>N<sub>6</sub>F<sub>2</sub>,** $M = 334,10$  г/моль

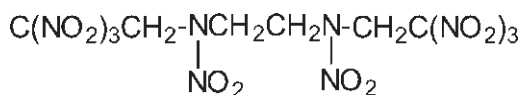
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	2	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$-\text{CH}_2^-$	14,77	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 63,85 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 17,69 = 174,93 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 334,10/174,93 = 1,91$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,91 г/см<sup>3</sup> [10].

18. Bis-[N-(2,2,2-trinitroethyl)nitramino]ethane, BTNEEDNA,  
 $C_6H_8O_{16}N_8$ ,  $M = 448,17$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$\delta_i$	Число
$-C(NO_2)_3$	75,40	2	$>NNO_2$	17,69	2
$-CH_2-$	14,77	4			

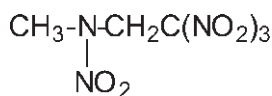
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 4 + 17,69 \cdot 2 = 245,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 448,17/245,26 = 1,83$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,87 г/см<sup>3</sup> [67].

19. N-methyl-N-2,2,2-trinitroethylnitramine,  $C_3H_5O_8N_5$ ,  
 $M = 239,10$  г/моль



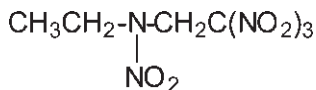
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-C(NO_2)_3$	75,40	1	$>NNO_2$	17,69	1
$-CH_2-$	14,77	1	$-CH_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 + 14,77 + 17,69 + 28,52 = 136,38 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 239,10/136,38 = 1,75$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,80 г/см<sup>3</sup> [67].

20. N-ethyl-N-2,2,2-trinitroethylnitramine,  $C_4H_7O_8N_5$ , $M = 253,13$  г/моль

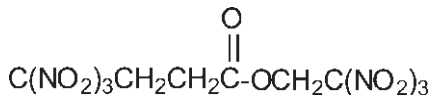
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$-\text{CH}_2^-$	14,77	2	$-\text{CH}_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 + 14,77 \cdot 2 + 17,69 + 28,52 = 151,15 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 253,13/151,15 = 1,68$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}} = 1,71$  г/см<sup>3</sup> [67].

## 21. 3,3,3-trinitrobutyric acid (2',2',2'-trinitroethyl)ester, TNETNB,

 $C_6H_6O_{14}N_6$ ,  $M = 386,14$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2	$-\text{C} \begin{array}{l} \text{O} \\ // \\ \text{O} \end{array}$	21,83	1
$-\text{CH}_2^-$	14,77	3			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 3 + 21,83 = 216,94 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 386,14/216,94 = 1,78$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,78 г/см<sup>3</sup> [28], 1,839 г/см<sup>3</sup> [67].22. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)formal, TEFO,  $C_5H_6O_{14}N_6$ , $M = 374,13$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2	$\text{H}_2\text{C} \begin{array}{c} \diagup \text{O}- \\ \diagdown \text{O}- \end{array}$	38,35	1
$-\text{CH}_2-$	14,77	2			

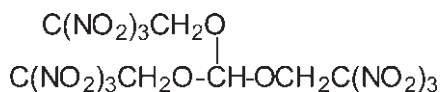
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 38,35 = 218,69 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 374,13/218,69 = 1,71 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,72 \text{ г/см}^3$  [10].

23. 2,2,2-Trinitroethyl orthoformate,  $\text{C}_7\text{H}_7\text{O}_{21}\text{N}_9$ ,  $M = 553,18 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	3	$\text{HC} \begin{array}{c} \diagup \text{O}- \\ \diagdown \text{O}- \end{array}$	34,61	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	3			

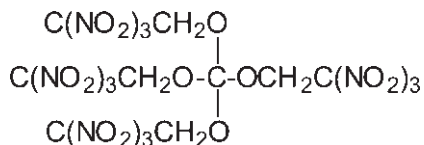
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 3 + 14,77 \cdot 3 + 34,61 = 305,12 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 553,18/305,12 = 1,81 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,80 \text{ г/см}^3$  [67].

24. 2,2,2-Trinitroethyl orthocarbonate,  $\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_{28}\text{N}_{12}$ ,  $M = 732,22 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	4	$\begin{array}{c} \text{O} \quad \text{O} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$	37,27	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	4			

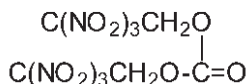
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 4 + 14,77 \cdot 4 + 37,27 = 397,95 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 732,22/397,95 = 1,84 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [67].

25. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)carbonate,  $\text{C}_5\text{H}_4\text{O}_{15}\text{N}_6$ ,  $M = 388,11 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2^-$	14,77	2	$\text{O}=\text{C} \begin{array}{l} \diagup \text{O}- \\ \diagdown \text{O}- \end{array}$	24,38	1
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2			

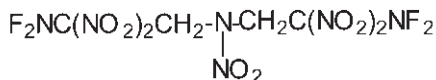
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 24,38 = 204,72 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 388,11/204,72 = 1,89 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,88 \text{ г/см}^3$  [67].

26. Bis-(2-difluoroamino-2,2-dinitroethyl)nitramine,  $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_{10}\text{N}_8\text{F}_4$ ,  $M = 400,11 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2^-$	14,77	2	$>\text{NNO}_2$	17,69	1
$>\text{C}(\text{NO}_2)_2$	41,69	2	$-\text{NF}_2 \dots -\text{NO}_2$	1,38	4
$-\text{NF}_2$	30,02	2			

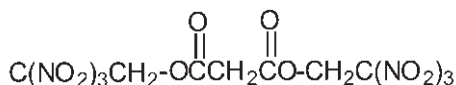
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 41,69 \cdot 2 + 30,02 \cdot 2 + 17,69 + 1,38 \cdot 4 = 196,17 \text{ см}^3/\text{моль}.$$



Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 400,11/196,17 = 2,04 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,045 \text{ г/см}^3$  [62].

27. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)malonate,  $\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_{16}\text{N}_6$ ,  $M = 430,15 \text{ г/моль}$



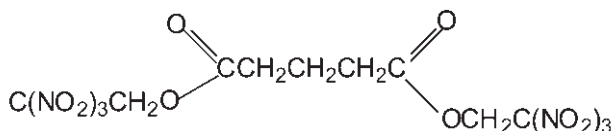
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	3	$-\text{C}\begin{matrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O}- \end{matrix}$	21,83	2
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 3 + 21,83 \cdot 2 = 238,77 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 430,15/238,77 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,75 \text{ г/см}^3$  [10].

28. Bis-(2,2,2-trinitroethyl)glutarate,  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_{16}\text{N}_6$ ,  $M = 458,21 \text{ г/моль}$

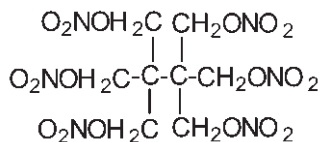


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_2-$	14,77	5	$-\text{C}\begin{matrix} \text{O} \\ \parallel \\ \text{O}- \end{matrix}$	21,83	2
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 \cdot 2 + 14,77 \cdot 5 + 21,83 \cdot 2 = 268,31 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 458,21/268,31 = 1,71 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,67 \text{ г/см}^3$  [10].

29. Hexa-(nitratomethyl)ethane,  $C_8H_{12}O_{18}N_6$ ,  $M = 480,21$  г/моль

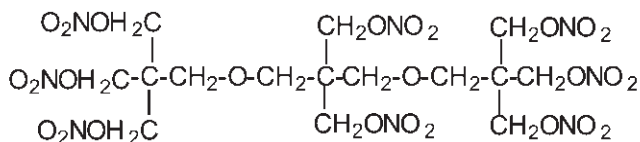
Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
$-C(CH_2ONO_2)_3$	145,64	2

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 145,64 \cdot 2 = 291,28 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 480,21/291,28 = 1,65$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,63 г/см<sup>3</sup> [10].

30. 1,1,1,5,5,9,9,9-Octa-(nitratomethyl)-3,7-dioxa-nonane,  $C_{15}H_{24}O_{26}N_8$ ,  
 $M = 732,39$  г/моль

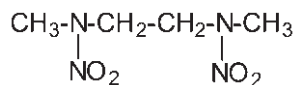
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-C(CH_2ONO_2)_3$	145,64	2	$-CH_2-$	14,77	4
$>C(CH_2ONO_2)_2$	104,80	1	$-O-$	4,19	2

Мольный объем:

$$\begin{aligned}
 V &= \sum V_i + \sum \delta_i = 145,64 \cdot 2 + 104,80 + 14,77 \cdot 4 + 4,19 \cdot 2 = \\
 &= 463,54 \text{ см}^3/\text{моль}.
 \end{aligned}$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 732,39/463,54 = 1,58$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,58 г/см<sup>3</sup> [10].

31. 2,5-Diaza-2,5-dinitrohexane,  $C_4H_{10}O_4N_4$ ,  $M = 178,15$  г/моль

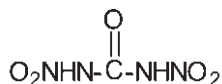
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-\text{CH}_3$	28,52	2	$-\text{CH}_2^-$	14,77	2
$>\text{NNO}_2$	17,69	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,52 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 17,69 \cdot 2 = 121,96 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 178,15/121,96 = 1,46$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,446 г/см<sup>3</sup> [10].

32. N,N'-dinitrourea, DNU,  $\text{CH}_2\text{O}_5\text{N}_4$ ,  $M = 150,05$  г/моль

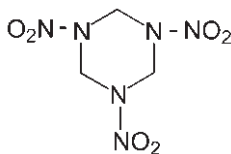
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{l} (\text{N}) \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagup \\ (\text{N}) \end{array}$	14,89	1	$-\text{NHNO}_2 \dots -\text{NHNO}_2$	1,24	1
$-\text{NHNO}_2$	30,44	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,89 + 30,44 \cdot 2 + 1,24 = 77,01 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 150,05/77,01 = 1,95$  г/см<sup>3</sup>.

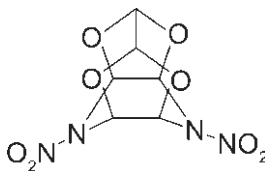
Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,98 г/см<sup>3</sup> [210].

**Алициклические и насыщенные гетероциклические соединения****1. 1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazacyclohexane, RDX,  $C_3H_6O_6N_6$ ,** $M = 222,12$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2-(N_c)$	19,92	3	6-членный цикл	0,00	1
$(C_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NNO_2$	21,22	3			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 \cdot 3 + 21,22 \cdot 3 = 123,42 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 222,12/123,42 = 1,80$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,802 г/см<sup>3</sup> [67].**2. 4,10-Dinitro-2,6,8,12-tetraoxa-4,10-diazatetracyclo[5.5.0.0<sup>5,9</sup>.0<sup>3,11</sup>]-dodecane, TEX,  $C_6H_6O_8N_4$ ,  $M = 262,13$  г/моль**

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(O_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} CH-(C_c)$	10,28	2	$(C_c)-O-(C_c)$	5,05	4
$(O_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} CH-(N_c)$			5-членный цикл	+3,54	2
$(C_c) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} NNO_2$	21,22	2	6-членный цикл	0,00	1
			7-членный цикл	-4,63	2

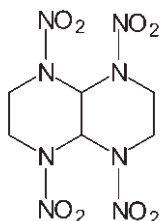
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 10,28 \cdot 2 + 12,76 \cdot 4 + 21,22 \cdot 2 + 5,05 \cdot 4 + 3,54 \cdot 2 - 4,63 \cdot 2 = 132,06 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 262,13/132,06 = 1,98 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,985 \text{ г/см}^3$  [66].

3. Trans-1,4,5,8-tetranitro-1,4,5,8-tetraazadecaline, TNAD,  $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_8\text{N}_8$ ,  $M = 322,19 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(\text{C}_c) - \text{CH}_2 - (\text{N}_c)$	17,00	4	$(\text{C}_c) \text{---} \text{NNO}_2$	21,22	4
$(\text{N}_c) \text{---} \text{CH} - (\text{C}_c)$	14,34	2	6-членный цикл	0,00	2

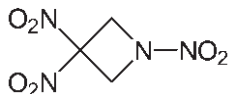
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 17,00 \cdot 4 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 = 181,56 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 322,19/181,56 = 1,77 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,80 \text{ г/см}^3$  [67].

4. 1,3,3-Trinitroazetidine, TNAZ,  $\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_6\text{N}_4$ ,  $M = 192,09 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(\text{C}_c) - \text{CH}_2 - (\text{N}_c)$	17,00	2	$(\text{C}_c) \text{---} \text{NNO}_2$	21,22	1
$(\text{C}_c) \text{---} \text{C}(\text{NO}_2)_2$	44,47	1	4-член. цикл	+7,13	1

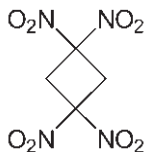
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 17,00 \cdot 2 + 44,47 + 21,22 + 7,13 = 106,82 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 192,09/106,82 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [9].

5. 1,1,3,3-Tetranitrocyclobutane, TNCB,  $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_8\text{N}_4$ ,  $M = 236,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(\text{C}_c) - \text{CH}_2 - (\text{C}_c)$	16,60	2	4-членный цикл	+7,13	1
$(\text{C}_c) \text{---} \text{C}(\text{NO}_2)_2$	44,47	2			

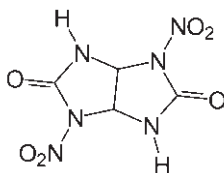
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 16,60 \cdot 2 + 44,47 \cdot 2 + 7,13 = 129,27 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 236,10/129,27 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,83 \text{ г/см}^3$  [62].

6. 1,4-Dinitroglucuril, DNGU,  $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6\text{N}_6$ ,  $M = 232,11 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(\text{N}_c) \text{---} \text{CH} - (\text{C}_c)$	14,34	2	$(\text{C}_c) - \text{NH} - (\text{C}_c, \text{N}_c)$	7,26	2
$(\text{N}_c) \text{---} \text{C}(\text{NO}_2)_2$			5-членный цикл	3,54	2
$(\text{C}_c) \text{---} \text{NNO}_2$	21,22	2	$(\text{N}_c) \text{---} \text{C}=\text{O} \dots (\text{C}_c) \text{---} \text{NNO}_2$	2,29	2

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O$	13,34	2	$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O \cdots \begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c, N_c) \end{array} NH$	-2,35	2

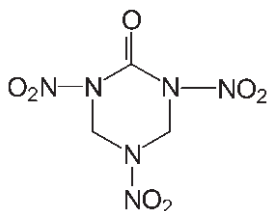
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 2 + 13,34 \cdot 2 + 7,26 \cdot 2 + 3,54 \cdot 2 + 2,29 \cdot 2 - 2,35 \cdot 2 = 119,28 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 232,11/119,28 = 1,95 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,98 \text{ г/см}^3$  [62].

7. 2-Охо-1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazacyclohexane, К-6,  $C_3H_4O_7N_6$ ,  
 $M = 236,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2-(N_c)$	19,92	2	$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O \cdots \begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c) \end{array} NNO_2$	2,29	2
$\begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c) \end{array} NNO_2$	21,22	3	6-членный цикл	0,00	1
$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O$	13,34	1			

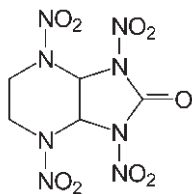
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 \cdot 2 + 21,22 \cdot 3 + 13,34 + 2,29 \cdot 2 = 121,42 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 236,10/121,42 = 1,94 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,932 \text{ г/см}^3$  [62].

8. 2,5,7,9-Tetranitro-2,5,7,9-tetraazabicyclo[4,3,0]nonane-8-one, К-56,  
 $C_5H_6O_9N_8$ ,  $M = 322,15$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(C_c)-CH_2-(N_c)$	17,00	2	$(N_c)-C=O$	13,34	1
$(N_c)-CH-(C_c)$	14,34	2	5-членный цикл	3,54	1
$(C_c)-NNO_2$	21,22	4	6-членный цикл	0,00	1
			$(N_c)-C=O \dots (C_c)-NNO_2$	2,29	2

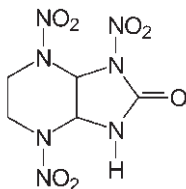
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 17,00 \cdot 2 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 13,34 + 3,54 + 2,29 \cdot 2 = 169,02 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 322,15/169,02 = 1,91$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,92 г/см<sup>3</sup> [67].

9. 2,5,7-Trinitro-2,5,7,9-tetraazabicyclo[4,3,0]nonane-8-one, НК-56,  
 $C_5H_7O_7N_7$ ,  $M = 277,15$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(C_c)-CH_2-(N_c)$	17,00	2	5-членный цикл	3,54	1
$(N_c)-CH-(C_c)$	14,34	2	6-членный цикл	0,00	1
			$(N_c)-C=O \dots (C_c)-NNO_2$	2,29	1



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(C_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	3	$(C_c)-NH-(C_c, N_c)$	7,26	1
$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O$	13,34	1	$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O \cdots (C_c, N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NH$	-2,35	1

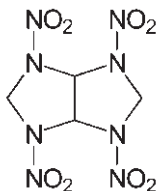
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 17,00 \cdot 2 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 3 + 13,34 + 7,26 + \\ + 3,54 + 2,29 - 2,35 = 150,42 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 277,15/150,42 = 1,84 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [62].

**10. 2,4,6,8-Tetranitro-2,4,6,8-tetraazabicyclo[3.3.9]octane,**  
 $C_4H_6O_8N_8$ ,  $M = 294,14 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2-(N_c)$	19,92	2	5-членный цикл	3,54	2
$(N_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} CH-(C_c)$	14,34	2	$(C_c) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	4

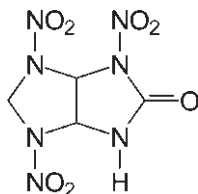
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 \cdot 2 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 3,54 \cdot 2 = \\ = 160,48 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 294,14/160,48 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,87 \text{ г/см}^3$  [67].

**11. 2,4,6-Trinitro-2,4,6,8-tetraazabicyclo[3.3.9]octane-3-one, НК-55,**  
 $C_4H_5O_7N_7$ ,  $M = 263,13$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2-(N_c)$	19,92	1	5-ти членный цикл	3,54	2
$(N_c)-CH-(C_c)$	14,34	2	$(N_c)-C=O \dots (C_c)-NNO_2$	2,29	1
$(C_c)-NNO_2$	21,22	3	$(C_c)-NH-(C_c, N_c)$	7,26	1
$(N_c)-C=O$	13,34	1	$(N_c)-C=O \dots (C_c)-NH$	-2,35	1

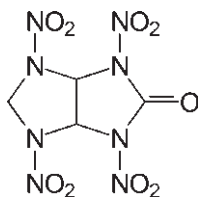
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 3 + 13,34 + 7,26 + 3,54 \cdot 2 + 2,29 - 2,35 = 139,88 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 263,13/139,88 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,905 \text{ г/см}^3$  [62].

**12. 2,4,6,8-Tetranitro-2,4,6,8-tetraazabicyclo[3.3.9]octane-3-one,**  
 К-55,  $C_4H_4O_9N_8$ ,  $M = 308,12$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c)-CH_2-(N_c)$	19,92	1	$(N_c)-C=O$	13,34	1

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ CH-(C_c) \end{array}$	14,34	2	5-ти членный цикл	3,54	2
$\begin{array}{c} (C_c) \\ \diagdown \\ NNO_2 \end{array}$	21,22	4	$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ C=O \dots \end{array} \begin{array}{c} (C_c) \\ \diagdown \\ NNO_2 \end{array}$	2,29	2

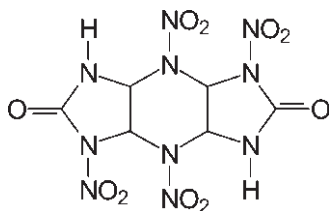
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,92 + 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 13,34 + 3,54 \cdot 2 + 2,29 \cdot 2 = 158,48 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 308,12/158,48 = 1,94 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,954 \text{ г/см}^3$  [67].

13. *Cis-syn-cis*-2,6-dioxo-1,4,7,8-tetranitrodecahydro-1*H*,5*H*-diimidazo-[4,5-*b*:4',5'-*e*]pyrazine,  $C_6H_6O_{10}N_{10}$ ,  $M = 378,17 \text{ г/моль}$



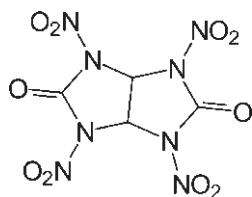
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Чис-ло
$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ CH-(C_c) \end{array}$	14,34	4	5-членный цикл	3,54	2
$\begin{array}{c} (C_c) \\ \diagdown \\ NNO_2 \end{array}$	21,22	4	6-членный цикл	0,00	1
$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ C=O \end{array}$	13,34	2	$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ C=O \dots \end{array} \begin{array}{c} (C_c) \\ \diagdown \\ NNO_2 \end{array}$	2,29	2
			$(C_c)-NH-(C_c, N_c)$	7,26	2
			$\begin{array}{c} (N_c) \\ \diagdown \\ C=O \dots \end{array} \begin{array}{c} (C_c) \\ \diagdown \\ NH \end{array}$	-2,35	2

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,34 \cdot 4 + 21,22 \cdot 4 + 13,34 \cdot 2 + 7,26 \cdot 2 + 3,54 \cdot 2 + 2,29 \cdot 2 - 2,35 \cdot 2 = 190,40 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 378,17/190,40 = 1,98 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,970 \text{ г/см}^3$  [62].

14. 1,3,4,6-Tetranitroglycoluril, TNGU,  $C_4H_2O_{10}N_8$ ,  $M = 322,11$  г/моль

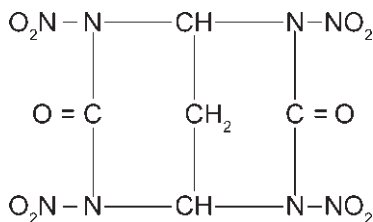
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} CH-(C_c)$	14,34	2	$(N_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O \dots (C_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	+2,29	4
$(C_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	4	5-членный цикл	+3,54	2
$(N_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O$	13,34	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 13,34 \cdot 2 + 3,54 \cdot 2 + 2,29 \cdot 4 = 156,48 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 322,11/156,48 = 2,06$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 2,04 г/см<sup>3</sup> [62].

15. Tetranitropropane diurea, TNPDU,  $C_5H_4O_{10}N_8$ ,  $M = 336,13$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$(N_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} CH-(C_c)$	14,34	2	$(C_c)-CH_2-(C_c)$	16,60	1
$(C_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	21,22	4	6-членный цикл	0,00	2
			$(N_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=O \dots (C_c) \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \end{array} NNO_2$	2,29	4

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O$	13,34	2			

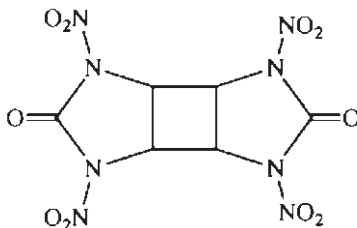
Молярный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 13,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 13,34 \cdot 2 + 16,60 + 2,29 \cdot 4 = 166,00 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 336,13/166,00 = 2,02 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,98 г/см<sup>3</sup> [61].

16. Octahydro-1,3,4,6-tetranitro-3 $\alpha$ ,3 $\beta$ ,6 $\alpha$ ,6 $\beta$ -cyclobuta  
[1,2-*d*:3,4-*d'*]-diimidazole-2,5-dione, Tetraaza-tetranitroglycourilo-  
cyclobutane, C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>O<sub>10</sub>N<sub>8</sub>,  $M = 348,14 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O$	13,34	2	$\begin{array}{c} (N_c) \diagup \\ \diagdown (N_c) \end{array} C=O \dots \begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c) \end{array} NNO_2$	+2,29	4
$\begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c) \end{array} NNO_2$	21,22	4	5-членный цикл	+3,54	2
$\begin{array}{c} (C_c) \diagup \\ \diagdown (C_c) \end{array} CH-(N_c, O_c)$	10,01	4	4-членный цикл	7,13	1

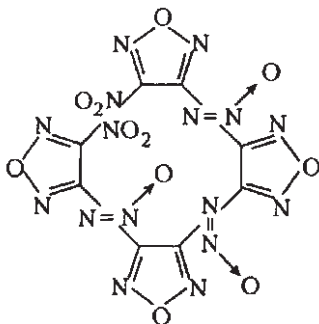
Молярный объем:



$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 13,34 \cdot 2 + 21,22 \cdot 4 + 10,01 \cdot 4 + 2,29 \cdot 4 + 3,54 \cdot 2 + 7,13 = 174,97 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 348,14/174,97 = 1,99 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,99 г/см<sup>3</sup> [61].

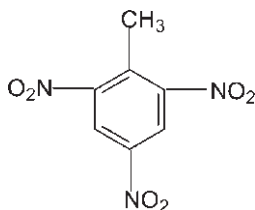
## Ароматические и гетероароматические соединения


1. Azoxy-bis(nitrofurazanyl-O, N, N-azoxy)furazane,  $C_8O_{11}N_{16}$ , $M = 496,20$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	4	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$ 	27,13	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 4 + 25,78 \cdot 2 + 27,13 \cdot 3 = 268,71 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 496,20/268,71 = 1,85$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,88 г/см<sup>3</sup> [67].2. 2,4,6 — Trinitrotoluene, TNT,  $C_7H_5O_6N_3$ ,  $M = 227,14$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	1

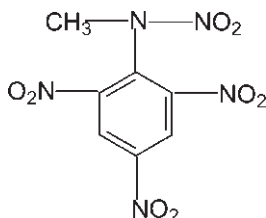
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 22,04 = 138,82 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 227,14/138,82 = 1,64 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,66 \text{ г/см}^3$  [67].

3. 2,4,6-Trinitrophenyl-N-methylnitramine, Tetryl,  $\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_8\text{N}_5$ ,  
 $M = 287,15 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	2
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	3	$(\text{C}_{\text{ar}})-\text{N}(\text{NO}_2)$	19,62	1
			$-\text{CH}_3$	28,52	1

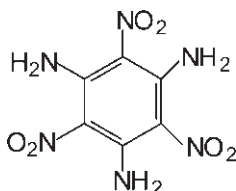
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 19,62 + 28,52 = 164,92 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 287,15/164,92 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,73 \text{ г/см}^3$  [67].

4. 1,3,5-Triamino-2,4,6-trinitrobenzene, TATB,  $\text{C}_6\text{H}_6\text{O}_6\text{N}_6$ ,  
 $M = 258,15 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
			$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	3

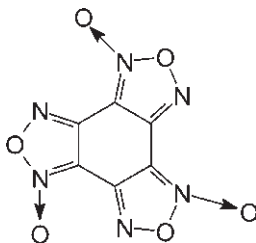
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 11,74 \cdot 3 = 136,08 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 258,15/136,08 = 1,90 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,938 \text{ г/см}^3$  [66].

5. Benzotrifuroxane, BTF,  $C_6O_6N_6$ ,  $M = 252,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het(as)}$	6,86	6	$(N_{het})-O-(N_{het})$	11,50	3
$(C_{het}, O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	6	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	3

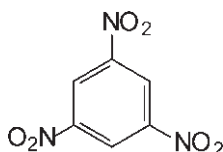
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 6 + 6,40 \cdot 6 + 11,50 \cdot 3 + 5,41 \cdot 3 = 130,29 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 252,10/130,29 = 1,93 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,901 \text{ г/см}^3$  [67].

6. 1,3,5-Trinitrobenzene, TNB,  $C_6H_3O_6N_3$ ,  $M = 213,10 \text{ г/моль}$





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3			

Мольный объем:

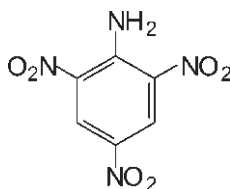
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 3 = 124,74 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 213,10/124,74 = 1,71 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,688 \text{ г/см}^3$  [66].

7. 2,4,6-Trinitroaniline (Picramide), TNA,  $C_6H_3O_6N_3$ ,

$M = 228,12 \text{ г/моль}$



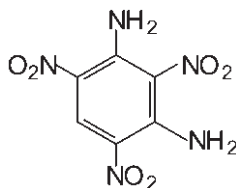
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 11,74 = 128,52 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 228,12/128,52 = 1,78 \text{ г/см}^3$ .

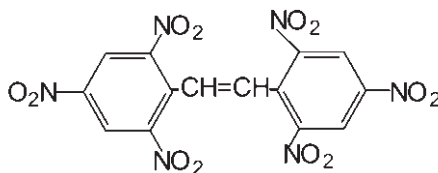
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,792 \text{ г/см}^3$  [66].


8. 1,3-Diamino-2,4,6-trinitrobenzene, DATB,  $C_6H_5O_6N_5$ , $M = 243,13$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 11,74 \cdot 2 + 7,96 = 132,30 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 243,13/132,30 = 1,84$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,84 г/см<sup>3</sup> [66].9. 2,2',4,4',6,6'-Hexanitrostilbene, HNS,  $C_{14}H_6O_{12}N_6$ , $M = 450,23$  г/моль

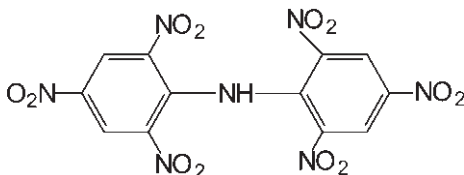
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-CH=$	12,60	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	6	$(C_{ar,het})-H$	7,96	4


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 2 + 25,78 \cdot 6 + 12,60 \cdot 2 + 7,96 \cdot 4 = 258,76 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 450,23/258,76 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,74 \text{ г/см}^3$  [67].

**10. 2,2',4,4',6,6'-Гексанитродипениламин,  $\text{C}_{12}\text{H}_5\text{O}_{12}\text{N}_7$ ,  
 $M = 439,21 \text{ г/моль}$**



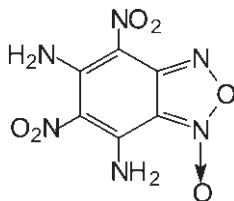
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{NH}-(\text{C}_{\text{ar,het}})$	16,74	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	6	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	4

Молярный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 2 + 25,78 \cdot 6 + 16,74 + 7,96 \cdot 4 = 250,30 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 439,21/250,30 = 1,75 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,78 \text{ г/см}^3$  [67].

**11. 5,7-Диамино-4,6-динитробензофуран, CL-14,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{O}_6\text{N}_6$ ,  
 $M = 256,14 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{C}_{\text{ar,het}}$	4,00	4	$(\text{N}_{\text{het}}) \rightarrow \text{O}$	5,41	1
$\text{C}_{\text{ar,het}}(\text{as})$	6,86	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	2
$(\text{C}_{\text{het}}, \text{O}_{\text{het}})-\text{N}=(\text{C}_{\text{het}})$	6,40	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	11,74	2
$(\text{N}_{\text{het}})-\text{O}-(\text{N}_{\text{het}})$	11,50	1			

Мольный объем:

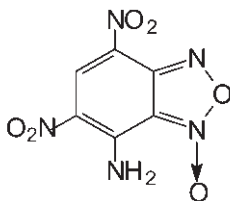
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,00 \cdot 4 + 6,86 \cdot 2 + 6,40 \cdot 2 + 11,50 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 + 5,41 = 134,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 256,14/134,47 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,942 \text{ г/см}^3$  [66].

**12. 7-Amino-4,6-dinitrobenzofuroxan, ADNBF,  $\text{C}_6\text{H}_3\text{O}_6\text{N}_5$ ,**

$M = 241,12 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{C}_{\text{ar,het}}$	4,00	4	$(\text{N}_{\text{het}}) \rightarrow \text{O}$	5,41	1
$\text{C}_{\text{ar,het (as)}}$	6,86	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	2
$(\text{C}_{\text{het}}, \text{O}_{\text{het}}) - \text{N} = (\text{C}_{\text{het}})$	6,40	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NH}_2$	11,74	1
$(\text{N}_{\text{het}}) - \text{O} - (\text{N}_{\text{het}})$	11,50	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{H}$	7,96	1

Мольный объем:

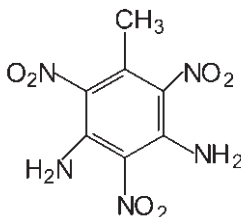
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,00 \cdot 4 + 6,86 \cdot 2 + 6,40 \cdot 2 + 11,50 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 + 5,41 + 7,96 = 130,69 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 241,12/130,69 = 1,85 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,90 \text{ г/см}^3$  [67].

**13. 3,5-Diamino-2,4,6-trinitrotoluene, DATNT,  $\text{C}_7\text{H}_7\text{O}_6\text{N}_5$ ,**

$M = 257,16 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	1

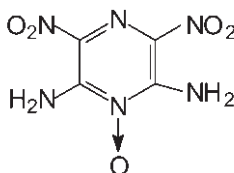
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 11,74 \cdot 2 + 22,04 = 146,38 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 257,16/146,38 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,76 \text{ г/см}^3$  [66].

14. 2,6-Diamino-3,5-dinitropyrazine-1-oxide, LLM-105,  $C_4H_4O_5N_6$ ,  
 $M = 216,11 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,39	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	1

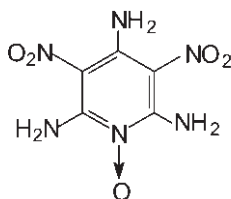
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,39 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 + 5,41 = 112,84 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 216,11/112,84 = 1,92 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,918 \text{ г/см}^3$  [66].

**15. 2,4,6-Triamino-3,5-dinitropyridine-1-oxide, TADNPyO,  $C_5H_6O_5N_6$ ,  
 $M = 230,14$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,06	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	1

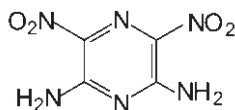
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,06 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 3 + 5,41 = 120,25 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 230,14/120,25 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,876 \text{ г/см}^3$  [66].

**16. 2,6-Diamino-3,5-dinitropyrazine, ANPZ,  $C_4H_4O_4N_6$ ,  
 $M = 200,11$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,39	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2
			$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2

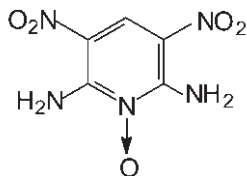
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,39 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 = 107,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 200,11/107,43 = 1,84 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [67].

17. 2,6-Diamino-3,5-dinitropyridine-1-oxide, ANPyO,  $C_5H_5O_5N_5$ ,  
 $M = 215,13$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,06	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	1
			$(C_{ar,het})-H$	7,96	1

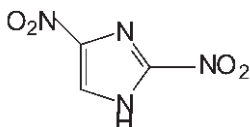
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,06 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 + 5,41 + 7,96 = 116,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 215,13/116,47 = 1,85$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,878 г/см<sup>3</sup> [66].

18. 2,4 Dinitroimidazole, 2, 4-DNI,  $C_3H_2O_4N_4$ ,  $M = 158,07$  г/моль



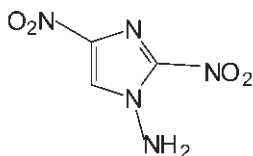
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	25,79	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(N_{het})-H$	5,63	1


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 25,79 + 25,78 \cdot 2 + 7,96 + 5,63 = 90,94 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 158,07/90,94 = 1,74$  г/см<sup>3</sup>.

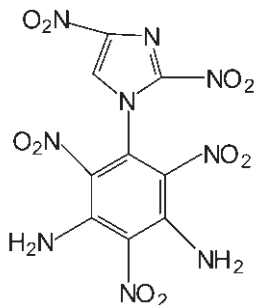
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,770 г/см<sup>3</sup> [66].



**19. 1-Amino-2,4-dinitroimidazole, ADNI,  $C_3H_3O_4N_5$ ,** $M = 173,09$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	25,79	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 25,79 + 25,78 \cdot 2 + 7,96 + 11,74 = 97,05 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 173,09/97,05 = 1,78$  г/см<sup>3</sup>.Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,75 г/см<sup>3</sup> [66].**20. 1-(3,5-Diamino-2,4,6-trinitophenyl)-2,4-dinitroimidazole,  $C_9H_5O_{10}N_9$ ,** $M = 399,19$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	25,79	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
	23,52	1	$(C_{ar})-(N_{het})$	2,28	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	5	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1



Мольный объем:

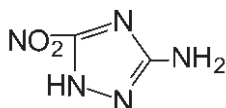
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,79 + 25,78 \cdot 5 + 7,96 + 11,74 \cdot 2 + 2,28 = 211,93 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 399,19/211,93 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,83 \text{ г/см}^3$  [66].

21. 3-Amino-5-nitro-1,2,4-triazole, ANTA,  $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2\text{N}_5$ ,

$M = 129,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	11,74	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	1	$(\text{N}_{\text{het}})-\text{H}$	5,63	1

Мольный объем:

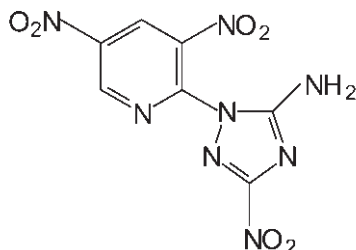
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 + 25,78 + 11,74 + 5,63 = 71,83 \text{ см}^3/\text{моль}.$$



Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 129,08/71,83 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,82 \text{ г/см}^3$  [66].

22. 2-(5-Amino-3-nitro-1,2,4-triazolyl)-3,5-dinitropyridine, PRAN,

$\text{C}_7\text{H}_4\text{O}_6\text{N}_8$ ,  $M = 296,16 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
	28,06	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
			$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
			$(C_{het})-(N_{het})$	1,16	1

Мольный объем:

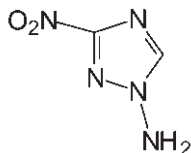
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 + 28,06 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 11,74 + 1,16 = 162,90 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 296,16/162,90 = 1,82 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,815 \text{ г/см}^3$  [66].

### 23. 1-Amino-3-nitro-1,2,4-triazole, 1-ANTA, $C_2H_3O_2N_5$ ,

$M = 129,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1

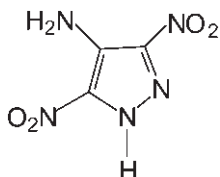
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 + 25,78 + 11,74 + 7,96 = 74,16 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 129,08/74,16 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,70 \text{ г/см}^3$  [66].

**24. 4-amino-3,5-dinitropyrazole, LLM-116, C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>O<sub>4</sub>N<sub>5</sub>,  
M = 173,09 г/моль**

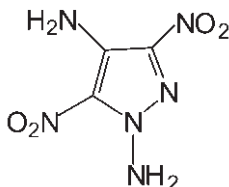



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(N_{het})-H$	5,63	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 + 5,63 = 91,72 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 173,09/91,72 = 1,89 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,900 г/см<sup>3</sup> [66].

**25. 1,4-Diamino-3,5-dinitropyrazole, DADNP, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>O<sub>4</sub>N<sub>6</sub>,  
M = 188,10 г/моль**

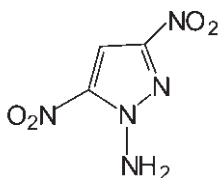



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 = 97,83 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 188,10/97,83 = 1,92 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,88 г/см<sup>3</sup> [66].

**26. 1-Amino-3,5-dinitropyrazole, 1,3,5-ADNP,  $C_3H_3O_4N_5$ ,  
 $M = 173,09$  г/моль**



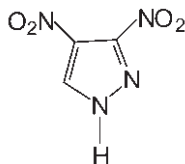
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 + 7,96 = 94,05 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 173,09/94,05 = 1,84 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,810 \text{ г/см}^3$  [66].

**27. 3,4-Dinitropyrazole, 3,4-DNP,  $C_3H_2O_4N_4$ ,  $M = 158,073$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	1	$(N_{het})-H$	5,63	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 + 25,78 \cdot 2 + 7,96 + 5,63 = 87,94 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 158,07/87,94 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,791 \text{ г/см}^3$  [66].

28. 4-Amino-3,7,8-trinitropyrazolo-[5,-1c1,2,4]triazine, РТХ,  $C_5H_2O_6N_8$ ,  
 $M = 270,12$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het}$	4,00	4	$(C_{het})-N=(N_{het})$	7,64	3
$C_{ar,het}(as)$	6,86	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
$N_{het(as)}$	5,38	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1

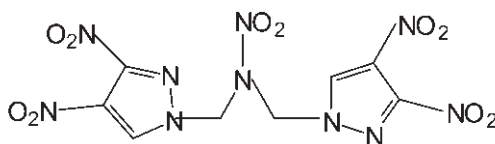
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,00 \cdot 4 + 6,86 + 5,38 + 7,64 \cdot 3 + 25,78 \cdot 3 + 11,74 = \\ = 140,24 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 270,12/140,24 = 1,93$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,946 г/см<sup>3</sup> [67].

29. [Bis(3,4-dinitropyrazol-1-yl)-N-methyl]-N-nitroamine,  $C_8H_6O_{10}N_{10}$ ,  
 $M = 402,19$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	2	$-CH_2-$	14,77	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	4	$>NNO_2$	17,69	1
$(C_{ar,het})-H$	7,96	2			

Мольный объем:

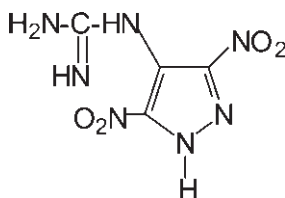
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 \cdot 2 + 25,78 \cdot 4 + 14,77 \cdot 2 + 17,69 + 7,96 \cdot 2 = 211,85 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 402,19/211,85 = 1,90 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,86 \text{ г/см}^3$  [66].

**30. 4-Guanidino-3,5-dinitropyrazole, GDNP,  $\text{C}_4\text{H}_5\text{O}_4\text{N}_7$ ,**

$M = 215,13 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	22,79	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{NH}-$	3,83	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	2	$\begin{matrix} (\text{N}) \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{NH} \\ \diagup \\ (\text{N}) \end{matrix}$	15,75	1
$(\text{N}_{\text{het}})-\text{H}$	5,63	1	$-\text{NH}_2$	15,52	1

Мольный объем:

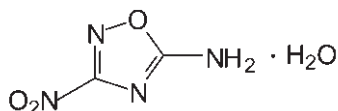
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 22,79 + 25,78 \cdot 2 + 5,63 + 3,83 + 15,75 + 15,52 = 115,08 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 215,13/115,08 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [66].

**31. 3-Amino-5-nitro-1,2,4-oxadiazole hydrate, NOA (hydrate),**

$\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_3\text{N}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $M = 148,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het}$	3,92	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$=N-$	7,89	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24	1	$H_2O$	15,90	1

Мольный объем:

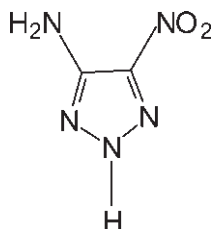
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 3,92 \cdot 2 + 7,89 \cdot 2 + 9,24 + 25,78 + 11,74 + 15,90 = 86,28 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 148,08/86,28 = 1,72 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,723 \text{ г/см}^3$  [66].

### 32. 4-Amino-5-nitro-1,2,3-triazole, ANTZ, $C_2H_3O_2N_5$ ,

$M = 129,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,31	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1	$(N_{het})-H$	5,63	1

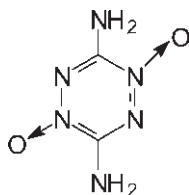
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,31 + 25,78 + 11,74 + 5,63 = 71,46 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 129,08/71,46 = 1,81 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,835 \text{ г/см}^3$  [66].

**33. 3,6-Diamino-1,2,4,5-tetrazine-1,4-dioxide, LAX-112, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>N<sub>6</sub>,  
M = 144,09 г/моль**



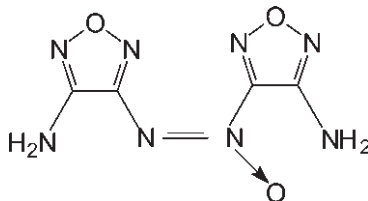
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	36,94	1	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	2			



Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 36,94 + 14,96 \cdot 2 + 5,41 \cdot 2 = 77,68 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 144,09/77,68 = 1,85 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,86 \text{ г/см}^3$  [66].

**34. 4,4'-Diamino-3,3'- azoxyfurazan, DAAF, C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>3</sub>N<sub>8</sub>,  
M = 212,13 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$ 	27,13	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	2			

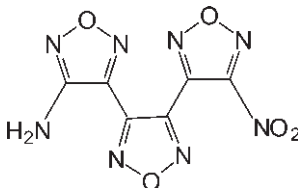
Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 14,96 \cdot 2 + 27,13 = 124,93 \text{ см}^3/\text{моль}$ .


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 212,13/124,93 = 1,70 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,747 \text{ г/см}^3$  [66].



**35. 3-(4-Amino-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-4-(3-nitro-1,2,5-oxadiazol-4-yl)-1,2,5-oxadiazole, LLM-175, C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>O<sub>5</sub>N<sub>8</sub>, M = 266,13 г/моль**



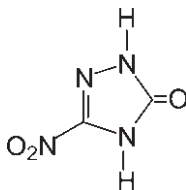
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	3	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	1	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 3 + 14,96 + 25,78 + 1,97 \cdot 2 = 146,50 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 266,13/146,50 = 1,81 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,782 г/см<sup>3</sup> [66].

**36. 3-Nitro-1,2,4-triazol-5-one, NTO, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, M = 130,06 г/моль**

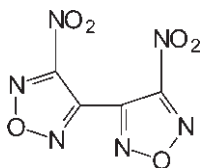



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het}$	3,92	1	$(N_{het})-H$	5,63	2
$=N-$	7,89	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$-N-$	5,27	2	$(N_c) \rangle C=O \cdots (C_c) \rangle NH$ $(N_c)$	-2,35	2
$>C=O$	14,10	1			

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 3,92 + 7,89 + 5,27 \cdot 2 + 14,10 + 5,63 \cdot 2 + 25,78 - 2,35 \cdot 2 = 68,79 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 130,06/68,79 = 1,89 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,913 г/см<sup>3</sup> [66].

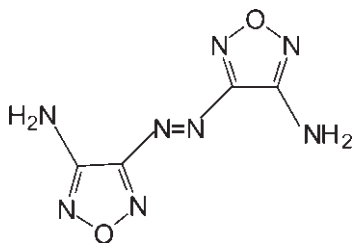
37. 4,4'-Dinitrodifurazan-3,3'-diyl,  $C_4O_6N_6$ ,  $M = 228,08$  г/моль


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 1,97 = 121,41 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 228,08/121,41 = 1,88$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,85 г/см<sup>3</sup> [9].

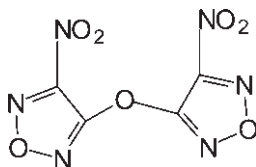
38. 4,4'-Diamino-3,3'- azofurazan,  $C_4H_4O_2N_8$ ,  $M = 196,13$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	13,87	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	2			

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 14,96 \cdot 2 + 13,87 = 111,67 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 196,13/111,67 = 1,76$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,73 г/см<sup>3</sup> [9].

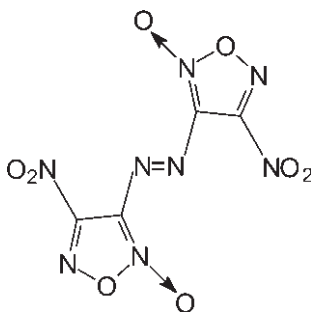
**39. 4,4'-bisnitrofurazan-3,3'-diyl ester,  $C_4O_7N_6$ ,  $M = 244,08$  г/моль**


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het})-O-(C_{ar,het})$	8,46	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 8,46 = 127,90 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 244,08/127,90 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,907 \text{ г/см}^3$  [67].

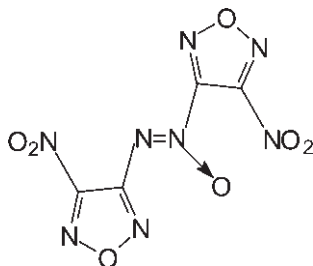
**40. 4,4'-Dinitroazofuroxane,  $C_4O_8N_8$ ,  $M = 288,09$  г/моль**




Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	39,78	2	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	13,87	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 39,78 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 13,87 = 144,99 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 288,09/144,99 = 1,99 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,002 \text{ г/см}^3$  [68].

41. 4,4'-Dinitroazoxyfurazane,  $C_4O_7N_8$ ,  $M = 272,09$  г/моль

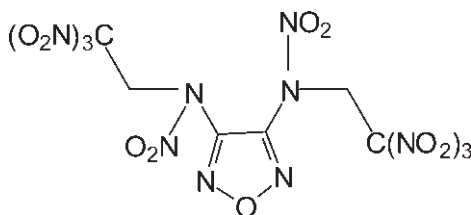
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$ 	27,13	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 27,13 = 146,57 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 272,09/146,57 = 1,85$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,82 г/см<sup>3</sup> [9].

42. 3,4-Bis(2,2,2-trinitroethylnitramino)furazan, BTNEDNAF,  $C_6H_4O_{17}N_{12}$ ,  $M = 516,16$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	1	$-CH_2-$	14,77	2
$(C_{het})-N-NO_2$	27,67	2	$-C(NO_2)_3$	75,40	2

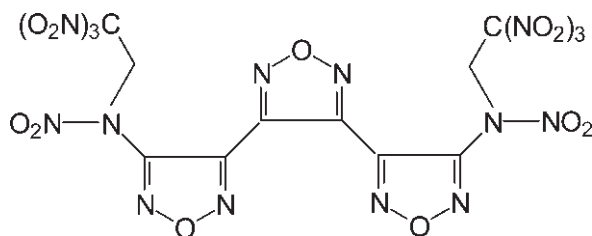
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 27,67 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 75,40 \cdot 2 = 269,62 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 516,16/269,62 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,900 \text{ г/см}^3$  [9].

43. N,N'-([3,3':4',3''-ter(1,2,5-oxadiazole)]-4,4''-diyl)bis[N-(2,2,2-trinitroethyl)nitramine], LLM-211,  $\text{C}_{10}\text{H}_4\text{O}_{19}\text{N}_{16}$ ,  $M = 652,23 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	3	$-\text{CH}_2-$	14,77	2
$(\text{C}_{\text{het}})-\text{N}-\text{NO}_2$	27,67	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	2
			$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	2

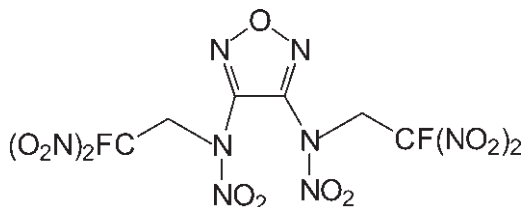
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 3 + 27,67 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 75,40 \cdot 2 + 1,97 \cdot 2 = 341,44 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 652,23/341,44 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,880 \text{ г/см}^3$  [9].

44. N,N'-(1,2,5-Oxadiazole-3,4-diyl)bis[N-(2-fluoro-2,2-dinitroethyl) nitramine], LLM-209,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{O}_{13}\text{N}_{10}\text{F}_2$ ,  $M = 462,15 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	1	$-\text{CH}_2-$	14,77	2
$(\text{C}_{\text{het}})-\text{N}-\text{NO}_2$	27,67	2	$-\text{C}(\text{NO}_2)_2\text{F}$	63,85	2

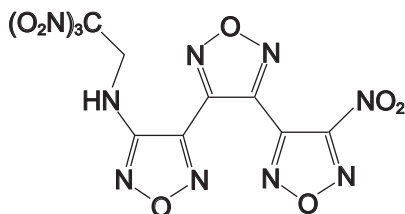
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 27,67 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 63,85 \cdot 2 = 246,52 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 462,15/246,52 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,890 \text{ г/см}^3$  [9].

45. 4''-Nitro-N-(2,2,2-trinitroethyl)-[3,3':4',3''-ter(1',2',5'-oxadiazol)]-4-amine, LLM-206,  $\text{C}_8\text{H}_3\text{O}_{11}\text{N}_{11}$ ,  $M = 429,18 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	3	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	2
$-\text{NH}-$	6,03	1	$-\text{CH}_2-$	14,77	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	1	$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1

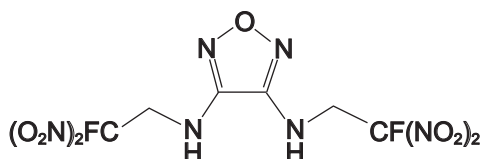
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 3 + 6,03 + 14,77 + 75,40 + 25,78 + 1,97 \cdot 2 = 227,74 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 429,18/227,74 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,845 \text{ г/см}^3$  [204].

46. N<sub>3</sub>,N<sub>4</sub>-Bis(2-fluoro-2,2-dinitroethyl)-1,2,5-oxadiazole-3,4-diamine, LLM-208, C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>O<sub>9</sub>N<sub>8</sub>F<sub>2</sub>, M = 372,16 г/моль



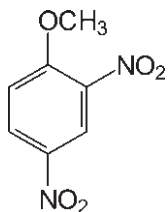
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	1	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2
$-NH-$	6,03	2	$-CH_2-$	14,77	2
			$-C(NO_2)_2F$	63,85	2

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 6,03 \cdot 2 + 14,77 \cdot 2 + 63,85 \cdot 2 = 203,24 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 372,16/203,24 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,84 г/см<sup>3</sup> [204].

47. 2,4-Dinitroanisole, C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>5</sub>N<sub>2</sub>, M = 198,13 г/моль



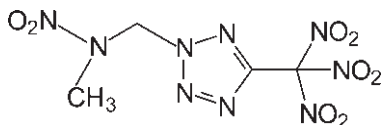
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{ar,het})-OCH_3$	26,99	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 2 + 7,96 \cdot 3 + 26,99 = 125,95 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 198,13/125,95 = 1,57 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,546 г/см<sup>3</sup> [67].

48. 2-(Ethyl-N-methyl-nitramine)-5-(trinitromethyl)tetrazole,  
NAPTNMTz,  $C_4H_5O_8N_9$ ,  $M = 307,13$  г/моль



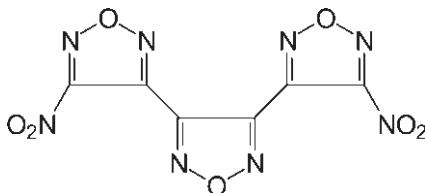
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$(N_{het})-CH_2^-$	16,72	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-C(NO_2)_3$	80,17	1	$>NNO_2$	17,69	1
			$-CH_3$	28,52	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 80,17 + 16,72 + 17,69 + 28,52 = 175,39$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{МК} = M/V = 307,14/175,39 = 1,75$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{МК}$  составляет 1,750 г/см<sup>3</sup> [9].

49. 3,4-Bis(4-nitro-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-1,2,5-oxadiazole, LLM-172,  
NTF,  $C_6O_7N_8$ ,  $M = 296,11$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	3	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2			

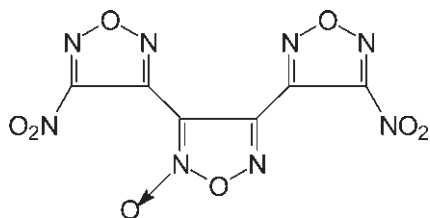
Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 3 + 25,78 \cdot 2 + 1,97 \cdot 2 = 157,32$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{МК} = M/V = 296,11/157,32 = 1,88$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{МК}$  составляет 1,836 г/см<sup>3</sup> [205], 1,865 г/см<sup>3</sup> [207].



**50. 3,4-Bis(4-nitro-1,2,5-oxadiazol-3-yl)-1,2,5-oxadiazole-2-oxide, BNFF, C<sub>6</sub>O<sub>8</sub>N<sub>8</sub>, M = 312,11 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2
	39,78	1	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2

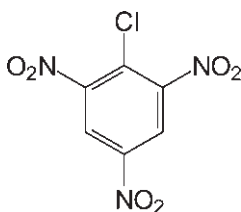
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 39,78 + 25,78 \cdot 2 + 1,97 \cdot 2 = 163,16 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 312,11/163,16 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,875 г/см<sup>3</sup> [205].

**51. 2,4,6-Trinitrochlorobenzene, Picrylchloride, C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>O<sub>6</sub>N<sub>3</sub>Cl, M = 247,55 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3	$(C_{ar,het})-Cl$	22,12	1

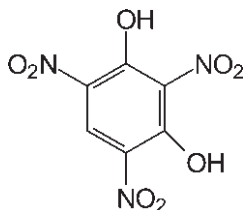
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 22,12 = 138,90 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 247,55/138,90 = 1,78 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,76 \text{ г/см}^3$  [67].

52. Stifnic acid, 2,4,6-trinitroresorcinol,  $\text{C}_6\text{H}_3\text{O}_8\text{N}_3$ ,  $M = 245,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	3	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{OH}$	12,49	2

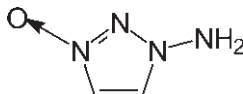
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 + 12,49 \cdot 2 = 133,80 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 245,10/133,80 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,829 \text{ г/см}^3$  [64].

53. 1-Oxide-3-amino-1,2,3-triazole, DPX2,  $\text{C}_2\text{H}_4\text{ON}_4$ ,  $M = 100,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,31	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	11,74	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	2	$(\text{N}_{\text{het}}) \rightarrow \text{O}$	5,41	1

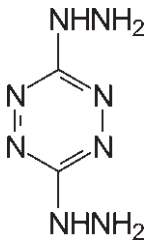
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,31 + 11,74 + 7,96 \cdot 2 + 5,41 = 61,38 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 100,08/61,38 = 1,63 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,610 \text{ г/см}^3$  [9].

54. 3,6-Dihydrazino-1,2,4,5-tetrazine, DHT,  $\text{C}_2\text{H}_6\text{N}_8$ ,  $M = 142,13 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	36,94	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{NHNH}_2$	24,50	2

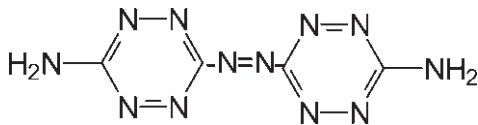
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 36,94 + 24,50 \cdot 2 = 85,94 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 142,13/85,94 = 1,65 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,61 \text{ г/см}^3$  [62].

55. 3,3'-Azobis-(6-amino-1,2,4,5-tetrazine),  $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_{12}$ ,  $M = 220,16 \text{ г/моль}$



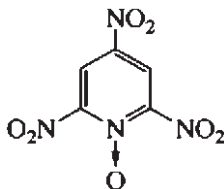
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	36,94	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{N}=\text{N} - (\text{C}_{\text{ar,het}})$	13,87	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NH}_2$	14,96	2			


$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 36,94 \cdot 2 + 13,87 + 14,96 \cdot 2 = 117,67 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 220,16/117,67 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,84 \text{ г/см}^3$  [62].

56. 2,4,6-Trinitropyridine-1-oxide, TNPyOx,  $\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_7\text{N}_4$ ,  
 $M = 230,10 \text{ г/моль}$



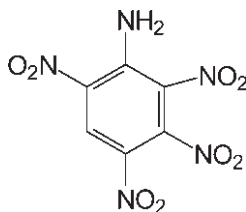
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,06	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{H}$	7,96	2
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	3	$(\text{N}_{\text{het}}) \rightarrow \text{O}$	5,41	1


$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,06 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 5,41 = 126,73 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 230,10/126,73 = 1,82 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,86 \text{ г/см}^3$  [62].

57. 2,3,4,6-Tetranitroaniline,  $\text{C}_6\text{H}_3\text{O}_8\text{N}_5$ ,  $M = 273,12 \text{ г/моль}$



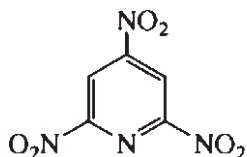
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{H}$	7,96	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	4	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NH}_2$	11,74	1


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 4 + 7,96 + 11,74 = 146,34 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 273,12/146,34 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,867 \text{ г/см}^3$  [10].

58. 2,4,6-Trinitropyridine, TNPy,  $\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_6\text{N}_4$ ,  $M = 214,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,06	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	2
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	3			

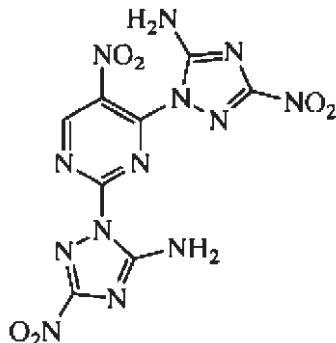
Мольный объем:



$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,06 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 = 121,32 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 214,10/121,32 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,77 \text{ г/см}^3$  [62].

59. 2,4-Bis-(5-amino-3-nitro-1,2,4-triazol-1-yl)pyrimidine, IHNX,  $\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_6\text{N}_{13}$ ,  $M = 379,21 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
	34,80	1	$(C_{ar,het})-H$	7,96	1
			$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
			$(C_{het})-(N_{het})$	1,16	2

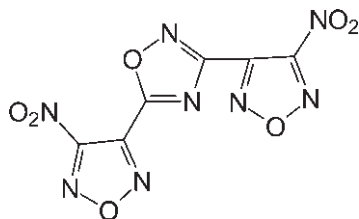
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 34,80 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 + 11,74 \cdot 2 + 1,16 \cdot 2 = 203,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 379,21/203,26 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,865 г/см<sup>3</sup> [62].

60. 3,5-Bis-(4-nitrofuran-3-yl)-1,2,4-oxadiazole, LLM-191,  $C_6O_7N_8$ ,  
 $M = 296,12 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$=N-$	7,89	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24	1
$C_{ar,het}$	3,92	2	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2

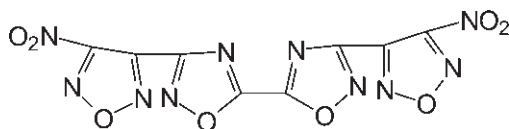
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 3,92 \cdot 2 + 7,89 \cdot 2 + 9,24 + 1,97 \cdot 2 = 156,24 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 296,12/156,24 = 1,90 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,90 г/см<sup>3</sup> [208].

**61. Bis-3,3'-(3''-nitrofurazan-4''-yl)-bis(1,2,4-oxadiazol-5,5'-diyl),  
LLM-200, C<sub>8</sub>O<sub>8</sub>N<sub>10</sub>, M = 364,15 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$=N-$	7,89	4
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24	2
$C_{ar,het}$	3,92	4	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	3

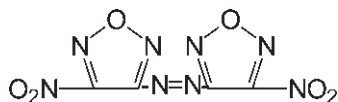
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 1,97 \cdot 3 + 3,92 \cdot 4 + 7,89 \cdot 4 + 9,24 \cdot 2 = 191,07 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 364,15/191,07 = 1,91 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,94 \text{ г/см}^3$  [208].

**62. 4,4'-Dinitroazafurazane, C<sub>4</sub>O<sub>6</sub>N<sub>8</sub>, M = 256,09 г/моль**



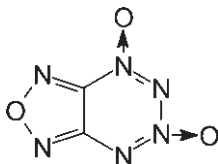
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	33,94	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2
			$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	23,01	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 23,01 = 142,45 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 256,09/142,45 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,75 \text{ г/см}^3$  [67].

63. Furazanyltetrazine-1,3-dioxide, FTDO,  $C_2O_3N_6$ ,  $M = 156,06$  г/моль

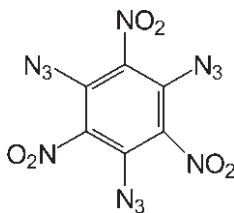
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het}(as)$	6,86	2	$(C_{het})-N=(N_{het})$	7,64	2
$(N_{het})-O-(N_{het})$	11,50	1	$(N_{het})-N=(N_{het})$	9,89	2
$(C_{het}O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	2	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	2

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 11,50 + 6,40 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 9,89 \cdot 2 + 5,41 \cdot 2 = 83,90 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 156,06/83,90 = 1,86$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,85 г/см<sup>3</sup> [69].

64. 1,3,5-Trinitro-2,4,6-triazidobenzene,  $C_6O_6N_{12}$ ,  $M = 336,14$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het})-N_3$	30,78	3
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3			

Мольный объем:

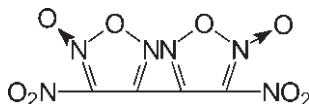
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 30,78 \cdot 3 = 193,20 \text{ см}^3/\text{моль}.$$




Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 336,14/193,20 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,74 \text{ г/см}^3$  [68].

**65.** 4,4'-Dinitro-3,3'-difuroxane,  $\text{C}_4\text{O}_8\text{N}_6$ ,  $M = 260,08 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	39,78	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	2			

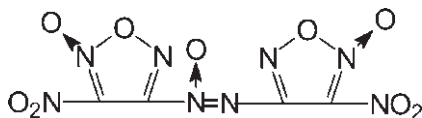
Мольный объем:



$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 39,78 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 1,97 = 133,09 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 260,08/133,09 = 1,95 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,96 \text{ г/см}^3$  [68].

**66.** 4,4'-Dinitroazoxyfuroxane,  $\text{C}_4\text{O}_9\text{N}_8$ ,  $M = 304,09 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	39,78	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{N}=\text{N}-(\text{C}_{\text{ar,het}})$	27,14	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	2			

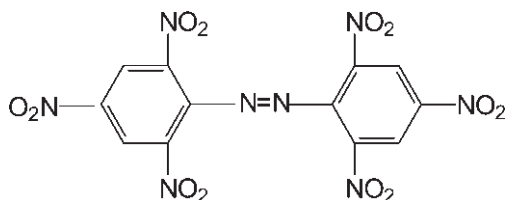
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 39,78 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 27,14 = 158,25 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 304,09/158,25 = 1,92 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,88 \text{ г/см}^3$  [69].

**67. 2,2',4,4',6,6'-Hexanitroazabenzene, HNAB,  $C_{12}H_4O_{12}N_8$ ,  
 $M = 452,21$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	4
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	6	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	13,87	1

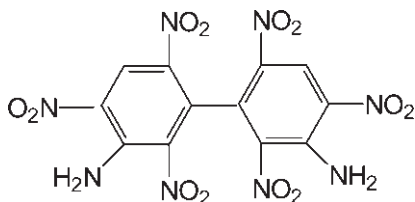
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 2 + 25,78 \cdot 6 + 13,87 + 7,96 \cdot 4 = 247,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 452,21/247,43 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,80 \text{ г/см}^3$  [31].

**68. 3,3'-Diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphenyl, DIPAM,  $C_{12}H_6O_{12}N_8$ ,  
 $M = 454,22$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	6	$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	2
			$(C_{ar})-(C_{ar})$	5,39	1

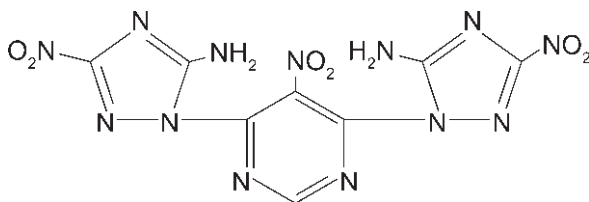
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 2 + 25,78 \cdot 6 + 7,96 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 + 5,39 = 246,51 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 454,22/246,51 = 1,84 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,79 \text{ г/см}^3$  [61].

**69.** 5-Nitro-4,6-bis(5-amino-3-nitro-1H-1,2,4-triazole-1-yl)pyrimidine,  $\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_6\text{N}_{13}$ ,  $M = 379,21 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})\text{-NH}_2$	11,74	2
	34,80	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})\text{-NO}_2$	25,78	3
$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{-H}$	7,96	1	$(\text{C}_{\text{het}})\text{-(N}_{\text{het}})$	1,16	2

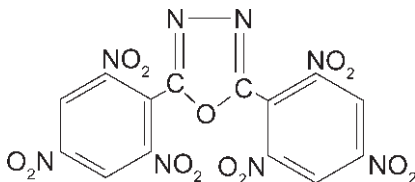
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 34,80 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 + 11,74 \cdot 2 + 1,16 \cdot 2 = 203,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 379,21/203,26 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,86 \text{ г/см}^3$  [61].

**70.** 2,5-Dipicryl-1,3,4-oxadiazole, DPO,  $\text{C}_{14}\text{H}_4\text{O}_{13}\text{N}_8$ ,  $M = 492,23 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	2	$C_{ar,het}$	3,92	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	6	$=N-$	7,89	2
$(C_{ar,het})-H$	7,96	4	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24	1
			$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	2

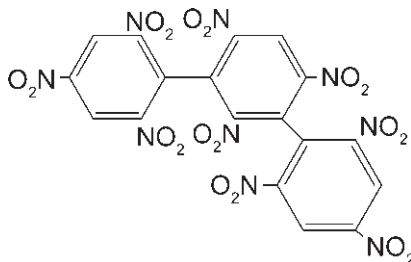
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 2 + 25,78 \cdot 6 + 7,96 \cdot 4 + 3,92 \cdot 2 + 7,89 \cdot 2 + 9,24 + 1,97 \cdot 2 = 270,36 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 492,23/270,36 = 1,82 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,77 \text{ г/см}^3$  [61].

**71.** 2,2',2'',4,4',4'',6,6',6''-Nonanitroterphenyl, NONA,  $C_{18}H_5O_{18}N_9$ ,  
 $M = 635,28 \text{ г/моль}$



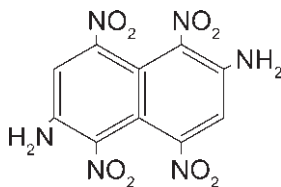
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	3	$(C_{ar,het})-H$	7,96	5
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	9	$(C_{ar})-(C_{ar})$	5,39	2

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 \cdot 3 + 25,78 \cdot 9 + 7,96 \cdot 5 + 5,39 \cdot 2 = 353,16 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 635,28/353,16 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,78 \text{ г/см}^3$  [61].

**72. 2,6-Diamino-1,4,5,8-tetranitronaphthalene, C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>N<sub>6</sub>,**
***M* = 338,19 г/моль**


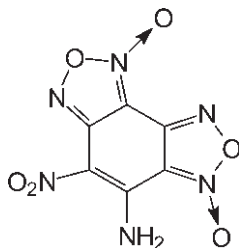
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	<i>V<sub>i</sub></i>	Число	Вид	<i>V<sub>i</sub>, δ<sub>i</sub></i>	Число
C <sub>ar,het</sub> (as)	6,86	2	(C <sub>ar,het</sub> )–H	7,96	2
C <sub>ar,het</sub>	4,00	8	(C <sub>ar,het</sub> ,N <sub>het</sub> )–NH <sub>2</sub>	11,74	2
(C <sub>ar,het</sub> ,N <sub>het</sub> )–NO <sub>2</sub>	25,78	4			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 4,00 \cdot 8 + 25,78 \cdot 4 + 7,96 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 = 188,24 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

 Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 338,19/188,24 = 1,80 \text{ г/см}^3$ .

 Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,78 г/см<sup>3</sup> [61].

**73. Aminonitrobenzodifuroxane, CL-18, C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>O<sub>6</sub>N<sub>6</sub>, *M* = 254,12 г/моль**


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	<i>V<sub>i</sub></i>	Число	Вид	<i>V<sub>i</sub>, δ<sub>i</sub></i>	Число
C <sub>ar,het</sub> (as)	6,86	4	(N <sub>het</sub> )→O	5,41	2
C <sub>ar,het</sub>	4,00	2	(C <sub>ar,het</sub> ,N <sub>het</sub> )–NO <sub>2</sub>	25,78	1
(C <sub>het</sub> ,O <sub>het</sub> )–N=(C <sub>het</sub> )	6,40	4	(C <sub>ar,het</sub> ,N <sub>het</sub> )–NH <sub>2</sub>	11,74	1
(N <sub>het</sub> )–O–(N <sub>het</sub> )	11,50	2			

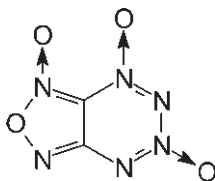
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 4 + 4,00 \cdot 2 + 6,40 \cdot 4 + 11,50 \cdot 2 + 5,41 \cdot 2 + 25,78 + 11,74 = 132,38 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 254,12/132,38 = 1,92 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,93 \text{ г/см}^3$  [67].

74. Furoxanyltetrazine-1,3-dioxide,  $\text{C}_2\text{O}_4\text{N}_6$ ,  $M = 172,06 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{C}_{\text{ar,het}}(\text{as})$	6,86	2	$(\text{C}_{\text{het}})-\text{N}=(\text{N}_{\text{het}})$	7,64	2
$(\text{N}_{\text{het}})-\text{O}-(\text{N}_{\text{het}})$	11,50	1	$(\text{N}_{\text{het}})-\text{N}=(\text{N}_{\text{het}})$	9,89	2
$(\text{C}_{\text{het}}\text{O}_{\text{het}})-\text{N}=(\text{C}_{\text{het}})$	6,40	2	$(\text{N}_{\text{het}}) \rightarrow \text{O}$	5,41	3

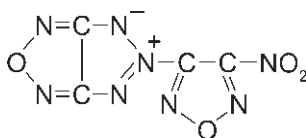
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 11,50 + 6,40 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 9,89 \cdot 2 + 5,41 \cdot 3 = 89,31 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 172,06/89,31 = 1,92 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,88 \text{ г/см}^3$  [69].

75. 1,2,3-triazolo- $\text{N}^2$ -1',2',5'-oxadiazole-4''-nitrofurazane,  $\text{C}_4\text{O}_4\text{N}_8$ ,  
 $M = 224,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het(as)}$	6,86	2	$\begin{array}{c} \text{—N—} \\   \end{array}$	5,27	1
$(N_{het})\text{—O—}(N_{het})$	11,50	1		33,94	1
$(C_{het}O_{het})\text{—N=}(C_{het})$	6,40	2	$(C_{ar,het}, N_{het})\text{—NO}_2$	25,78	1
$(C_{het})\text{—N=}(N_{het})$	7,64	2	$(C_{het})\text{—}(N_{het})$	1,16	1

Мольный объем:

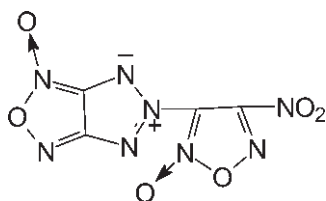
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 11,50 + 6,40 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 5,27 + 33,94 + 25,78 + 1,16 = 119,45 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 224,10/119,45 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,91 г/см<sup>3</sup> [69].

**76.** 1,2,3-triazolo- $N^2$ -1',2',5'-furoxane-4''-nitrofuroxane,  $C_4O_6N_8$ ,

$M = 256,10 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het(as)}$	6,86	2	$\begin{array}{c} \text{—N—} \\   \end{array}$	5,27	1
$(N_{het})\text{—O—}(N_{het})$	11,50	1		33,94	1
$(C_{het}O_{het})\text{—N=}(C_{het})$	6,40	2	$(C_{ar,het}, N_{het})\text{—NO}_2$	25,78	1
$(C_{het})\text{—N=}(N_{het})$	7,64	2	$(C_{het})\text{—}(N_{het})$	1,16	1
$(N_{het})\text{—}\rightarrow\text{O}$	5,41	2			

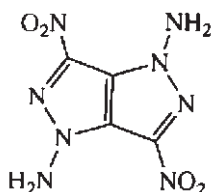
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 11,50 + 6,40 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 5,27 + 33,94 + 25,78 + 5,41 \cdot 2 + 1,16 = 130,27 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 256,10/130,27 = 1,97 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,96 \text{ г/см}^3$  [69].

77. 1,4-Diamino-3,6-dinitropyrazolo[4,3-*c*]pyrazole, LLM-119,  
 $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4\text{N}_8$ ,  $M = 228,13 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{C}_{\text{ar,het}}(\text{as})$	6,86	2	$(\text{C}_{\text{het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{N}-(\text{N}_{\text{het}})$	6,42	2
$\text{C}_{\text{ar,het}}$	4,00	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	2
$(\text{C}_{\text{het}})-\text{N}=(\text{N}_{\text{het}})$	7,64	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	11,74	2

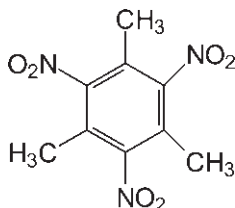
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 4,00 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 6,42 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 11,74 \cdot 2 = 124,88 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 228,13/124,88 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,845 \text{ г/см}^3$  [62].

78. 1,3,5-Trimethyl-2,4,6-trinitrobenzene,  $\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_6\text{N}_3$ ,  $M = 255,19 \text{ г/моль}$





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	23,52	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
			$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	3

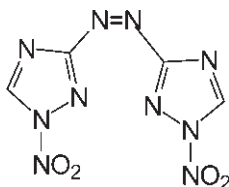
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 22,04 \cdot 3 = 166,98 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 255,19/166,98 = 1,53 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,48 \text{ г/см}^3$  [10].

**79.** 1,1'-dinitro-3,3'-azo-1,2,4-triazole, N-DNAT,  $C_4H_2O_4N_{10}$ ,  
 $M = 254,13 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	13,87	1

Мольный объем:

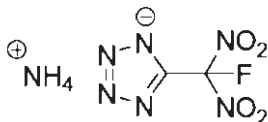
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 7,96 \cdot 2 + 13,87 = 138,71 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 254,13/138,71 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $1,81 \text{ г/см}^3$  [210].

## Органические соли и металлокомплексы

1. Ammonium 5- fluorodinitromethyl)-tetrazolate,  $C_2H_4O_4N_7F$ ,  
 $M = 209,10$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-C(NO_2)_2F$	62,55	1
			$+NH_4^+$	23,42	1

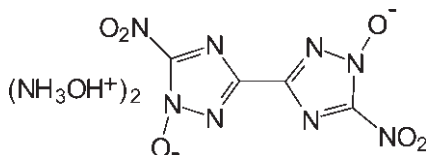
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 62,55 + 23,42 = 118,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 209,10/118,26 = 1,77 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,73 \text{ г/см}^3$  [77].

2. Dihydroxylammonium 3,3'-dinitro-5,5'-bis-1,2,4-triazole-1,1'-diolate, MAD-1X,  $C_4H_8O_8N_{10}$ ,  $M = 324,17$  г/моль



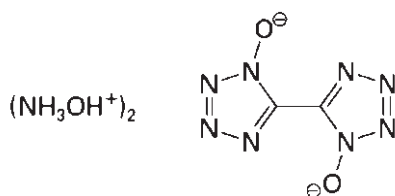
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(NH_{het})-\bar{O}$	6,98	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2	$+NH_3OH$	24,47	2
			$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1


$$\begin{aligned} \text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i &= 28,68 \cdot 2 + 6,98 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + \\ &+ 1,97 + 24,47 \cdot 2 = 173,79 \text{ см}^3/\text{моль}. \end{aligned}$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 324,17/173,79 = 1,87 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,900 \text{ г/см}^3$  [9].

3. Bis(hydroxylammonium) 5,5'-bis(tetrazole-1,1'-diolate), ТКХ-50,  
 $C_2H_8O_4N_{10}$ ,  $M = 236,15$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$NH_3OH^+$	24,47	2
$(NH_{het}) - \bar{O}$	6,98	2	$(C_{ar,het}) - (C_{het})$	1,97	1

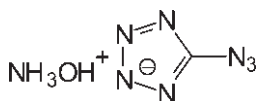
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 6,98 \cdot 2 + 1,97 + 24,47 \cdot 2 = 129,45 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 236,15/129,45 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,877 \text{ г/см}^3$  [206].

4. Hydroxylammonium 5-azidotetrazolate,  $CH_4ON_8$ ,  $M = 144,10$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$(C_{ar,het}) - N_3$	30,78	1
			$+ NH_3OH^+$	24,47	1

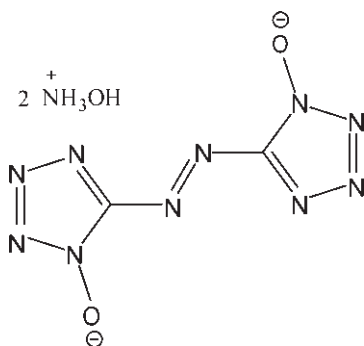
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 30,78 + 24,47 = 87,54 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 144,10/87,54 = 1,64 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,619 \text{ г/см}^3$  [65].

5. Di(hydroxylammonium) 5,5'-azo-(tetrazole-1,1'-diolate),  $C_2H_8O_4N_{12}$ ,  
 $M = 264,17$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	2
$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	23,01	1	$^+NH_3OH$	24,47	2

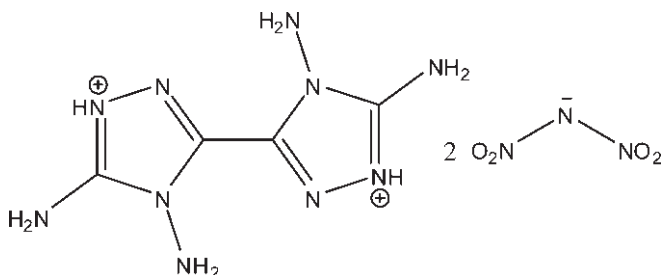
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 23,01 + 6,98 \cdot 2 + 24,47 \cdot 2 = 150,49 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 264,17/150,49 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,735 \text{ г/см}^3$  [44].

6. 3,3'-Bis(4,5-diamino-1,2,4-triazolium) bis(dinitroamide),  $C_4H_{10}O_8N_{16}$ ,  
 $M = 410,23$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(N_{het})-H$	5,63	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	4	${}^{-}N(NO_2)_2$	45,30	2
			$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1

Мольный объем:

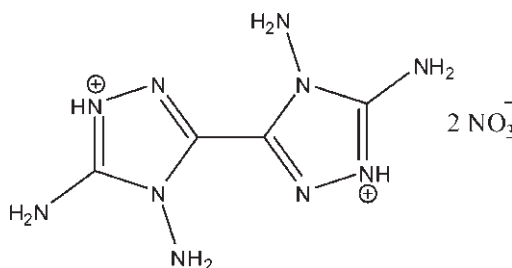
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 14,96 \cdot 4 + 5,63 \cdot 2 + 1,97 + 45,30 \cdot 2 = 221,03 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 410,23/221,03 = 1,85 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,826 \text{ г/см}^3$  [70].

7. 3,3'-Bis(4,5-diamino-1,2,4-triazolium) dinitrate,  $C_4H_{10}O_6N_{12}$ ,

$M = 322,20 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	${}^{-}NO_3$	29,02	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	4	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1
$(N_{het})-H$	5,63	2			

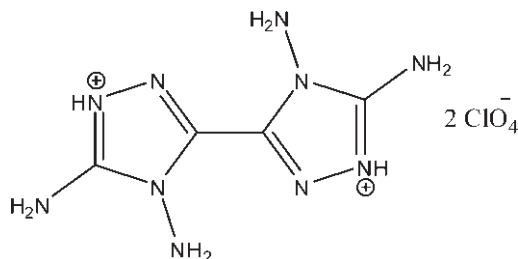
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 14,96 \cdot 4 + 5,63 \cdot 2 + 1,97 + 29,02 \cdot 2 = 188,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 322,20/188,47 = 1,71 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,746 \text{ г/см}^3$  [70].

8. 3,3'-Bis(4,5-diamino-1,2,4-triazolium) diperchlorate,  $C_4H_{10}O_8N_{10}Cl_2$ ,  
 $M = 397,09$  г/моль



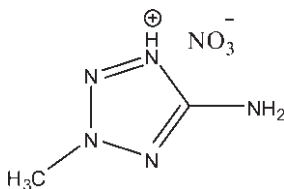
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(N_{het})-H$	5,63	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	4	$ClO_4^-$	41,83	2
			$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 14,96 \cdot 4 + 5,63 \cdot 2 + 1,97 + 41,83 \cdot 2 = 214,09$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 397,09/214,09 = 1,85$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,870 г/см<sup>3</sup> [70].

9. 5-Amino-3-methyltetrazolium -1N nitrate,  $C_2H_6O_3N_6$ ,  
 $M = 162,11$  г/моль



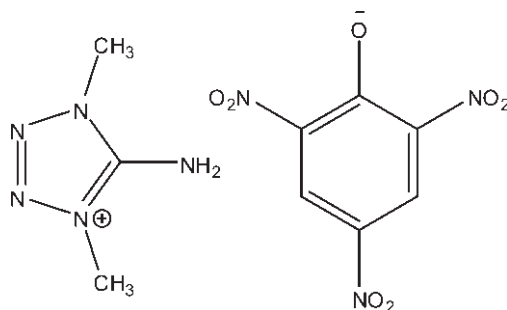
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$(N_{het})-H$	5,63	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	1	$NO_3^-$	29,02	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	11,74	1			



$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 22,04 + 11,74 + 5,63 + 29,02 = 100,72 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 162,11/100,72 = 1,61 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,620 \text{ г/см}^3$  [71].

**10. 5-Amino-1,4-dimethyltetrazolium -1N picrate,  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_6\text{N}_8$ ,  
 $M = 342,23 \text{ г/моль}$**



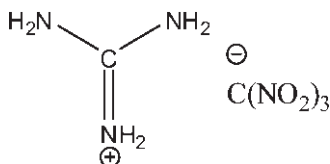
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1		23,52	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{CH}_3$	22,04	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	3
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	11,74	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{O}^-$	9,06	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{H}$	7,96	2			

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 22,04 \cdot 2 + 11,74 + 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 9,06 = 213,95 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 342,23/213,95 = 1,60 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,639 \text{ г/см}^3$  [71].

**11. Guanidinium nitroformate,  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_6\text{N}_6$ ,  $M = 210,11 \text{ г/моль}$**



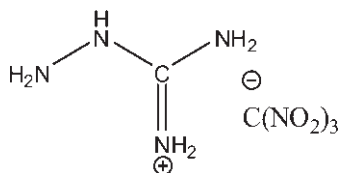
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N) \\ \diagup \\ C=NH_2^+ \\ \diagdown \\ (N) \end{array}$	20,61	1	$-NH_2$	15,52	2
			$^-C(NO_2)_3$	75,32	1

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 20,61 + 15,52 \cdot 2 + 75,32 = 126,97 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

$$\text{Плотность монокристалла: } \rho_{\text{МК}} = M/V = 210,11/126,97 = 1,65 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,670 г/см<sup>3</sup> [72].

## 12. Aminoguanidinium nitroformate, $C_2H_7O_6N_7$ , $M = 225,13$ г/моль



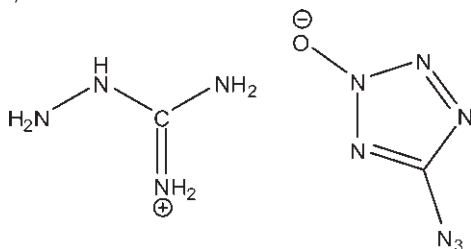
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N) \\ \diagup \\ C=NH_2^+ \\ \diagdown \\ (N) \end{array}$	20,61	1	$-NH-$	6,03	1
$-NH_2$	15,52	2	$^-C(NO_2)_3$	75,32	1

$$\text{Мольный объем: } V = \sum V_i + \sum \delta_i = 20,61 + 15,52 \cdot 2 + 6,03 + 75,32 = 133,00 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


$$\text{Плотность монокристалла: } \rho_{\text{МК}} = M/V = 225,13/133,00 = 1,69 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,740 г/см<sup>3</sup> [72].

## 13. Aminoguanidinium 5-azidotetrazole-2-olate, $C_2H_7ON_{11}$ , $M = 201,15$ г/моль





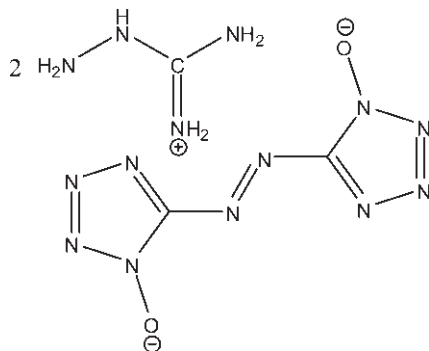
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N) \\ \diagdown \\ C=NH_2^+ \\ \diagup \\ (N) \end{array}$	20,61	1		32,29	1
$-NH_2$	15,52	2	$(C_{ar,het})-N_3$	30,78	1
$-NH-$	6,03	1	$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	1


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 20,61 + 15,52 \cdot 2 + 6,03 + 32,29 + 30,78 + 6,98 = 127,73 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 201,15/127,73 = 1,57 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,578 \text{ г/см}^3$  [73].

**14. Bis(aminoguanidinium) 5,5'-azo-(tetrazole-1,1'-diolate),  $C_4H_{14}O_2N_{18}$ ,  $M = 346,28 \text{ г/моль}$**



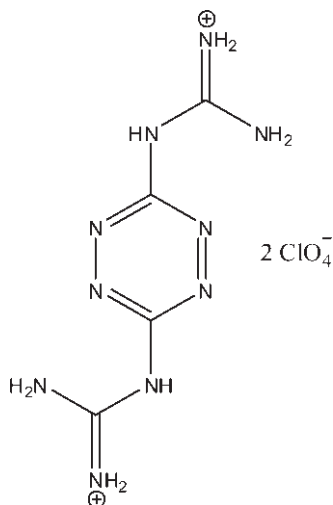
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$\begin{array}{c} (N) \\ \diagdown \\ C=NH_2^+ \\ \diagup \\ (N) \end{array}$	20,61	2
$(C_{ar,het})-N=N-(C_{ar,het})$	23,01	1	$-NH_2$	15,52	4
$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	2	$-NH-$	6,03	2

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 20,61 \cdot 2 + 15,52 \cdot 4 + 6,03 \cdot 2 + 32,29 \cdot 2 + 23,01 + 6,98 \cdot 2 = 216,91 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 346,28/216,91 = 1,60 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,637 \text{ г/см}^3$  [44].

**15. 3,6-Guanidinium-1,2,4,5-tetrazine diperchlorate,  $C_4H_{10}O_8N_{10}Cl_2$ ,  
 $M = 397,09$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{matrix} (N) \\ (N) \end{matrix} \text{C}=\text{NH}_2^+$	20,61	2		36,94	1
$-\text{NH}_2$	15,52	2	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
$(C_{ar,het})-\text{NH}-$	3,83	2			

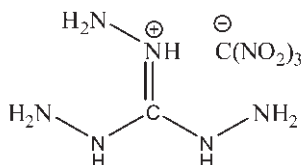
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 20,61 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 3,83 \cdot 2 + 36,94 + 41,83 \cdot 2 = 200,52 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 397,09/200,52 = 1,98$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет 1,977 г/см<sup>3</sup> [49].

**16. Triaminoguanidinium nitroformate,  $C_2H_9O_6N_9$ ,  $M = 255,13$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N) \diagup \\ (N) \diagdown \end{array} C \equiv NH^+ -$	19,32	1	$-NH-$	6,03	2
$-NH_2$	15,52	3	$^-C(NO_2)_3$	75,32	1

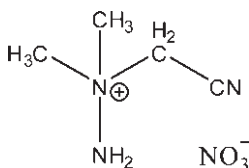
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 19,32 + 15,52 \cdot 3 + 6,03 \cdot 2 + 75,32 = 153,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 255,13/153,26 = 1,66 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,665 \text{ г/см}^3$  [72].

17. 1,1-Dimethyl-1- cyanomethylhydrazinium nitrate,  $C_4H_{10}O_3N_4$ ,  
 $M = 162,14 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (C) \diagup \\ (C) \diagdown \\ (C) \diagdown \end{array} N^+ - NH_2$	-18,17	1	$-CH_2^-$	14,77	1
$-CH_3$	28,52	2	$-C \equiv N$	21,00	1
			$^-NO_3$	29,02	1

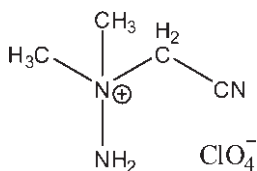
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = -18,17 + 28,52 \cdot 2 + 14,77 + 21,00 + 29,02 = 103,66 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 162,14/103,66 = 1,56 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,543 \text{ г/см}^3$  [71].

**18. 1,1-Dimethyl-1-cyanomethylhydrazinium perchlorate,**  
 $C_4H_{10}O_4N_3Cl$ ,  $M = 199,55$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (C) \diagup \\ (C) \text{---} N^+ \text{---} NH_2 \\ (C) \diagdown \end{array}$	-18,17	1	$-CH_2^-$	14,77	1
$-CH_3$	28,52	2	$-C \equiv N$	21,00	1
			$ClO_4^-$	41,83	1

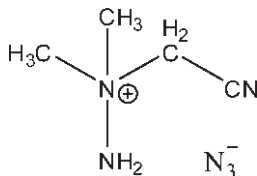
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = -18,17 + 28,52 \cdot 2 + 14,77 + 21,00 + 41,83 = 116,47 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 199,55/116,47 = 1,71$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,666 г/см<sup>3</sup> [71].

**19. 1,1-Dimethyl-1-cyanomethylhydrazinium azide,**  $C_4H_{10}N_6$ ,  
 $M = 142,17$  г/моль



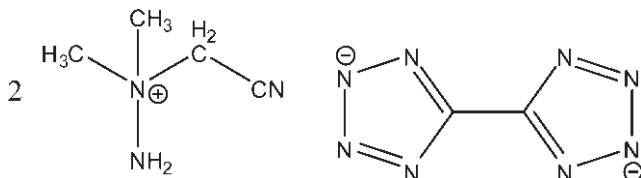
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (C) \diagup \\ (C) \text{---} N^+ \text{---} NH_2 \\ (C) \diagdown \end{array}$	-18,17	1	$-CH_2^-$	14,77	1
$-CH_3$	28,52	2	$-C \equiv N$	21,00	1
			$N_3^-$	27,59	1


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = -18,17 + 28,52 \cdot 2 + 14,77 +$   
 $+ 21,00 + 27,59 = 102,23 \text{ см}^3/\text{моль}.$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 142,17/102,23 = 1,39 \text{ г/см}^3.$

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,421 \text{ г/см}^3$  [71].

**20.** Bis(1,1-dimethyl-1-cyanomethylhydrazinium) 5,5'-ditetrazolate,  
 $\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{N}_{14}$ ,  $M = 336,37 \text{ г/моль}$



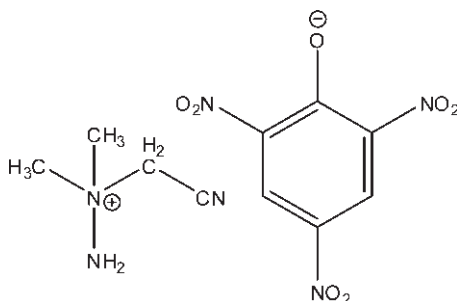
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} \text{(C)} \diagup \\ \text{(C)} \diagup \text{N}^+ \text{--- NH}_2 \\ \text{(C)} \diagdown \end{array}$	-18,17	2	$\text{--- C}\equiv\text{N}$	21,00	2
$\text{--- CH}_3$	28,52	4		32,29	2
$\text{--- CH}_2^-$	14,77	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}}) \text{---} (\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1

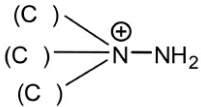

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = -18,17 \cdot 2 + 28,52 \cdot 4 + 14,77 \cdot 2 +$   
 $+ 21,00 \cdot 2 + 32,29 \cdot 2 + 1,97 = 215,83 \text{ см}^3/\text{моль}.$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 336,37/215,83 = 1,56 \text{ г/см}^3.$

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,551 \text{ г/см}^3$  [71].

**21.** 1,1-Dimethyl-1-cyanomethylhydrazinium picrate,  $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}_7\text{N}_6$ ,  
 $M = 328,24 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	-18,17	1		23,52	1
-CH <sub>3</sub>	28,52	2	(C <sub>ar,het</sub> , N <sub>het</sub> )-NO <sub>2</sub>	25,78	3
-CH <sub>2</sub> -	14,77	1	(C <sub>ar,het</sub> )-H	7,96	2
-C≡N	21,00	1	(C <sub>ar,het</sub> )-O <sup>-</sup>	9,06	1

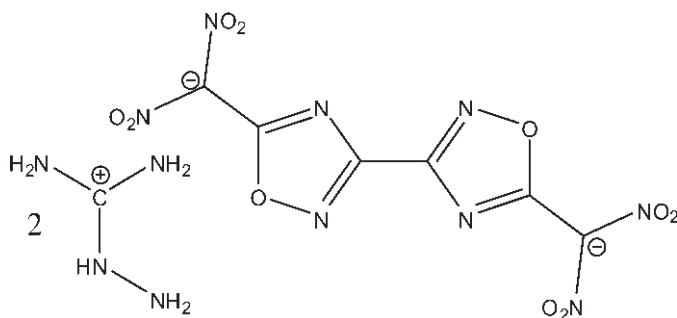
Мольный объем:

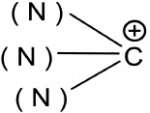
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = -18,17 + 28,52 \cdot 2 + 14,77 + 21,00 + 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 9,06 = 200,48 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 328,24/200,48 = 1,64 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,683 г/см<sup>3</sup> [71].

**22. Di(aminoguanidinium)3,3-di-1,2,4-oxadiazolo-5,5'-bis(dinitro-methylate), C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>O<sub>10</sub>N<sub>16</sub>,  $M = 494,30 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	18,87	2	=N-	7,89	4
-NH <sub>2</sub>	15,52	6	(C <sub>het</sub> )-O-(C <sub>het</sub> , N <sub>het</sub> )	9,24	2
-NH-	6,03	2	-C <sup>-</sup> (NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	40,21	2
C <sub>ar,het</sub>	3,92	4	(C <sub>ar,het</sub> )-(C <sub>het</sub> )	1,97	1

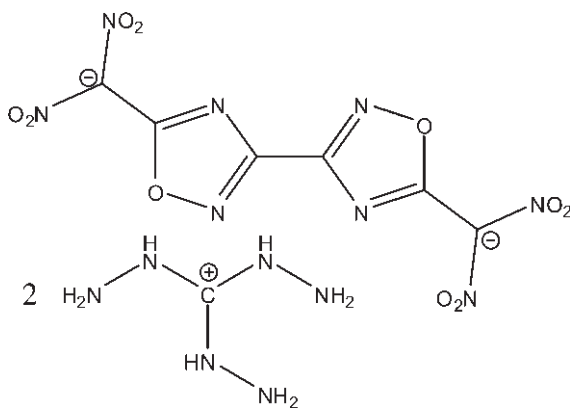
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 18,87 \cdot 2 + 15,52 \cdot 6 + 6,03 \cdot 2 + 3,92 \cdot 4 + 7,89 \cdot 4 + 9,24 \cdot 2 + 1,97 + 40,21 \cdot 2 = 291,03 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 494,30/291,03 = 1,70 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $1,700 \text{ г/см}^3$  [47].

**23. Di-(triaminoguanidine) 3,3-di-1,2,4-oxadiazolo-5,5'-bis(dinitromethylate),  $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{O}_{10}\text{N}_{20}$ ,  $M = 554,36 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} \text{(N)} \diagdown \\ \text{(N)} \text{---} \text{C}^{\oplus} \\ \text{(N)} \diagup \end{array}$	18,87	2	$\text{C}_{\text{ar,het}}$	3,92	4
$-\text{NH}_2$	15,52	6	$=\text{N}-$	7,89	4
$-\text{NH}-$	6,03	6	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1
			$(\text{C}_{\text{het}})-\text{O}-(\text{C}_{\text{het}}, \text{N}_{\text{het}})$	9,24	2
			$-\text{C}(\text{NO}_2)_2$	40,21	2

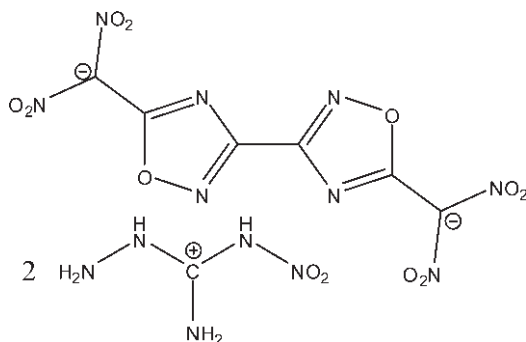
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 18,87 \cdot 2 + 15,52 \cdot 6 + 6,03 \cdot 6 + 3,92 \cdot 4 + 7,89 \cdot 4 + 9,24 \cdot 2 + 1,97 + 40,21 \cdot 2 = 315,15 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 554,36/315,15 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,726 \text{ г/см}^3$  [47].

**24. Bis(aminonitroguanidinium) 3,3-di-1,2,4-oxadiazolo-5,5'-bis(dinitromethylate),  $C_8H_{12}O_{14}N_{18}$ ,  $M = 584,30$  г/моль**



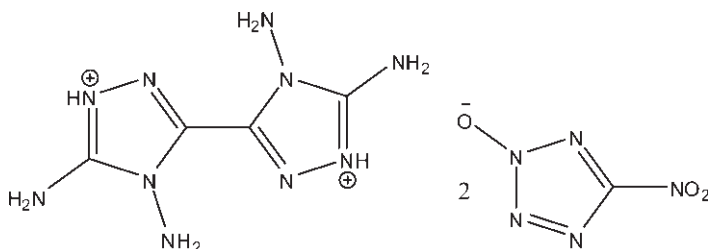
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} (N) \diagup \\ (N) \text{---} C^+ \\ (N) \diagdown \end{array}$	18,87	2	$C_{ar,het}$	3,92	4
$-NH_2$	15,52	2	$=N-$	7,89	4
$-NH_2$	11,96	2	$(C_{het})-O-(C_{het}, N_{het})$	9,24	2
$-NH-$	6,03	2	$-\bar{C}(NO_2)_2$	40,21	2
$-NHNO_2$	30,44	2	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 18,87 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 30,44 \cdot 2 + 3,92 \cdot 4 + 7,89 \cdot 4 + 9,24 \cdot 2 + 1,97 + 40,21 \cdot 2 = 313,75 \text{ см}^3/\text{моль}$ .



Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 584,30/313,75 = 1,86 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,853 \text{ г/см}^3$  [47].

**25. 3,3'-Bis(4,5-diamino-1,2,4-triazolium) bis(5-nitro-tetrazolate-2-olate),  $C_6H_{10}O_6N_{20}$ ,  $M = 458,28$  г/моль**





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	28,68	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	4	$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	2
$(N_{het})-H$	5,63	2	$(C_{ar,het})-(C_{het})$	1,97	1
	32,29	2			

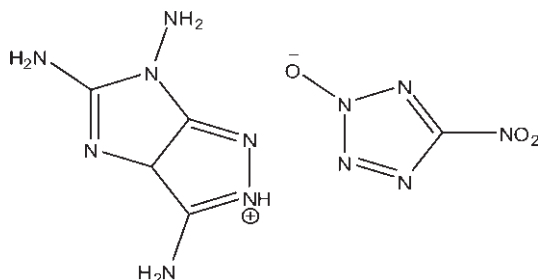
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,68 \cdot 2 + 14,96 \cdot 4 + 5,63 \cdot 2 + 1,97 + 32,29 \cdot 2 + 25,78 \cdot 2 + 6,98 \cdot 2 = 260,53 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 458,28/260,53 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,799 г/см<sup>3</sup> [70].

26. 3,5,6-triamino-3a,6-dihydroimidazo[4,5-c]-2-pyrazolium 5-nitro-tetrazole-2-olate,  $C_5H_7O_3N_{12}$ ,  $M = 283,19 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het}$	4,00	2	$(N_{het})-H$	5,63	1
$C_{ar,het}(as)$	6,86	2		32,29	1
$(C_{het}, O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	1	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{het})-N=(N_{het})$	7,64	1	$(N_{het})-\bar{O}$	6,98	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	3			
$-N-$	5,27	2			

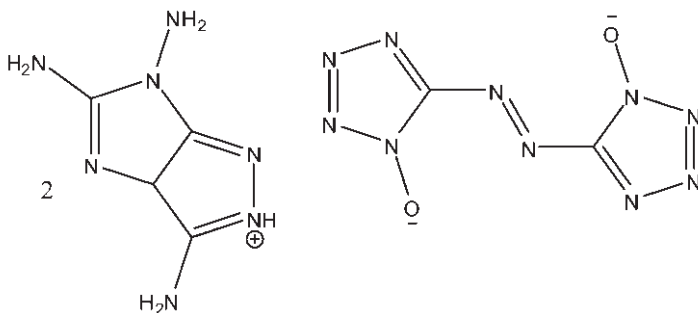
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,00 \cdot 2 + 6,86 \cdot 2 + 6,40 + 7,64 + 5,27 \cdot 2 + 14,96 \cdot 3 + 5,63 + 32,29 + 25,78 + 6,98 = 161,86 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 283,19 / 161,86 = 1,75 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,732 г/см<sup>3</sup> [70].

27. Bis(3,5,6-triamino-3a,6-dihydroimidazo[4,5-c]-2-pyrazolium) 5,5'-azo-(tetrazole-1,1'-diolate), C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>N<sub>24</sub>,  $M = 502,39 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
C <sub>ar,het</sub>	4,00	4	(C <sub>ar,het</sub> N <sub>het</sub> )-NH <sub>2</sub>	14,96	6
C <sub>ar,het</sub> (as)	6,86	4	(N <sub>het</sub> )-H	5,63	2
(C <sub>het</sub> O <sub>het</sub> )-N=(C <sub>het</sub> )	6,40	2		32,29	2
(C <sub>het</sub> )-N=(N <sub>het</sub> )	7,64	2	(C <sub>ar,het</sub> )-N=N-(C <sub>ar,het</sub> )	23,01	1
-N-	5,27	4	(N <sub>het</sub> )-O <sup>-</sup>	6,98	2

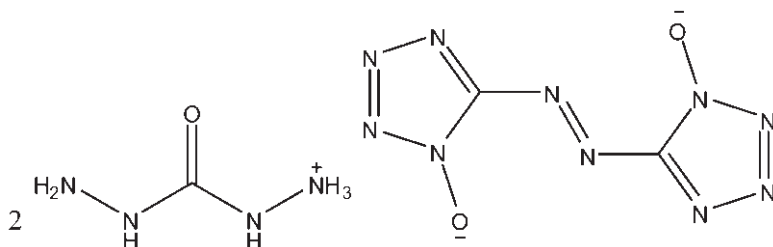
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 4,00 \cdot 4 + 6,86 \cdot 4 + 6,40 \cdot 2 + 7,64 \cdot 2 + 5,27 \cdot 4 + 14,96 \cdot 6 + 5,63 \cdot 2 + 32,29 \cdot 2 + 23,01 + 6,98 \cdot 2 = 295,17 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 502,39 / 295,17 = 1,70 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,731 г/см<sup>3</sup> [70].

**28. Bis(carbohydrazidium) 5,5'-azo-(tetrazole-1,1'-diolate), C<sub>4</sub>H<sub>14</sub>O<sub>4</sub>N<sub>18</sub>,  
M = 378,28 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	V <sub>i</sub>	Число	Вид	V <sub>i</sub> , δ <sub>i</sub>	Число
(N) >C=O (N)	14,89	2		32,29	2
-NH-	6,03	4	(C <sub>ar,het</sub> )-N=N-(C <sub>ar,het</sub> )	23,01	1
-NH <sub>2</sub>	15,52	2	(N <sub>het</sub> )-O <sup>-</sup>	6,98	2
-NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	15,59	2			

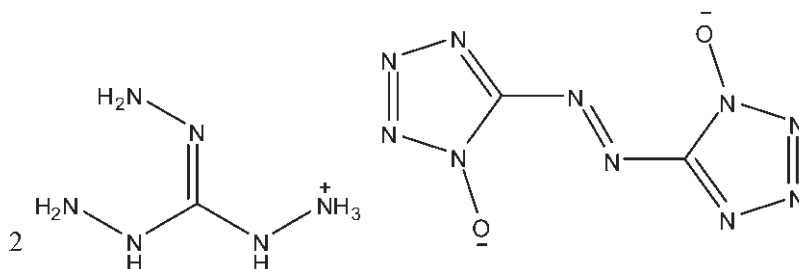
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,89 \cdot 2 + 6,03 \cdot 4 + 15,52 \cdot 2 + 15,59 \cdot 2 + 32,29 \cdot 2 + 23,01 + 6,98 \cdot 2 = 217,67 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 378,28/217,67 = 1,74 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,711 г/см<sup>3</sup> [44].

**29. Bis(triaminoguanidinium) 5,5'-azo-(tetrazole-1,1'-diolate),  
C<sub>4</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub>N<sub>22</sub>, M = 406,34 г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} \text{(N)} \\ \diagup \\ \text{C=N-} \\ \diagdown \\ \text{(N)} \end{array}$	9,62	2		32,29	2
—NH—	6,03	4	$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{-N=N-}(\text{C}_{\text{ar,het}})$	23,01	1
—NH <sub>2</sub>	15,52	4	$(\text{N}_{\text{het}})\text{-}\bar{\text{O}}$	6,98	2
—NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	15,59	2			

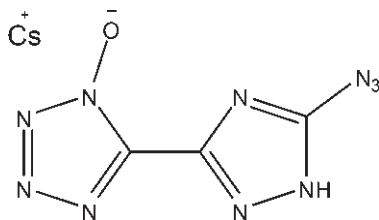
Мольный объем:



$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 9,62 \cdot 2 + 15,52 \cdot 4 + 6,03 \cdot 4 + 15,59 \cdot 2 + 32,29 \cdot 2 + 23,01 + 6,98 \cdot 2 = 238,17 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 406,34/238,17 = 1,70 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,683 \text{ г/см}^3$  [44].

30. Cesium 3-(1,2,4-triazolo-5-azido)-5'-(tetrazolo-1'-olate),  $\text{C}_3\text{HON}_{10}\text{Cs}$ ,  
 $M = 326,02 \text{ г/моль}$



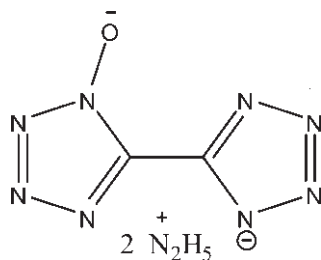
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$(\text{N}_{\text{het}})\text{-H}$	5,63	1
$(\text{N}_{\text{het}})\text{-}\bar{\text{O}}$	6,98	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{-N}_3$	30,78	1
	28,68	1	$\text{Cs}^+$	24,80	1
			$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{-(C}_{\text{het}})$	1,97	1


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 6,98 + 28,68 + 5,63 + 30,78 + 1,97 + 24,80 = 131,13 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 326,02/131,13 = 2,49 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,501 \text{ г/см}^3$  [73].

**31.** Bis(hydrazinium) 5-(tetrazolo-1-olate)-5'-tetrazolate,  $\text{C}_2\text{H}_{10}\text{ON}_{12}$ ,  
 $M = 218,19 \text{ г/моль}$

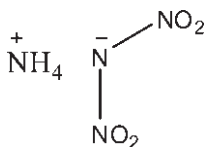


Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$^+\text{N}_2\text{H}_5$	30,36	2
$(\text{N}_{\text{het}})-\bar{\text{O}}$	6,98	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 6,98 + 1,97 + 30,36 \cdot 2 = 134,25 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 218,19/134,25 = 1,63 \text{ г/см}^3$ .  
Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,655 \text{ г/см}^3$  [59].

**32.** Ammonium dinitramide,  $\text{H}_4\text{O}_4\text{N}_4$ ,  $M = 124,06 \text{ г/моль}$



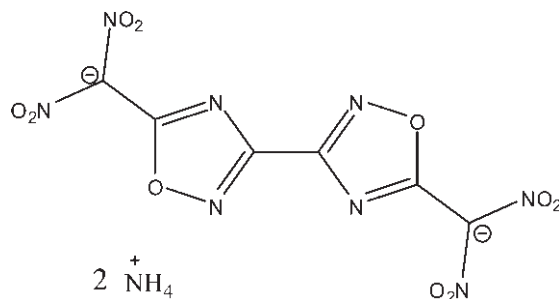
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\bar{\text{N}}(\text{NO}_2)_2$	45,30	1	$^+\text{NH}_4$	23,42	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 45,30 + 23,42 = 68,72 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 124,06/68,72 = 1,81 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,801 \text{ г/см}^3$  [62].

**33. Bis(ammonium) 3,3'-di-1,2,4-oxadiazolo-5,5'-bis(dinitromethylate),**  
 $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_{10}\text{N}_{10}$ ,  $M = 380,19 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{C}_{\text{ar,het}}$	3,92	4	$\text{—}\overset{\ominus}{\text{C}}(\text{NO}_2)_2$	40,21	2
$=\text{N—}$	7,89	4	$\text{NH}_4^+$	23,42	2
$(\text{C}_{\text{het}})\text{—O—}(\text{C}_{\text{het}}, \text{N}_{\text{het}})$	9,24	2	$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{—}(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1

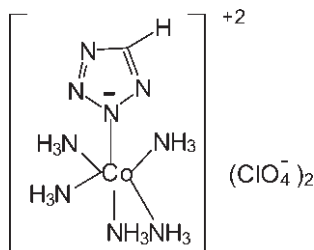
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 3,92 \cdot 4 + 7,89 \cdot 4 + 9,24 \cdot 2 + 1,97 + 40,21 \cdot 2 + 23,42 \cdot 2 = 194,95 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 380,19/194,95 = 1,95 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,905 \text{ г/см}^3$  [47].

**34. Pentaammine (2H-tetrazolato- $\text{N}^2$ )cobalt(III) perchlorate,**  
 $\text{CoCH}_{16}\text{O}_8\text{N}_9\text{Cl}_2$ ,  $M = 412,03 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})_-\text{H}$	7,96	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			

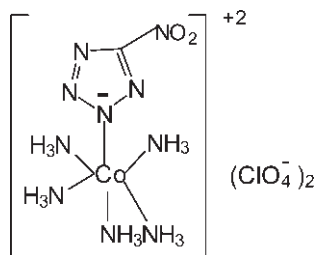
Молярный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 7,96 + 41,83 \cdot 2 = 205,87 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 412,03/205,87 = 2,00 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,97 \text{ г/см}^3$  [75].

**35. Pentaammine (5-nitro-2H-tetrazolato- $\text{N}^2$ )cobalt(III) perchlorate,**  
 $\text{CoCH}_{15}\text{O}_{10}\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 457,03 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})_-\text{NO}_2$	25,78	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			

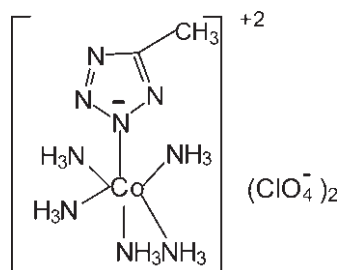
Молярный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 25,78 + 41,83 \cdot 2 = 223,69 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 457,03/223,69 = 2,04 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,03 \text{ г/см}^3$  [75].

**36. Pentaammine (5-methyl-2H-tetrazolato- $N^2$ )cobalt(III) perchlorate,**  
 $\text{CoC}_2\text{H}_{18}\text{O}_8\text{N}_9\text{Cl}_2$ ,  $M = 426,06 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$-\text{CH}_3$	28,52	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			

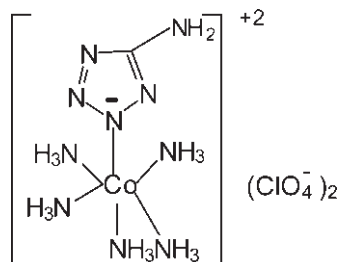
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 28,52 + 41,83 \cdot 2 = 226,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 426,06/226,43 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,88 \text{ г/см}^3$  [75].

**37. Pentaammine (5-amino-2H-tetrazolato- $N^2$ )cobalt(III) perchlorate,**  
 $\text{CoCH}_{17}\text{O}_8\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 427,04 \text{ г/моль}$





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NH}_2$	14,96	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			

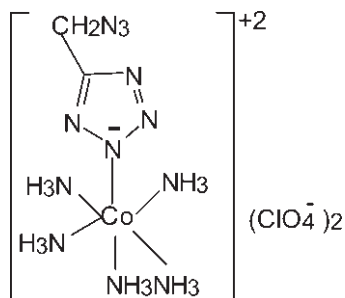
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 14,96 + 41,83 \cdot 2 = 212,87 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 427,04/212,87 = 2,00 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,95 \text{ г/см}^3$  [75].

**38. Pentaammine (5-methylazido-2H-tetrazolato- $\text{N}^2$ )cobalt(III) perchlorate,  $\text{CoC}_2\text{H}_{17}\text{O}_8\text{N}_{12}\text{Cl}_2$ ,  $M = 467,07 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{CH}_2^-$	10,19	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$-\text{N}_3$	29,87	1
	32,29	1	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2

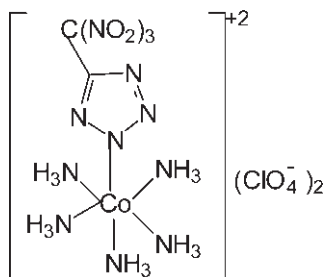
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 10,19 + 29,87 + 41,83 \cdot 2 = 237,97 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 467,07/237,97 = 1,96 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,94 \text{ г/см}^3$  [75].

**39. Pentaammine (5-trinitromethyl-2H-tetrazolato-N<sup>2</sup>)cobalt(III) perchlorate,  $\text{CoC}_2\text{H}_{15}\text{O}_{14}\text{N}_{12}\text{Cl}_2$ ,  $M = 561,05 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{C}(\text{NO}_2)_3$	80,17	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			

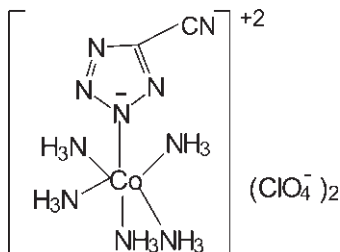
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 80,17 + 41,83 \cdot 2 = 278,08 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 561,05/278,08 = 2,02 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,05 \text{ г/см}^3$  [75].

**40. Pentaammine (5-cyano-2H-tetrazolato-N<sup>2</sup>)cobalt(III) perchlorate (CP),  $\text{CoC}_2\text{H}_{15}\text{O}_8\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 437,04 \text{ г/моль}$**



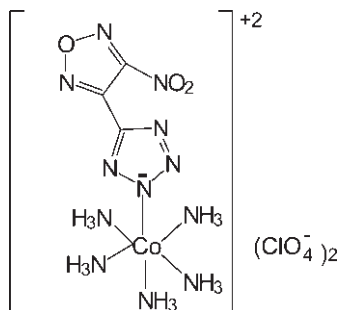
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{C}\equiv\text{N}$	25,27	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			



Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 25,27 + 41,83 \cdot 2 = 223,18 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 437,04/223,18 = 1,96 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,96 \text{ г/см}^3$  [75].

**41. Pentaammine [3-(4-nitrofurazano)-5'-(2H'-tetrazolato-N<sup>2</sup>)] cobalt(III) perchlorate,  $\text{CoC}_3\text{H}_{15}\text{O}_{11}\text{N}_{12}\text{Cl}_2$ ,  $M = 525,05 \text{ г/моль}$**



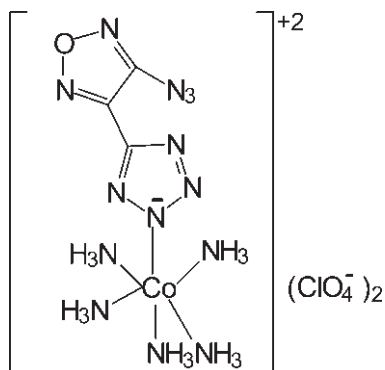
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1		33,94	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{NO}_2$	25,78	1
	32,29	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1
			$\text{ClO}_4^-$	41,83	2

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 33,94 + 25,78 + 1,97 + 41,83 \cdot 2 = 259,60 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 525,05/259,60 = 2,02 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,97 \text{ г/см}^3$  [75].

**42. Pentaammine [3-(4-azidofurazano)-5'-(2H'-tetrazolato-N<sup>2</sup>)] cobalt(III) perchlorate,  $\text{CoC}_3\text{H}_{15}\text{O}_9\text{N}_{14}\text{Cl}_2$ ,  $M = 521,08$  г/моль**



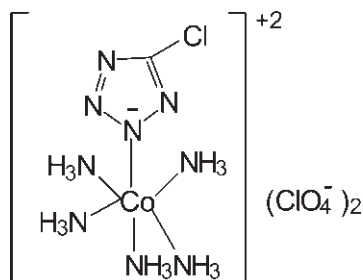
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1		33,94	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-\text{N}_3$	30,78	1
	32,29	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})-(\text{C}_{\text{het}})$	1,97	1
			$\text{ClO}_4^-$	41,83	2


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 33,94 + 30,78 + 1,97 + 41,83 \cdot 2 = 264,60$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 521,08/264,60 = 1,97$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,95 г/см<sup>3</sup> [75].

**43. Pentaammine (5-chloro-2H-tetrazolato-N<sup>2</sup>)cobalt(III) perchlorate,  $\text{CoCH}_{15}\text{O}_8\text{N}_9\text{Cl}_3$ ,  $M = 446,47$  г/моль**



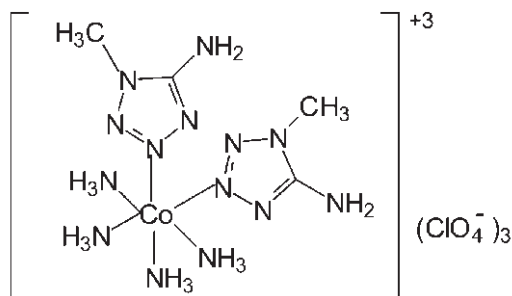
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}})_{-}\text{Cl}$	22,12	1
$\text{NH}_3$	15,91	5	$\text{ClO}_4^-$	41,83	2
	32,29	1			


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 15,91 \cdot 5 + 32,29 + 22,12 + 41,83 \cdot 2 = 220,03 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 446,47/220,03 = 2,03 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,02 \text{ г/см}^3$  [75].

**44. Tetraammine-cis-bis(2-methyl-5-amino-tetrazole- $\text{N}^3$ )cobalt(III) perchlorate,  $\text{C}_4\text{H}_{22}\text{O}_{12}\text{N}_{14}\text{Cl}_3\text{Co}$ ,  $M = 623,60 \text{ г/моль}$**



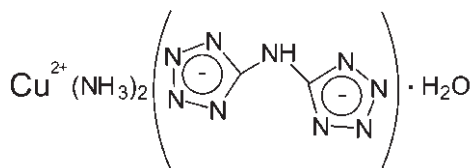
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{NH}_3$	15,91	4		32,29	2
$\text{Co}^{3+}$	2,41	1	$(\text{C}_{\text{ar,het}}\text{N}_{\text{het}})_{-}\text{NH}_2$	14,96	2
$\text{ClO}_4^-$	41,83	3	$(\text{C}_{\text{ar,het}}\text{N}_{\text{het}})_{-}\text{CH}_3$	22,04	2


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 15,91 \cdot 4 + 2,41 + 41,83 \cdot 3 + 32,29 \cdot 2 + 14,96 \cdot 2 + 22,04 \cdot 2 = 330,12 \text{ см}^3/\text{моль}$ .

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 623,60/330,12 = 1,89 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,90 \text{ г/см}^3$  [64].

45. Diammine-[imino-bis-5,5'-(tetrazolate)]copper(II) monohydrate,  
 $C_2N_{11}H_9OCu$ ,  $M = 266,71$  г/моль



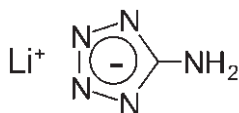
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$Cu^{2+}$	8,22	1
$(C_{ar,het})-NH-(C_{ar,het})$	16,74	1	$NH_3$	15,91	2
			$H_2O$	15,90	1


Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 16,74 + 8,22 + 15,91 \cdot 2 + 15,90 = 137,26$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 266,71/137,26 = 1,94$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,953 г/см<sup>3</sup> [64].

46. Lithium 5-aminotetrazolate,  $CH_2N_5Li$ ,  $M = 91,00$  г/моль



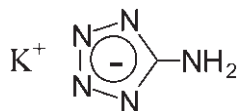
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$Li^+$	4,16	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	1			


Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 14,96 + 4,16 = 51,41$$
 см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 91,00/51,41 = 1,77$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,736 г/см<sup>3</sup> [65].

47. Potassium 5-aminotetrazolate,  $\text{CH}_2\text{N}_5\text{K}$ ,  $M = 123,16$  г/моль

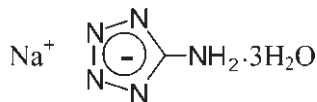
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{K}^+$	15,91	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})\text{-NH}_2$	14,96	1			

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 14,96 + 15,91 = 63,16 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 123,16/63,16 = 1,95$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,961 г/см<sup>3</sup> [65].

48. Sodium 5-aminotetrazolate trihydrate,  $\text{CH}_8\text{N}_5\text{O}_3\text{Na}$ ,  
 $M = 161,10$  г/моль

Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{Na}^+$	8,48	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})\text{-NH}_2$	14,96	1	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	3

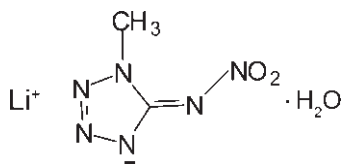
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 14,96 + 8,48 + 15,90 \cdot 3 = 103,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 161,10/103,43 = 1,56$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,554 г/см<sup>3</sup> [65].

**49. Lithium 1-methyl-5-nitroiminotetrazolate monohydrate,**  
 $C_2H_5N_6O_3Li$ ,  $M = 168,04$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	2	$(N_c)-C=NNO_2$	29,18	1
$-N-$	5,27	2	$Li^+$	4,16	1
$(C_{ar,het}N_{het})-CH_3$	22,04	1	$H_2O$	15,90	1

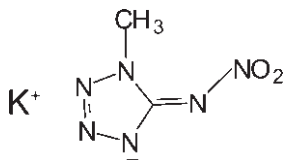
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 22,04 + 29,18 + 4,16 + 15,90 = 97,60 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{МК} = M/V = 168,04/97,60 = 1,72$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение плотности монокристалла  $\rho_{МК} = 1,756$  г/см<sup>3</sup> [65].

**50. Potassium 1-methyl-5-nitroiminotetrazolate,  $C_2H_3N_6O_2K$ ,**  
 $M = 182,18$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	2	$(N_c)-C=NNO_2$	29,18	1
$-N-$	5,27	2	$K^+$	15,91	1
$(C_{ar,het}N_{het})-CH_3$	22,04	1			



Мольный объем:

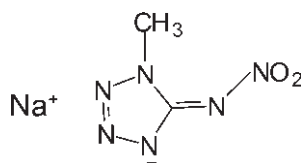
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 22,04 + 29,18 + 15,91 = 93,45 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 182,18/93,45 = 1,95 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,948 \text{ г/см}^3$  [65].

**51. Sodium 1-methyl-5-nitroiminotetrazolate,  $\text{C}_2\text{N}_6\text{H}_3\text{O}_2\text{Na}$ ,**

$M = 166,07 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=\text{N}-$	7,89	2	$(\text{N}_c)-\text{C}=\text{NNO}_2$	29,18	1
$-\text{N}-$	5,27	2	$\text{Na}^+$	8,48	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}})-\text{CH}_3$	22,04	1			

Мольный объем:

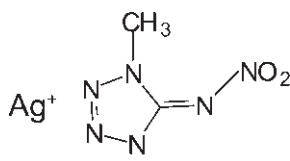
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 22,04 + 29,18 + 8,48 = 86,02 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 166,07/86,02 = 1,93 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,939 \text{ г/см}^3$  [65].

**52. Silver 1-methyl-5-nitroiminotetrazolate,  $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}_6\text{O}_2\text{Ag}$ ,**

$M = 250,95 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	2	$\begin{matrix} (N_c) \\ (N_c) \end{matrix} \rangle C=NNO_2$	29,18	1
$\begin{matrix} -N- \\   \end{matrix}$	5,27	2	$Ag^+$	8,54	1
$(C_{ar,het}N_{het})-CH_3$	22,04	1			

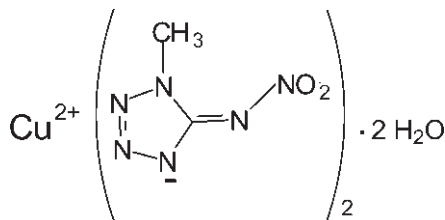
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 22,04 + 29,18 + 8,54 = 86,08 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 250,95/86,08 = 2,92 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,948 г/см<sup>3</sup> [65].

**53. Copper(II) di(1-methyl-5-nitroiminotetrazolate) dihydrate,**  
 $C_4H_{10}N_{12}O_6Cu$ ,  $M = 385,78$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	4	$(N_c) \diagup C=NNO_2$	29,18	2
$-N-$ 	5,27	4	$(N_c) \diagdown$		
$(C_{ar,het}N_{het})-CH_3$	22,04	2	$Cu^{2+}$	8,22	1
			$H_2O$	15,90	2

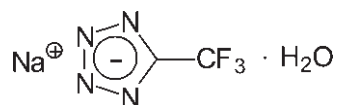
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 4 + 5,27 \cdot 4 + 22,04 \cdot 2 + 29,18 \cdot 2 + 8,22 + 15,90 \cdot 2 = 195,10 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 385,78/195,10 = 1,98 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,03 г/см<sup>3</sup> [65].

**54. Sodium 5-trifluoromethyltetrazolate monohydrate,  $C_2F_3N_4Na \cdot H_2O$ ,  
 $M = 178,06$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$Na^+$	8,48	1
$(C_{ar,het})-CF_3$	38,00	1	$H_2O$	15,90	1

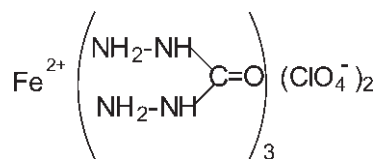
Мольный объем:

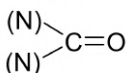
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 38,00 + 8,48 + 15,90 = 94,67 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 178,06/94,67 = 1,88$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,911 г/см<sup>3</sup> [65].

**55. Tris(carbohydrazide)iron(II) perchlorate,  $C_3H_{18}N_{12}O_{11}Cl_2Fe$ ,  
 $M = 525,00$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$-NH_2$	15,52	6	$Fe^{2+}$	3,56	1
$-NH-$	6,03	6	$ClO_4^-$	41,83	2
	14,89	3			

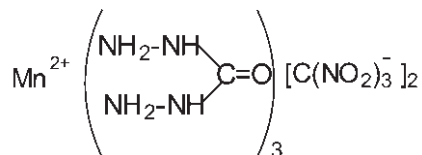
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 15,52 \cdot 6 + 6,03 \cdot 6 + 14,89 \cdot 3 + 3,56 + 41,83 \cdot 2 = 261,19 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 525,00/261,19 = 2,01 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,967 \text{ г/см}^3$  [65].

56. Tris(carbohydrazide)manganese(II) nitroformate,  $\text{C}_5\text{H}_{18}\text{N}_{18}\text{O}_{15}\text{Mn}$ ,  
 $M = 625,25 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{—NH}_2$	15,52	6	$\text{Mn}^{2+}$	4,44	1
$\text{—NH—}$	6,03	6	$\text{C}(\text{NO}_2)_3^-$	75,32	2
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{array} \text{C=O}$	14,89	3			

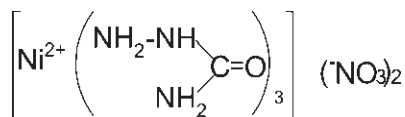
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 15,52 \cdot 6 + 6,03 \cdot 6 + 14,89 \cdot 3 + 4,44 + 75,32 \cdot 2 = 329,05 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 625,25/329,05 = 1,90 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,867 \text{ г/см}^3$  [65].

57. Tris(semicarbazide)nickel (II) nitrate,  $\text{NiC}_3\text{H}_{15}\text{O}_9\text{N}_{11}$ ,  
 $M = 407,93 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{—NH}_2$	15,52	6	$\text{NO}_3^-$	29,02	2
$\text{—NH—}$	6,03	3	$\text{Ni}^{2+}$	2,58	1
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{array} \text{C=O}$	14,89	3			

Мольный объем:

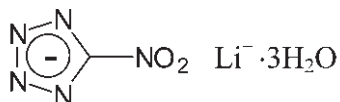
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 15,52 \cdot 6 + 6,03 \cdot 3 + 14,89 \cdot 3 + 29,02 \cdot 2 + 2,58 = 216,50 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 407,93/216,50 = 1,88 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,863 \text{ г/см}^3$  [65].

58. Lithium 5-nitrotetrazolate trihydrate,  $\text{CH}_6\text{N}_5\text{O}_5\text{Li}$ ,

$M = 175,03 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{Li}^+$	4,16	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	1	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	3

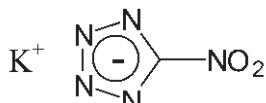
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 25,78 + 4,16 + 15,90 \cdot 3 = 109,93 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 175,03/109,93 = 1,59 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,609 \text{ г/см}^3$  [65].

59. Potassium 5-nitrotetrazolate,  $\text{CN}_5\text{O}_2\text{K}$ ,  $M = 153,14 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{K}^+$	15,91	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	1			

Мольный объем:

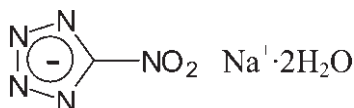
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 25,78 + 15,91 = 73,98 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 153,14/73,98 = 2,07 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,027 \text{ г/см}^3$  [65].

**60. Sodium 5-nitrotetrazolate dihydrate,  $\text{CH}_4\text{N}_5\text{O}_4\text{Na}$ ,**

$M = 173,07 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{Na}^+$	8,48	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	1	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	2

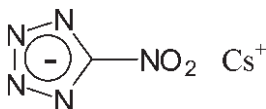
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 25,78 + 8,48 + 15,90 \cdot 2 = 98,35 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 173,07/98,35 = 1,76 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,731 \text{ г/см}^3$  [65].

**61. Cesium 5-nitrotetrazolate,  $\text{CO}_2\text{N}_5\text{Cs}$ ,  $M = 246,95 \text{ г/моль}$**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	1	$\text{Cs}^+$	24,80	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	1			

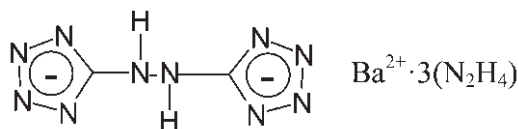
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 + 25,78 + 24,80 = 82,87 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 246,95/82,87 = 2,98 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,986 \text{ г/см}^3$  [65].

**62.** Tris-(hydrazine)barium N,N'-bis(5-tetrazolato)hydrazinate,  $\text{C}_2\text{H}_{14}\text{N}_{16}\text{Ba}$ ,  $M = 399,59 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	2	$\text{Ba}^{2+}$	20,32	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}})\text{-NHNH-}(\text{C}_{\text{ar,het}})$	28,49	1	$\text{N}_2\text{H}_4$	24,77	3

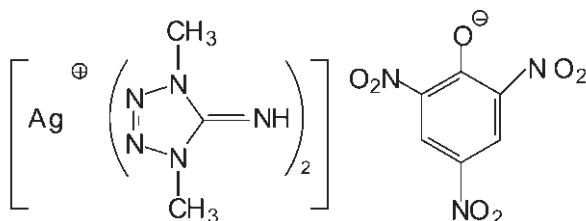
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 2 + 28,49 + 20,32 + 24,77 \cdot 3 = 187,70 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 399,59/187,70 = 2,13 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,109 \text{ г/см}^3$  [65].

**63.** Bis-(1,5-dimethyl-tetrazolo-5-imine)silver picrat,  $\text{C}_{12}\text{H}_{16}\text{N}_{13}\text{O}_7\text{Ag}$ ,  $M = 562,21 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	4		23,52	1
$-N-$	5,27	4	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	3
$(N) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=NH$	15,75	2	$(C_{ar,het})-H$	7,96	2
$(N) \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} C=NH$	15,75	2	$(C_{ar,het})-\bar{O}$	9,06	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-CH_3$	22,04	4			
$Ag^+$	8,54	1			

Мольный объем:

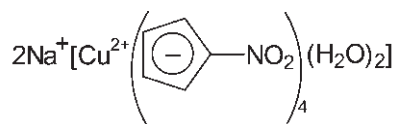
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 4 + 5,27 \cdot 4 + 15,75 \cdot 2 + 22,04 \cdot 4 + 8,54 + 23,52 + 25,78 \cdot 3 + 7,96 \cdot 2 + 9,06 = 306,68 \text{ см}^3/\text{моль}.$$


Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 562,21/306,68 = 1,83 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,845 г/см<sup>3</sup> [64].

#### 64. Di-sodium [Di-aqua-tetra-(5-nitrotetrazolato)copper(II)],

$Na_2CuC_4H_4O_{10}N_{20}$ ,  $M = 601,73 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
	32,29	4	$Na^+$	8,48	2
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	4	$Cu$	8,22	1
			$H_2O$	15,90	2

Мольный объем:

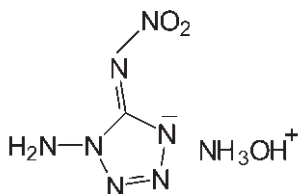
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 32,29 \cdot 4 + 25,78 \cdot 4 + 8,48 \cdot 2 + 8,22 + 15,90 \cdot 2 = 289,26 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 601,73/289,26 = 2,08 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,10 г/см<sup>3</sup> [64].



**65. Hydroxylammonium 1-Amino-5-nitriminotetrazolate,  $H_xANiTz$ ,  $CH_6O_3N_8$ ,  $M = 178,11$  г/моль**



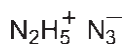
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$=N-$	7,89	2	$(N_c^-) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C = NNO_2$	29,18	1
$-N-$	5,27	2	$(N_c^-) \begin{matrix} \diagup \\ \diagdown \end{matrix} C = NNO_2$	24,47	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NH_2$	14,96	1	$NH_3OH^+$		

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 7,89 \cdot 2 + 5,27 \cdot 2 + 14,96 + 29,18 + 24,47 = 94,93$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 178,11/94,93 = 1,88$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,840 г/см<sup>3</sup> [9].

**66. Hydrazinium azide,  $H_5N_5$ ,  $M = 75,08$  г/моль**



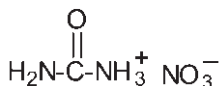
Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$^+N_2H_5$	30,36	1	$^-N_3$	27,59	1

Мольный объем:  $V = \sum V_i + \sum \delta_i = 30,36 + 27,59 = 57,95$  см<sup>3</sup>/моль.

Плотность монокристалла:  $\rho_{мк} = M/V = 75,08/57,95 = 1,29$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{мк}$  составляет 1,26 г/см<sup>3</sup> [111].

**67. Urea nitrate,  $CH_5O_4N_3$ ,  $M = 123,07$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\begin{array}{c} \text{(N)} \diagup \\ \text{C=O} \\ \text{(N)} \diagdown \\   \\ \text{—NH}_2 \end{array}$	14,89	1	$\text{—NH}_3^+$	15,59	1
$\text{—NH}_2$	15,52	1	$\text{—NO}_3^-$	29,02	1

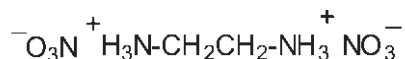
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,89 + 15,52 + 15,59 + 29,02 = 75,02 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 123,07/75,02 = 1,64 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,65 \text{ г/см}^3$  [67].

68. Ethylenediamine dinitrate, EDDN,  $\text{C}_2\text{H}_{10}\text{O}_6\text{N}_4$ ,  $M = 186,12 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{—CH}_2\text{—}$	14,77	2	$\text{—NO}_3^-$	29,02	2
$\text{—NH}_3^+$	15,59	2			

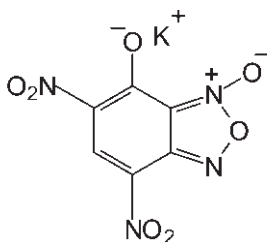
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 15,59 \cdot 2 + 29,02 \cdot 2 = 118,76 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 186,12/118,76 = 1,57 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,595 \text{ г/см}^3$  [67].

69. Potassium 4,6-Dinitro-7-Hydroxybenzofuroxan, KDNP,  $\text{C}_6\text{HO}_7\text{N}_4\text{K}$ ,  
 $M = 280,20 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$C_{ar,het(as)}$	6,86	2	$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	2
$C_{ar,het}$	4,00	4	$(N_{het}) \rightarrow O$	5,41	1
$(C_{ar,het})-H$	7,96	1	$(C_{ar,het})-\bar{O}$	9,06	1
$(C_{het}, O_{het})-N=(C_{het})$	6,40	2	$K^+$	15,91	1
$(N_{het})-O-(N_{het})$	11,50	1			

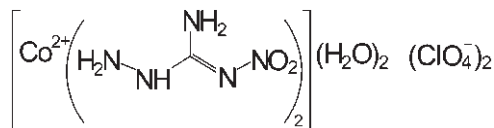
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 6,86 \cdot 2 + 4,00 \cdot 4 + 7,96 + 6,40 \cdot 2 + 11,50 + 25,78 \cdot 2 + 5,41 + 9,06 + 15,91 = 143,92 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 280,20/143,92 = 1,95 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,982 \text{ г/см}^3$  [211].

**70.** Diaqua-bis-(3-amino-1-nitroguanidine) cobalt(II) perchlorate,  
 $CoC_2H_{14}O_{14}N_{10}Cl_2$ ,  $M = 532,03 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$Co^{2+}$	2,41	1	$-NH_2$	15,52	2
$(N)-C=NNO_2$	36,24	2	$H_2O$	15,90	2
$-NH_2$	11,96	2	$ClO_4^-$	41,83	2
$-NH-$	6,03	2			

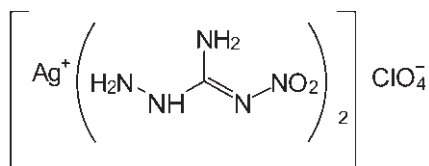
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 2 + 41,83 \cdot 2 = 257,37 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 532,03/257,37 = 2,07 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $2,068 \text{ г/см}^3$  [74].

**71. Bis-(3-amino-1-nitroguanidine)silver(I) perchlorate,  $\text{AgC}_2\text{H}_{10}\text{O}_8\text{N}_{10}\text{Cl}$ ,  
 $M = 445,49$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ag}^+$	8,54	1	$-\text{NH}-$	6,03	2
$\begin{matrix} (\text{N}) \\ \diagup \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagdown \\ (\text{N}) \end{matrix}$	36,24	2	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{ClO}_4^-$	41,83	1

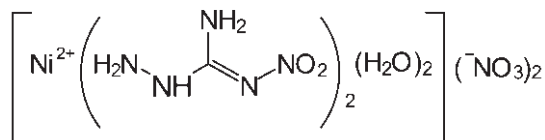
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 8,54 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 41,83 = 189,87 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 445,49/189,87 = 2,34$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,316 г/см<sup>3</sup> [74].

**72. Diaqua-bis-(3-amino-1-nitroguanidine) nickel (II) nitrate,  
 $\text{NiC}_2\text{H}_{14}\text{O}_{12}\text{N}_{12}$ ,  $M = 456,92$  г/моль**



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ni}^{2+}$	2,58	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{matrix} (\text{N}) \\ \diagup \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagdown \\ (\text{N}) \end{matrix}$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	2
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{NO}_3^-$	29,02	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

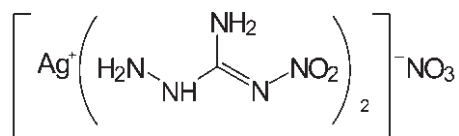
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,58 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 29,02 \cdot 2 = 231,92 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 456,92/231,92 = 1,97 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,011 г/см<sup>3</sup> [74].

**73.** Bis-(3-amino-1-nitroguanidine) silver(I) nitrate,  $\text{AgC}_2\text{H}_{10}\text{O}_7\text{N}_{11}$ ,  
 $M = 408,04 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ag}^+$	8,54	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ \diagup \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagdown \\ (\text{N}) \end{array}$	36,24	2	$^-\text{NO}_3$	29,02	1
$-\text{NH}_2$	11,96	2			
$-\text{NH}-$	6,03	2			

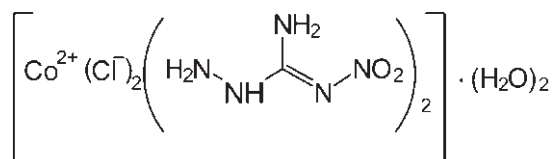
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 8,54 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 29,02 = 177,06 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 408,04/177,06 = 2,30 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 2,235 г/см<sup>3</sup> [74].

**74.** Bis- (3-amino-1-nitroguanidine) dichlorato cobalt (II) dihydrate,  
 $\text{CoC}_2\text{H}_{14}\text{O}_6\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 404,03 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{2+}$	2,41	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{array}{c} \text{(N)} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagup \\ \text{(N)} \end{array}$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	2
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{Cl}^-$	17,68	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

Мольный объем:

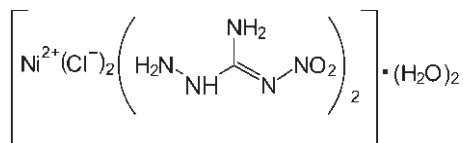
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 2 + 17,68 \cdot 2 = 209,07 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 404,03/209,07 = 1,93 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,927 г/см<sup>3</sup> [74].

75. Bis-(3-amino-1-nitroguanidine) dichloro nikel (II) dihydrate,

$\text{NiC}_2\text{H}_{14}\text{O}_6\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 403,81 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ni}^{2+}$	2,58	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{array}{c} \text{(N)} \\ \diagdown \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagup \\ \text{(N)} \end{array}$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	2
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{Cl}^-$	17,68	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

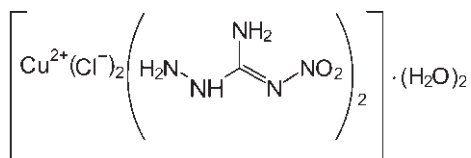
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,58 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 2 + 17,68 \cdot 2 = 209,24 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 403,81/209,24 = 1,93 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,950 г/см<sup>3</sup> [74].

**76. Bis-(3-amino-1-nitroguanidine) dichloro copper (II) dihydrate,**  
 $\text{CuC}_2\text{H}_{14}\text{O}_6\text{N}_{10}\text{Cl}_2$ ,  $M = 408,64$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Cu}^{2+}$	8,22	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{array} \text{C}=\text{NNO}_2$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	2
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{Cl}^-$	17,68	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

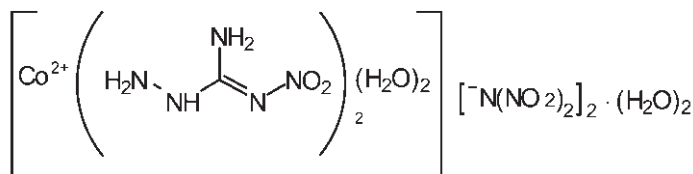
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 8,22 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 2 + 17,68 \cdot 2 = 214,88 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 408,64/214,88 = 1,90$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет 1,945 г/см<sup>3</sup> [74].

**77. Diaqua-bis-(3-amino-1-nitroguanidine) cobalt(II) dinitramide dihydrate,**  $\text{CoC}_2\text{H}_{18}\text{O}_{16}\text{N}_{16}$ ,  $M = 581,19$  г/моль



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Co}^{2+}$	2,41	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{array}{c} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{array} \text{C}=\text{NNO}_2$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	4
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$\text{N}(\text{NO}_2)_2$	45,30	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

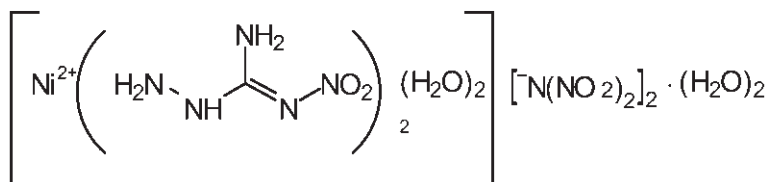
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,41 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 4 + 45,30 \cdot 2 = 296,11 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 581,19/296,11 = 1,96 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,964 \text{ г/см}^3$  [74].

**78.** Diaqua-bis-(3-amino-1-nitroguanidine) nickel (II) dinitramide dihydrate,  $\text{NiC}_2\text{H}_{18}\text{O}_{16}\text{N}_{16}$ ,  $M = 580,97 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ni}^{2+}$	2,58	1	$-\text{NH}_2$	15,52	2
$\begin{matrix} (\text{N}) \\ (\text{N}) \end{matrix} \text{C}=\text{NNO}_2$	36,24	2	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	4
$-\text{NH}_2$	11,96	2	$^-\text{N}(\text{NO}_2)_2$	45,30	2
$-\text{NH}-$	6,03	2			

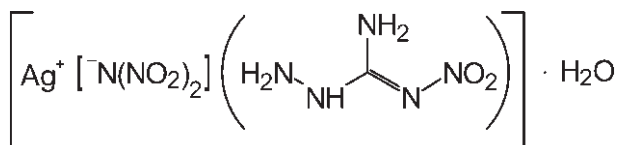
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 2,58 + 36,24 \cdot 2 + 11,96 \cdot 2 + 6,03 \cdot 2 + 15,52 \cdot 2 + 15,90 \cdot 4 + 45,30 \cdot 2 = 296,28 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 580,97/296,28 = 1,96 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{МК}}$  составляет  $1,982 \text{ г/см}^3$  [74].

**79.** (3-Amino-1-nitroguanidine)dinitramido silver (I) hydrate,  $\text{AgCH}_7\text{O}_7\text{N}_8$ ,  $M = 350,99 \text{ г/моль}$





Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\text{Ag}^+$	8,54	1	$-\text{NH}_2$	15,52	1
$\begin{matrix} (\text{N}) \\ \diagup \\ \text{C}=\text{NNO}_2 \\ \diagdown \\ (\text{N}) \end{matrix}$	36,24	1	$\text{H}_2\text{O}$	15,90	1
$-\text{NH}_2$	11,96	1	$^-\text{N}(\text{NO}_2)_2$	45,30	1
$-\text{NH}-$	6,03	1			

Мольный объем:

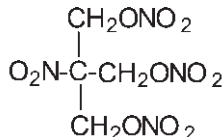
$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 8,54 + 36,24 + 11,96 + 6,03 + 15,52 + 15,90 + 45,30 = 139,49 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность монокристалла:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 350,99/139,49 = 2,51 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{мк}}$  составляет  $2,456 \text{ г/см}^3$  [74].

### Жидкие соединения

1. Nitroisobutylglycerol trinitrate,  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_{11}\text{N}_4$ ,  $M = 286,12 \text{ г/моль}$



Фрагменты			Фрагменты, поправки		
Вид	$V_i$	Число	Вид	$V_i, \delta_i$	Число
$\geq \text{CNO}_2$	18,64	1	$-\text{NO}_2 \dots - \text{ONO}_2$	0,42	3
$-\text{CH}_2\text{ONO}_2$	46,77	3	(положение 1,2; виц)		

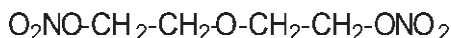
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 18,64 + 46,77 \cdot 3 + 0,42 \cdot 3 = 160,21 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого тринитрата нитроизобутилглицерина:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 286,12/160,21 = 1,79 \text{ г/см}^3$ .

Плотность жидкого тринитрата нитроизобутилглицерина:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для алифатических соединений  $k = 0,92$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,92 \cdot 1,79 = 1,65 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого тринитрата нитроизобутилглицерина составляет  $1,640 \text{ г/см}^3$  [67].

2. Diethyleneglycol dinitrate,  $C_4H_8O_7N_2$ ,  $M = 196,12$  г/моль

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
$-CH_2-$	14,77	2
$-CH_2ONO_2$	46,77	2
$-O-$	4,19	1

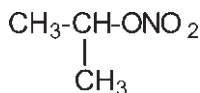
Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 14,77 \cdot 2 + 46,77 \cdot 2 + 4,19 = 127,27 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого динитрата диэтиленгликоля:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 196,12/127,27 = 1,54$  г/см<sup>3</sup>.

Плотность жидкого динитрата диэтиленгликоля:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для алифатических соединений  $k = 0,92$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,92 \cdot 1,54 = 1,41$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого динитрата диэтиленгликоля составляет 1,380 г/см<sup>3</sup> [67].

3. Isopropyl nitrate,  $C_3H_7O_3N$ ,  $M = 105,10$  г/моль

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
$-CH_3$	28,52	2
$>CHONO_2$	39,24	1

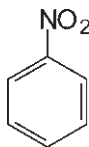
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 28,52 \cdot 2 + 39,24 = 96,28 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого изопропилнитрата:  $\rho_{\text{мк}} = M/V = 105,10/96,28 = 1,09$  г/см<sup>3</sup>.

Плотность жидкого изопропилнитрата:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для алифатических соединений  $k = 0,92$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,92 \cdot 1,09 = 1,00$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого изопропилнитрата составляет 1,04 г/см<sup>3</sup> [67].

4. Nitrobenzene,  $C_6H_5O_2N$ ,  $M = 123,11$  г/моль

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	23,52	1
$(C_{ar,hel}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,hel})-H$	7,96	5

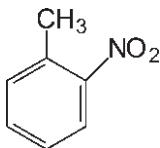
Мольный объем:


$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 + 7,96 \cdot 5 = 89,10 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого нитробензола:  $\rho_{mk} = M/V = 123,11/89,10 = 1,38$  г/см<sup>3</sup>.

Плотность жидкого нитробензола:  $\rho_{ж} = k \cdot \rho_{mk}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{ж} = 0,88 \cdot 1,38 = 1,22$  г/см<sup>3</sup>.

Опытное значение  $\rho_{ж}$  жидкого нитробензола составляет 1,229 г/см<sup>3</sup> [67].

5. o-Nitrotoluene,  $C_7H_7O_2N$ ,  $M = 137,13$  г/моль

Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	23,52	1
$(C_{ar,hel}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,hel})-H$	7,96	4
$(C_{ar,hel}, N_{het})-CH_3$	22,04	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 23,52 + 25,78 + 7,96 \cdot 4 + 22,04 = 103,18 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого о-нитротолуола:  $\rho_{\text{МК}} = M/V = 137,13/103,18 = 1,329 \text{ г/см}^3$ .

Плотность жидкого о-нитротолуола:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{МК}}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,329 = 1,17 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение плотности жидкого о-нитротолуола составляет  $1,163 \text{ г/см}^3$  [67].

6. 2,2,2-trinitroethyl-2'-nitroxyethyl ether, TNEN,  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_{10}\text{N}_4$ ,  
 $M = 270,11 \text{ г/моль}$



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
$-\text{C}(\text{NO}_2)_3$	75,40	1
$-\text{CH}_2-$	14,77	2
$-\text{O}-$	4,19	1
$-\text{CH}_2\text{ONO}_2$	46,77	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 75,40 + 14,77 \cdot 2 + 4,19 + 46,77 = 155,90 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого 2,2,2-тринитроэтил-2'-нитроэтоксифиэра:

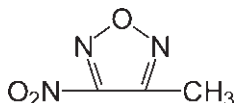
$$\rho_{\text{МК}} = M/V = 270,11/155,90 = 1,73 \text{ г/см}^3.$$


Плотность жидкого 2,2,2-тринитроэтил-2'-нитроэтоксифиэра:

$$\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{МК}} \text{ (для алифатических соединений } k = 0,92) \rho_{\text{ж}} = 0,92 \cdot 1,73 = 1,59 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого 2,2,2-тринитроэтил-2'-нитроэтоксифиэра составляет  $1,55 \text{ г/см}^3$  [67].

7. 3-Methyl-4-nitrofurazane,  $\text{C}_3\text{H}_3\text{O}_3\text{N}_3$ ,  $M = 129,07 \text{ г/моль}$



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(C_{ar,hel}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,hel}, N_{het})-CH_3$	22,04	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 + 22,04 = 81,76 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого 3-метил-4-нитрофуразана:

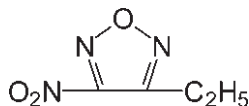
$$\rho_{mk} = M/V = 129,07/81,76 = 1,58 \text{ г/см}^3.$$


Плотность жидкого 3-метил-4-нитрофуразана:

$$\rho_{ж} = k \cdot \rho_{mk} \text{ (для ароматических и гетероароматических соединений } k = 0,88) \rho_{ж} = 0,88 \cdot 1,58 = 1,39 \text{ г/см}^3.$$

Опытное значение  $\rho_{ж}$  жидкого 3-метил-4-нитрофуразана составляет 1,38 г/см<sup>3</sup> [76].

8. 3-Ethyl-4-nitrofurazane,  $C_4H_5O_3N_3$ ,  $M = 143,10$  г/моль



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(C_{ar,hel}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,hel})-CH_2-$	10,19	1
$-CH_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 + 10,19 + 28,52 = 98,43 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

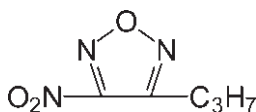
Плотность твердого 3-этил-4-нитрофуразана:


$$\rho_{mk} = M/V = 143,10 / 98,43 = 1,45 \text{ г/см}^3.$$

Плотность жидкого 3-этил-4-нитрофуразана:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,45 = 1,28 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого 3-этил-4-нитрофуразана составляет  $1,28 \text{ г/см}^3$  [76].

9. 3-Propyl-4-nitrofurazane,  $\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_3\text{N}_3$ ,  $M = 157,13 \text{ г/моль}$



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}, \text{N}_{\text{het}}) - \text{NO}_2$	25,78	1
$(\text{C}_{\text{ar,het}}) - \text{CH}_2$	10,19	1
$-\text{CH}_2$	14,77	1
$-\text{CH}_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 + 10,19 + 14,77 + 28,52 = 113,20 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

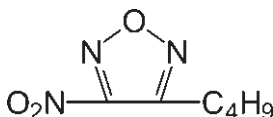
Плотность твердого 3-пропил-4-нитрофуразана:


$$\rho_{\text{мк}} = M/V = 157,13 / 113,20 = 1,39 \text{ г/см}^3.$$

Плотность жидкого 3-пропил-4-нитрофуразана:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,39 = 1,22 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого 3-пропил-4-нитрофуразана составляет  $1,21 \text{ г/см}^3$  [76].

10. 3-Butyl-4-nitrofurazane,  $\text{C}_6\text{H}_9\text{O}_3\text{N}_3$ ,  $M = 171,16 \text{ г/моль}$



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,het})-CH_2$	10,19	1
$-CH_2$	14,77	2
$-CH_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 + 10,19 + 14,77 \cdot 2 + 28,52 = 127,97 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

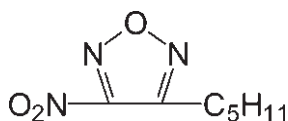
Плотность твердого 3-бутил-4-нитрофуразана:


$$\rho_{\text{мк}} = M/V = 171,16/127,97 = 1,34 \text{ г/см}^3.$$

Плотность жидкого 3-бутил-4-нитрофуразана:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,34 = 1,18 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого 3-бутил-4- нитрофуразана составляет  $1,167 \text{ г/см}^3$  [76].

### 11. 3-Pentyl-4-nitrofurazane, $C_7H_{11}O_3N_3$ , $M = 185,19 \text{ г/моль}$



Фрагменты		
Вид	$V_i$	Число
	33,94	1
$(C_{ar,het}, N_{het})-NO_2$	25,78	1
$(C_{ar,het})-CH_2$	10,19	1
$-CH_2$	14,77	3
$-CH_3$	28,52	1

Мольный объем:

$$V = \sum V_i + \sum \delta_i = 33,94 + 25,78 + 10,19 + 14,77 \cdot 3 + 28,52 = \\ = 142,74 \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Плотность твердого 3-пентил-4- нитрофуразана:

$$\rho_{\text{мк}} = M/V = 185,19/142,74 = 1,30 \text{ г/см}^3.$$

Плотность жидкого 3-пентил-4-нитрофуразана:  $\rho_{\text{ж}} = k \cdot \rho_{\text{мк}}$  (для ароматических и гетероароматических соединений  $k = 0,88$ )  $\rho_{\text{ж}} = 0,88 \cdot 1,30 = 1,14 \text{ г/см}^3$ .

Опытное значение  $\rho_{\text{ж}}$  жидкого 3-пентил-4- нитрофуразана составляет  $1,124 \text{ г/см}^3$  [76].



## ЛИТЕРАТУРА

1. *J. R. Stine*. Prediction of Crystal Densities of Organic Explosives by Group Additivity. NM: LANL, Los Alamos, Report, LA 8920, UC 45. 1981. P. 102.
2. *Китайгородский А. И. и др.* Строение органических и элементоорганических молекул. М.: Наука. 1984. 215 с.
3. *Holden J. R.* Prediction of possible crystal structures for C-, H-, N-, O-, and F-containing organic compounds. *J. Comp. Chem.* 1993. 14. P. 422–430.
4. *Dzyabchenko A. V., Pivina T. S., Arnautova E. A.* Prediction of structure and density for organic nitramines // *Journal of Molecular Structure*. 1996. 378(2). P. 67–82.
5. *Dzyabchenko A. V.* From molecule to solid: The prediction of organic crystal structures // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2008. 82(10). P. 1663–1671.
6. *Kendrick J., Leusen F. J. J., Neumann M. A., van de Streek J.* Progr. in Crystal Structure Prediction. *Chemistry — A European Journal*. 2011. 17. 10736.
7. *Rahimi R., Akbarzadeh A. R., Keshavarz M. H.* Prediction of The Density of Energetic Materials on The Basis of Their Molecular Structures. *Central European Journal of Energetic Materials*. 2016. 13(1). P. 73–101.
8. *Poltzner P., Lane P., Murray J. S.* Electrostatic Potentials, Intralattice Attractive Forces and Crystal Densities of Nitrogen-Rich C, H, N, O Salts. *Crystals*. 2016. 6(1). P. 7.
9. *Смирнов А. С., Смирнов С. П., Пивина Т. С., Лемперт Д. Б., Маслова Л. К.* Известия АН, Серия химическая. 2016. 10. С. 2315–2331.
10. *Tarver C. M.* Density estimations for explosives and related compounds using the group additives approach // *J. of Chem. and Eng. Data*. 1979. 24(2). P. 136–145.
11. *Immirizi A., Perini B.* Prediction of density in organic crystals. *Acta Cryst.* 1977. A33. P. 216–218.
12. *Котомин А. А., Козлов А. С.* Плотность органических соединений. Метод расчета плотности по вкладам фрагментов молекул: Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ(ТУ). 2005. 38 с.; переиздано 2011. 43 с.
13. *Котомин А. А., Козлов А. С.* Метод расчета плотности органических соединений по вкладам фрагментов молекул // *Журнал прикладной химии*. 2006. Т. 79. Вып. 6. С. 966–977.
14. *Kotomin A. A., Kozlov A. S.* Calculation of Densities of Organic Compounds from Contributions of Molecular Fragments // *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2006. 79(6). 957–966.
15. *Воскобойников И. М.* Ударная адиабата мочевины // *Химическая физика*. 2010. Т. 29. № 5. С. 67–70.
16. *А. А. Котомин, С. А. Душенков, В. В. Ефанов А. С. Козлов, М. А. Трапезников, В. В. Горовцов.* Новые пути создания взрывчатых материалов для систем

разделения летательных аппаратов // Общероссийский научн.-техн. журнал «Полет». 2008. № 11. С. 33–41.

17. A. A. Kotomin, N. P. Shirokova, S. A. Dushenok, E. N. Breshev, V. V. Efanov and V. V. Gorovtsov. Detonation Pressure of Explosive Charges Applied in Spacecraft Division Systems // Solar System Research. 2011. Vol. 45. No. 7. P. 677–683.

18. Новый справочник химика-технолога. Основные свойства неорганических, органических и элементоорганических соединений / Под ред. Н. К. Скворцова СПб.: НПО «Мир и семья». 2002. 1276 с.

19. Физико-химические свойства индивидуальных углеводов / Под ред. В. М. Татевского М.: Гостехиздат. 1960. 310 с.

20. Dictionary of Organic Compounds / Heilbron I., Bunbury H. M., eds. London, 1946. Vol. 1–3.

21. Химический энциклопедический словарь / Под ред. А. М. Прохорова. М.: Советская энциклопедия. 1983. 792 с.

22. Fieser L. F., Fieser M. Reagents for Organic Synthesis. New York-London-Sydney. John Wiley & Sons, 1968. Vol. 1–6.

23. Багрий Е. И. Адамантаны. Получение, свойства, применение. М.: Наука, 1989. 265 с.

24. Орлова Е. Ю. Химия и технология бризантных взрывчатых веществ. Л.:Химия. 1968. 688 с.

25. Физер Л, Физер М. Реагенты для органического синтеза. М.: Мир. 1975. Т. 1–6 (444 с., 476 с., 475 с., 286 с., 720 с., 398 с.).

26. Энергетические конденсированные системы. Краткий энциклопедический словарь / Под ред. Б. П. Жукова. М.: Янус-К, 2000. 595 с.

27. Dudek K., Marecek P., Jalovy Z. Synthesis and some properties of 1,1,3-trinitriazetidine (TNAZ). New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 4<sup>th</sup>. Pardubice, Czech. Rep. 11–12 April, 2001. 75–80.

28. Suceska M., Zeman S., Rajir M., Jalovy Z. Theoretical prediction of TNAZ detonation properties. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 4<sup>th</sup>. Pardubice, Czech. Rep. 11–12 April, 2001. 308–318.

29. Jalovy Z, Matias R. The influence of reaction conditions on TEX synthesis. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 5<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Rep. 24–25 April, 2002. 92–98.

30. Doherty R. M., Simpson R. L. A Comparative Evaluation of Several Insensitive High Explosives. 28-th Int. Ann. Conf. Energ. Mater. Karlsruhe, FRG. 24–27 June, 1997. 32/1–32/23.

31. Sikder A.K., Maddala G., Agrawal J.P, Singh H. Important aspects of behavior of organic energetic compounds: a review // J. of Hazardous Materials. 2001. A84. 1–26.

32. Lewczuk R., Szala M., Recko J. Energetic properties of semicarbazidium 4, 4', 5, 5'-tetranitro- 2, 2'-biimidazolate. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. 173–177.

33. Fischer D., Klapotke T. M., Stierstorfer J. Energetic materials based on 3, 5-diamino -1-nitroguanidine. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. 117–129.

34. *Sinditskii V., Serushkin V., Egorshhev V., Rudakov G., Filatov S., Smirnov S., Nguen N.* Comparative study of combustion mechanism of guanidine salts: Triaminoguanidine and 3, 6-diguanidino-1, 2, 4, 5-tetrazine. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 273–281.

35. *Evangelisti C., Izsak D., Klapoetke T. M., Stierstorfer J.* Preparation and characterization of 5-azido-3-nitro-1H-1,2,4-triazole and selected metal salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 556–569.

36. *Klapoetke T. M., Piercey D. G., Stierstorfer J.* Energetic salts of the azidotetrazolate-2-oxide anion. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 657–673.

37. *Ilyushin M. A., Shugalei I. V.* Sensitivity of bis (3(5)-hydrazine-4-amino-1,2,4-triazole) copper (II) perchlorate with additives to laser pulse. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 637–643.

38. *Sabate C. M., Delalu H.* Study of metal salts of the 4,5-dicyano-2H-1,2,3-triazole anion as pyrotechnic ingredients. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 747–750.

39. *Rudakov G., Egorshhev V., Borodavina A., Garbuz O.* Synthesis and properties of 3-nitroguanidino-1,2,4-triazolo [4,3-b]-s-tetrazine and its salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 773–779.

40. *Bostanabad A. S., Strashnov P., Ziuzin I., Kovalchukova O.* Structure and some properties of the salts of N-nitroso-N-ethyl (phenyl) hydroxylamine. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 800–803.

41. *Zhang J. G., Wu J. T., Sun M., Yin X., Zhang T. L.* Synthesis, structure and thermal analysis of 3-hydrazine-4-amino-1,2,4-triazole energetic salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 432–439.

42. *Forquet V., Darwich C., Jacob G., Labarthe E., Delalu H.* Heats of formation of 2,2-dimethyltriazanium salts: experimental and computational approaches. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 578–590.

43. *Gidasov A. A., Bakharev V. V., Zalomlenkov V. A., Burkov P. S., Artemyeva I. I., Kuleshova I. A.* The interaction of 2,4,6-trichloro-1,3,5-triazine with trinitromethane salts and adamantly alkanols. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 605–608.

44. *Fischer D., Klapoetke T. M., Stierstorfer J.* The synthesis and characterization of 1-hydroxy-5-aminotetrazole and highly energetic azo-bis(1-hydroxytetrazole) and their ionic derivatives. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 146–153.

45. *Li Y. C., Lin Q. H., Liu W., Pang S. P.* New methods for the synthesis of 5-nitrotetrazole-2-N-oxides. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 231–236.

46. Tremblay M. Synthesis of some tetrazole salts. Can // J. Chem. 1965. 43(5). P. 1230–1232.
47. Klapotke T. M., Mayr N., Stierstorfer J., Weyrauther M. Energetic ionic derivatives of 5,5'-dinitromethyl-3,3'bis(1,2,4-oxadiazole). New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 974–987.
48. Lloyd H. J., Pulham C. R., Cumming A., Williamson D., Jardine A. Energetic co-crystals-structural studies of nitrotriazolone salts and co-crystals. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 397–305.
49. Wu J., Zhang J., Zheng B., Yang B., Liu Y., Jiao Q., Zhang T. The high-nitrogen energetic ionic salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 456–468.
50. Gidasov A. A., Bakharev V. V., Golovina O. V., Selezneva E. V. Synthesis of potassium salts of 2,4- diamino(alkylamino)-6-dinitromethyl-1,3,5-triazine and salts of 2-hydrazinyl-4-amino (alkylamino)-6-dinitromethyl-1,3,5-triazine. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 653–657.
51. Huber S., Izsak D., Karaghiosoff K., Klapotke T. M., Reuter S. Energetic salts of 5-(5-azido-1H-1,2,4-triazol-3-yl)tetrazole. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 712–720.
52. Klapotke T. M., Stierstorfer J., Witkowski T. Synthesis of copper salts of 1 -substituted-5-nitriminetetrazaoles. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 774–782.
53. Lewczuk R., Wasilewska M., Szala M. Synthesis and properties of some new salts of 4,4',5,5'-tetranitro-2,2'-biimidazole. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 825–830.
54. Liu W., Lin Q., Yang Y., Li Y., Yang B., Pang S. High thermally stable and insensitive energetic salts based on s-triazine cation. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 9–11, 2014. P. 831–840.
55. Ek S., Yudina-Wahlstrum L., Latypov N. Salts of 4-picryl-3, 5-dinitropyrazoles with high decomposition temperatures New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. P. 542–545.
56. Ilyushin M., Smirnov A., Tselinskii I., Shugalei I. An environmental friendly method for the preparation of 5-nitrotetrazole sodium salt. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. P. 564–572.
57. Kolesov V., Kapranov K., Levshenkov A., Levshenkova L., Sinditskii V. Thermochemistry of salts of 5,5'-azotetrazole with nitrogenous bases. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. P. 632–637.
58. Kunzel M., Selesovsky J., Matyas R. Characterization of tetraammine copper salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. P. 664–667.

59. *Klapotke T. M., Schmid P. C., Stierstorfer J., Suceska M.* Novel energetic bis-tetrazole-N-oxides-synthesis and characterization. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 17<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2014. P. 253–260.

60. *Пепекин В. И., Афанасьев Г. Т.* Взрывчатые свойства 1,2-динитрогуанидина и его композиции с графитом. Химическая физика. 2005. Т. 24. № 4. С. 66–68.

61. *Agrawal J. P.* Recent trends in high-energy materials. Prog. Energy Combust. Sci. 1998. 24. P. 1–30.

62. *Pagoria P. F., Lee G. S., Mitchell A. R., Schmidt R. D.* A review of energetic materials synthesis. Thermochimica Acta. 2002. 384. P. 187–204.

63. *Илюшин М. А., Целинский И. В.* Энергоемкие металлокомплексы в средствах инициирования // Российский химический журнал. 2001. Т. 45. № 1. С. 72.

64. *Илюшин М. А., Целинский И. В., Котомин А. А., Данилов Ю. Н.* Энергонасыщенные вещества для средств инициирования: Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ(ТУ). 2013. 177 с.

65. *Klapötke T. M.* Chemistry of High-Energy Materials. 3rd edn. Walter de Gruyter. Berlin. 2015. 319 p.

66. *Pagoria P.* A Comparison of the Structure, Synthesis and Properties of Intensive Energetic Compounds. Propellants Explos. Pyrotech. 2016. 41. P. 452–469.

67. Пироправка: Справочник по взрывчатым веществам, порохам и пиротехническим составам. 6-е изд. М., 2012.

68. *Pepekin V. I.* Tendencies in the Development of Studies of High Explosives // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2010. 4(6). P. 954–962.

69. *Лемперт Д. Б., Нечипоренко Г. Н., Согласнова С. И.* Зависимость удельного импульса композиций ракетных топлив, содержащих окислители на базе атомов С, N и O, от энтальпии образования и элементного состава окислителя // Химическая физика. 2004. Т. 23, № 5. С. 75–81.

70. *Schmid P. C., Klapotke T. M., Stierstorfer J.* New energetic aminotriazoles. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 18<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 15–17, 2015. P. 265–273.

71. *Sabate C. M., Delalu H.* Quaternary ammonium energetic salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 15<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 18–20, 2012. P. 751–756.

72. *Gebel M., Klapotke T., Thumbs P. C.* Guanidinium Nitroformate Salts: Possible New Oxidizers for High Performance, Halogen Free Solid. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 9<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 19–21, 2006. P. 127–134.

73. *Izsak D., Klapotke T. M., Reuter S.* Preparation and characterization of 5-(5-azido-1H-1,2,4-triazol-3-yl)tetrazol-1-ol and selected energetic salts. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 686–699.

74. *Fischer N., Joas M., Klapotke T. M., Stierstorfer J.* Transition Metal Complexes of 3-Amino-1-nitroguanidine as Laser Ignitable Primary Explosives:

Structures and Properties. Inorganic Chemistry. 2013. 52 (23). P. 13791–13802.

75. А. В. Смирнов, С. А. Федотов, М. В. Азеев, М. А. Илюшин. Перхлорат (5-нитротетразолато- $N^2$ )пентаамминкобальта(III). Получение и свойства // Научно-технический журнал «Боеприпасы и высокоэнергетические конденсированные системы». 2016. № 3. Р. 27–33.

76. Lotmentsev Yu. M., Kondakova N. N., Bakeshko A. V., Kozeev A. M., Sheremetev A. B. 3-Alkyl-4-nitrofurazanes - Plastisizers for Polymers. Chemistry of Heterocyclic Compounds. 2017. 53(6/7). P. 740–745.

77. Axthammer Q. J., Kettner M. A., Klapötke T. M., Moll R., Rest S. F. Progress in the development of high energy dense oxidizers based on  $CHNO(F)$  materials. New Trends Res. Energ. Mater., Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 28–38.

78. Воскобойников И. М., Котомин А. А., Душенюк С. А., Яковлева О. Ф. Разложение нитратов спиртов и их растворов в детонационной волне // Химическая физика. 1986. Т. 5, № 6. С. 852–854.

79. Воскобойников И. М., Душенюк С. А., Котомин А. А. Критические диаметры детонации растворов бис(фтординитроэтил)формаль // Химическая физика. 1998. Т. 17, № 11. С. 130–139.

80. Воскобойников И. М., Душенюк С. А., Котомин А. А. Пределы ударно-волнового инициирования взрыва жидких бис(фтординитроэтил)формаль и 1,6-диазидо-2-ацетоксигексана // Химическая физика. 1998. Т. 17, № 12. С. 58–61.

81. Воскобойников И. М., Душенюк С. А., Котомин А. А. Критические диаметры детонации растворов взрывчатых веществ // Материалы XIII Международной конференции «Уравнения состояния вещества». 1998. Терскол. С. 117–118.

82. Воскобойников И. М., Душенюк С. А., Котомин А. А. Критические диаметры детонации растворов взрывчатых веществ // Материалы Международной конференции «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург. 1998. С. 97–99.

83. I. M. Voskoboinikov, S. A. Dushenok and A. A. Kotomin. The limits of shock-initiated explosion in liquid bisfluorodinitroethylformal (FEFO) and 1,6-diazido-2-acetoxylhexane. Critical diameters of detonation of bis(fluorodinitroethyl)formal solutions. 32 Int. Annual Conf. of ICT. 2001, July 3–6. Karlsruhe, Fed. Rep. of Germ. P. 112-1–112-11.

84. Васильева И. В., Душенюк С. А., Котомин А. А. Расчет критического диаметра детонации однородных и гетерогенных взрывчатых систем с инертными органическими добавками: методические указания. Л.: ЛТИ им. Ленсовета. 1983. 27 с.

85. Апин А. Я., Велина Н. Ф. О критических диаметрах зарядов ВВ и скорости детонации гексогена. В книге: Взрывное дело. М.: Недра. 1967. № 63/20. С. 5–37.

86. Воскобойникова Н. Ф. Критические диаметры детонации растворов жидких взрывчатых веществ. «Горение и взрыв» // Материалы 3-го Всесоюзного симпозиума по горению и взрыву. М.: Наука. 1972. С. 474–479.



87. Котомин А. А. Расчет детонационных параметров взрывчатых веществ с инертными добавками: Метод. указания. Л.: ЛТИ им. Ленсовета. 1977. 32 с.
88. Котомин А. А. Эластичные взрывчатые материалы // Российский химический журнал. 1997. Т. 41, № 4. С. 89–101.
89. Kusakabe M., Fujiwara S. Effects of liquid diluents on detonation propagation in nitromethane. VI Symp. on Detonation. 1976. P. 60–70.
90. Курбангалина Р. Х., Пацков Е. А., Стесик Л. Н. и др. Детонация жидкой азотистоводородной кислоты и её водных растворов // ПМТФ. 1970. № 4. С. 160–165.
91. Г. А. Авакян. Расчет энергетических и взрывчатых характеристик ВВ. М.: изд. Военной Инженерной Академии им. Ф. Э. Дзержинского. 1964.
92. Kamlet M. J., Hurwitz H. // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 48, № 8. P. 3685.
93. И. Н. Айзенштадт. Метод расчёта идеальной скорости детонации конденсированных ВВ. Физика горения и взрыва. 1976. № 5.
94. Пенекин В. И., Лебедев Ю. А. Критерии оценки параметров детонации взрывчатых веществ. — Докл. АН СССР. 1977. Т. 234. № 6. С. 1391–1394.
95. С. Г. Андреев, А. В. Бабкин, Ф. А. Баум и др. Физика взрыва / Под ред. Л. П. Орленко. 3-е изд., перераб. В 2 т. М.: Физматлит. 2002. Т. 1. 832 с.
96. Котомин А. А. Аддитивный метод расчета параметров детонации взрывчатых веществ по вкладам химических связей и групп: Метод. указания. Л.: ЛТИ им. Ленсовета. 1983. 25 с.
97. Котомин А. А. Взрывчатые вещества в системах пировавтоматики летательных аппаратов. Актуальные вопросы проектирования космических систем и комплексов. Российская академия космонавтики им. К. Э. Циолковского // Сб. научн. трудов. 2004. Вып. 5. С. 204–220.
98. Котомин А. А. Аддитивный метод расчета параметров детонации взрывчатых веществ по вкладам химических связей и групп. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Труды межд. конф. «ХИ Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 16–20 марта, 2009. С. 108–113.
99. Илюшин М. А., Котомин А. А., Душенюк С. А. Энергонасыщенные металлокомплексы // Химическая физика. 2019. Т. 38, № 2. С. 24–44.
100. M. A. Ilyushin, A. A. Kotomin and S. A. Dushenok. High-energy metalcomplexes. Russian Journal of Physical Chemistry B. 2019. Vol. 13. No. 1. pp. 119–138.
101. Дремин А. Н., Саевров С. Д., Трофимов В. С., Шведов К. К. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука. 1970. 172 с.
102. Похил П. Ф., Беляев А. Ф. и др. Горение порошкообразных металлов в активных средах. М.: Наука. 1972.
103. Кук М. А. Наука о промышленных взрывчатых веществах. Пер. с англ., М.: Недра. 1980. 455 с.
104. Dewitte M. Explosifs. 1967. V. 18. № 3. P. 81.
105. Duff R. E., Houston E. J. Chem. Phys. 1955. 23. P. 1268.
106. Deal W. E. J. Chem. Phys. 1957. 27. P. 796.
107. Шалль Р. Физика детонации. В кн.: Физика высоких плотностей энергии. Пер. с англ. М.: Мир. 1974.

108. Юхансон К., Персон П. Детонация взрывчатых веществ. М.: Мир. 1973. С. 4–15.
109. Rothstein R., Petersen R. Predicting High Explosive Detonation Velocities from their Composition and Structure. Propellants, Explosives, Pyrotechnics. 1979. 4(3). P. 56–60.
110. Price D. Fourth Symposium on Detonation (preprints). 1965.
111. Яковлева Г. С., Курбангалина Р. Х., Стесик Л. Н. Скорость детонации азида гидразония. ФГВ. 1974. Т. 10. № 2. С. 270–274.
112. Hornig H. C., Lee E. L., Finger M. Fifth Symposium on Detonation (preprints). 1970. P. 503.
113. Воскобойников И. М., Апин А. Я. Измерение температуры детонационного фронта взрывчатых веществ. ДАН СССР. 1960. Т. 130, № 4. С. 804–806.
114. Баум Ф. А., Орленко Л. П., Станюкович К. П., Чельшев В. П., Шехтер Б. И. Физика взрыва. М.: Наука. 1975. С. 90–97.
115. Price D. Chem. Revs. 1959. 59. P. 801–815.
116. Еременко Л. Т., Нестеренко Д. А. и др. О связи между относительным импульсом взрыва и химическим составом взрывчатого вещества. В кн.: Химическая физика процессов горения и взрыва: Детонация. Черноголовка: изд. ОИХФ АН СССР. 1977. С. 76–79.
117. Finger M., Lee E. L., Helm F. H. et al. Six Symposium on Detonation (preprints). 1976. P. 172–181.
118. Rouse P. E. J. Chem. Eng. Data. 1976. Vol. 21, № 1. P. 16–20.
119. Kury J. W., Hornig H. C., Lee E. L. et al. Fourth Symposium on Detonation (preprints). 1965. P. 3–13.
120. Кондриков Б. Н., Шаповал В. Н. О методах расчета скорости детонации CHNO — взрывчатых веществ. В кн.: Химическая физика конденсированных взрывчатых систем. М.: изд. МХТИ им. Д. И. Менделеева. 1979. Вып. 104.
121. Чельшев В. П., Шехтер Б. И., Шушко Л. А. Теория горения и взрыва. М.: изд. Мин-ва Оборон СССР. 1970.
122. Козак Г. Д., Кондриков Б. Н., Старшинов А. В. Критический диаметр детонации нитроэфиров. В кн.: Химическая физика конденсированных взрывчатых систем. М.: изд. МХТИ им. Д. И. Менделеева. 1979. Вып. 104.
123. Райнхардт Дж., Пирсон Дж. Взрывная обработка металлов. М.: Мир. 1966.
124. Баум Ф. А., Державец А. С. и др. Термостойкие ВВ и их действие в глубоких скважинах. М.: Недра. 1969.
125. Воскобойников И. М., Кутепов Р. П., Воскобойникова Н. Ф., Соснова Г. С., Фокин А. В. Изв. АН СССР, Сер. химическая. 1975. С. 1893.
126. Shiino K., Oinuma S. J. Ind. Explos. Soc. Japan. 1964. Vol. 25, № 27.
127. Хмельницкий Л. И. Справочник по взрывчатым веществам. М.: ВИА им. Ф. Э. Дзержинского. 1961. 842 с.
128. Matyáš R., Pachman J. Primary Explosives. Heidelberg: Springer. 2013. 338 p.
129. Green energetic materials. Ed. Tore Brinck. Chichester: John Wiley & Sons Ltd. 2014. 280 p.



130. *Kaim W., Schwederski B., Klein A.* Bioinorganic Chemistry — Inorganic Elements in the Chemistry of Life: An Introduction and Guide. 2<sup>nd</sup> edn, John Wiley & Sons. New York. 2013. 425 p.

131. *Илюшин М., Шугалей И., Судариков А.* Высокоэнергетические металлокомплексы. Синтез, свойства, применение. Saarbrücken: LAP Lambert Academic Publishing RU. 2017. 268 с.

132. *Илюшин М. А., Судариков А. М., Целинский И. В., и др.* Металлокомплексы в высокоэнергетических композициях: монография / Под ред. И. В. Целинского. СПб.: ЛГУ им. А. С. Пушкина. 2010. 188 с.

133. *Илюшин М. А., Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В.* Перспективные взрывчатые вещества для безопасных средств инициирования в системах пиротехники космических аппаратов // Сб. научн. трудов НПО им. С. А. Лавочкина. Российская академия космонавтики им. К. Э. Циолковского. 2002. Вып. 4. М., С. 87–96.

134. *М. А. Илюшин, А. А. Котомин, С. А. Душенюк, В. В. Ефанов.* Лазерное иницирование светочувствительных энергетических материалов, перспективных для систем пиротехники космических аппаратов // Научно-технический журнал «Вестник НПО им. С. А. Лавочкина». 2017. № 1. С. 43–52.

135. *Илюшин М. А., Котомин А. А., Душенюк С. А.* «Зеленые» энергетические материалы и их лазерное иницирование. В книге: Физико-химические аспекты предельных состояний и структурных превращений в сплошных средах, материалах и технических системах: Вып. 2 / Под общ. ред. чл.-корр. РАН Ю. В. Петрова. СПб НЦ РАН: Политехника. 2018. С. 42–50.

136. *Котомин А. А., Петрова Н. А., Данилов Ю. Н., Илюшин М. А.* Метод расчета скорости детонации комплексных соединений с анионом-окислителем: Методические указания. Л.: ЛТИ им. Ленсовета. 1987. 23 с.

137. *M. A. Ilushin, A. V. Smirnov, A. A. Kotomin, I. V. Tselynsky.* Estimation of density and detonation velocity of tetrazole Co (III) complexes. *Energetic materials*. 1994. Vol. 2. № 1. P. 16–20 (China).

138. *Котомин А. А., Илюшин М. А., Душенюк С. А., Широкова Н. П., Ефанов В. В., Горюхов В. В.* Методы расчета характеристик энергонасыщенных металлокомплексов, перспективных для систем пиротехники космических аппаратов // Общероссийский научн.-техн. журнал «Полет». 2018. № 3. С. 41–51.

139. *Котомин А. А., Петров И. В., Гидасов Б. В.* Детонация взрывчатых веществ с инертными добавками // Сб. науч. трудов «Горение и взрыв». М.: Наука. 1977. С. 428–433.

140. *Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С.* Эластичные взрывчатые вещества для аэрокосмической техники: основы построения, свойства, применение. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Труды межд. конф. «IX Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 12–16 марта, 2007. С. 124–130.

141. *А. А. Котомин, С. А. Душенюк, С. А. Лемешевский, Н. П. Широкова, В. В. Ефанов.* Комплексная методика расчета параметров эффективности высокоэнергетических материалов, используемых в детонационных устройствах разделения космического аппарата // Научно-технический журнал «Вестник НПО им. С. А. Лавочкина». 2017. № 2. С. 174–179.

142. *Trzcinski, W, Belaada, A.* 1,1-Diamino-2,2-dinitroethene (DADNE, FOX-7) — Properties and Formulations (a Review). *Central European Journal of Energetic Materials*. 2016. Vol. 13, No 2. P. 527–544.

143. *Козлов А. С., Котомин А. А., Душенюк С. А., Трапезников М. А.* Исследование критических диаметров и скоростей детонации 1,1-динитро-2,2-диаминоэтилена (Fox-7) // Матер. межд. конф. «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург — Новгород, 5–10 сентября, 2010. С. 46–49.

144. *Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С., Трапезников М. А.* Детонационная способность и скорости детонации Fox-7. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Труды межд. конф. «XIII Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 14–18 марта, 2011. С. 43–47.

145. *Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С., Илюшин М. А.* Детонационная способность и скорости детонации 1,1-диамино-2,2-динитроэтилена. *Химическая физика*. 2017. Т. 36, № 6. С. 57–60.

146. *A. A. Kotomin, S. A. Dushenok, A. S. Kozlov, and M. A. Ilyushin.* Detonation Ability and Detonation Velocity of 1,1-Diamino-2,2-Dinitroethylene. *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2017. Vol. 11, No. 3. P. 470–472.

147. *Воскобойников И. М., Котомин А. А.* Расчет параметров детонации смесей взрывчатых веществ с инертными добавками // *Физика горения и взрыва*. 1985. № 5. С. 93–97.

148. *Voskoboinikov I. M., Kotomin A. A.* Calculation of detonation parameters for explosive mixtures with inert additions. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 1985. Vol. 21, № 5. P. 600–604.

149. *Кривченко А. А., Шведов К. К., Дремин А. Н., Козлов В. С.* Исследование детонационных характеристик систем гексоген-наполнитель. *Физика горения и взрыва*. 1972. № 4.

150. *Smith L.* *Explosivstoffe*. 1967. V. 15, No. 5. P. 106–110.

151. *Афанасенков А. Н., Богомолов В. М., Воскобойников И. М.* Расчет параметров детонационной волны смесей взрывчатых веществ с инертными добавками // *Физика горения и взрыва*. 1970. № 2.

152. *Лютюв В. Д., Воскобойников И. М., Афанасенков А. Н., Апин А. Я.* Об оценке давления детонации ВВ, содержащих инертную добавку. В книге: *Взрывное дело*. М.: Недра. 1967. № 63/20.

153. *Finger M.* 4 Symp. (inter) on detonation. 1965.

154. *Воскобойников И. М., Котомин А. А., Воскобойникова Н. Ф.* Влияние инертных добавок на скорость метания пластин смесевыми взрывчатыми веществами // *Физика горения и взрыва*. 1982. № 6. С. 108–111.

155. *Дубнов Л. В., Бахаревиц Н. С., Романов А. И.* Промышленные взрывчатые вещества. М.: Недра. 1988. 358 с.

156. *B. T. Fedoroff, Sheffield O. E.* *Encyclopedia of Explosives and Related Items*. New Jersey, USA: Piccatiny Arsenal Dover. 1978. Vol. 8, P. 145.

157. *Evans M. W., Reese B. O., Seely L. B., Lee. E. L.* Shock initiation of low-density pressings ammonium perchlorate. *Proc. of 4<sup>th</sup> Symp. on Detonation*, October, 1965.

158. *Price D., Clairmont A. R., Jaffe I.* *Explosive Behavior of Ammonium Perchlorate*. White Oak, Silver Spring, Maryland: U.S. Naval Ordnance Laboratory. 1967.

159. Васильев Н. Н., Лысов А. Н., Котомин А. А., Душенюк С. А. Исследование скоростей детонации высокодисперсного перхлората аммония и его смесей с взрывчатыми веществами и алюминием. Матер. межд. конф. «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург; Новгород. 5–10 сентября, 2010. С. 75–79.

160. Душенюк С. А., Котомин А. А., Лысов А. Н. Скорости детонации высокодисперсного перхлората аммония и его смесей с взрывчатыми веществами и алюминием. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Труды межд. конф. «XIII Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 14–18 марта, 2011. С. 153–158.

161. Котомин А. А., Душенюк С. А., Илюшин М. А. Скорость детонации высокодисперсного перхлората аммония и его смесей с взрывчатыми веществами. Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53, № 3. С. 119–124.

162. A. A. Kotomin, S. A. Dushenok, and M. A. Ilyushin. Detonation Velocity of Highly Dispersed Ammonium Perchlorate and its Mixtures with Explosive Substances. Combustion, Explosion, and Shock Waves. 2017. Vol. 53, No. 3. P. 353–357.

163. Котомин А. А. Исследование неидеальной скорости детонации смесевых взрывчатых веществ // Матер. межд. конф. «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург. Октябрь, 2000. С. 45–47.

164. Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В. Параметры детонации гетерогенных взрывчатых композиций, предназначенных для систем разделения космических аппаратов // Сб. научн. трудов НПО им. С. А. Лавочкина. Российская академия космонавтики им. К. Э. Циолковского. 2002. Вып. 4. М. С. 97–107.

165. Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В. Общие принципы проектирования детонационных устройств разделения на основе эластичных взрывчатых веществ // Проектирование автоматических космических аппаратов для фундаментальных научных исследований: монография / Под ред. В. В. Хартова, К. М. Пичхадзе. В 3 т. Т. 3. Раздел 4.3.2. М.: Изд-во МАИ-Принт. 2014. С. 1238–1319.

166. Веретенников В. А., Дремин А. Н., Шведов К. К. Об определении параметров детонации конденсированных ВВ // Физика горения и взрыва. 1965. № 3. С. 3–9.

167. Ремпель Г. Г. К вопросу о зависимости величины химических потерь от размеров заряда. Физика горения и взрыва. 1967. № 2. С. 211–216.

168. Taylor J. Detonation in Condensed Explosives. Oxford. 1952. 260 p.

169. Ремпель Г. Г. В книге: Взрывное дело. Недра, 1959. № 52/9.

170. Димза Г. В. О детонации наполненных ВВ в зарядах малых диаметров. Физика горения и взрыва. 1972. № 2. С. 306–310.

171. Ефанов В. В., Горовцов В. В., Котомин А. А., Душенюк С. А. Современные системы детонационной автоматики космических аппаратов: проблемы, решения, основы проектирования. Фундаментальные и прикладные проблемы космонавтики. 2002. № 8. С. 37–41.

172. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, А. С. Козлов, В. В. Ефанов. Современные и перспективные высокоэнергетические материалы в системах детонационной автоматики аэрокосмических аппаратов // Общероссийский науч.-техн. журнал «Полет». 2005. № 8. С. 51–60.

173. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, А. С. Козлов, В. В. Ефанов. Эластичные взрывчатые материалы в системах разделения космических аппаратов. В книге: Перспективные материалы и технологии для ракетно-космической техники. Т. 3. / Под ред. А. А. Берлина и И. Г. Ассовского. М.: Торус Пресс. 2007. С. 256–266.

174. V.V.Efanov, V.V.Gorovtsov, Ya. G.Podobedov, A.A.Kotomin, S.A.Dushenok. New generation of detonation devices for spacecraft structure separation (design foundations) // Russian-American scientific Journal «Actual problems of aviation and aerospace systems: processes, models, experiment». 2007. Vol. 12, No. 3(25). P. 25–30.

175. Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В., Горовцов В. В. Новое поколение систем пиромеханики космических аппаратов на основе высокоэнергетических эластичных материалов // Сб. статей «Памяти Б. В. Гидаспова. Научные чтения», РНЦ «Прикладная химия». Изд-во ООО «ТЕЗА», Санкт-Петербург. 2008. С. 46–64.

176. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, В. В. Ефанов. Новое поколение систем детонационной автоматики космических аппаратов на основе высокоэнергетических эластичных материалов // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). 2010. № 9(35). С. 69–74.

177. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, В. В. Ефанов, В. В. Горовцов, А. С. Даниэльбек. Пиромеханические системы разделения // Многофункциональная космическая платформа «Навигатор» / Под ред. С. А. Лемешевского. Раздел 2–10 книги. Химки. Издатель ФГУП «НПО им. С. А. Лавочкина». 2017. С. 254–312.

178. Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В. Исследование детонационной способности эластичных ВВ, используемых в системах разделения космических аппаратов. Сб. научн. трудов НПО им. С. А. Лавочкина. М.: Российская академия космонавтики им. К. Э. Циолковского. 2002. Вып. 4. С. 122–132.

179. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С. Критические диаметры детонации гетерогенных взрывчатых систем. Матер. межд. конф. «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург. 18–23 июля, 2004. С. 97–100.

180. Козлов А. С., Котомин А. А., Душенюк С. А. Критические диаметры детонации взрывчатых веществ с органическими и неорганическими инертными добавками // Матер. межд. конф. «Современные проблемы технической химии». Казань. 22–24 декабря, 2004. С. 393–395.

181. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, А. С. Козлов. Детонационная способность гетерогенных взрывчатых систем. Сб. научн. статей Национального горного университета Украины «Импульсная обработка материалов». Днепропетровск. 2005. С. 98–110.

182. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С. Детонационная способность взрывчатых композиций с органическими и неорганическими инертными добавками. Сб. трудов Всероссийской научн.-техн. конф. «Успехи в специальной химии и химической технологии», ч. 2. 8–10 июня, 2005. РХТУ, Москва. С. 163–167.

183. Котомин А. А., Козлов А. С., Душенюк С. А. Исследование детонационной способности энергоемких гетероциклических соединений. Матер. межд. конф.

«Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург. 3–8 сентября, 2006. С. 92–96.

184. А. С. Козлов, А. А. Котомин, С. А. Душенюк, М. А. Трапезников. Критические диаметры детонации взрывчатых веществ с высокодисперсными неорганическими добавками. Вестник Днепропетровского университета, Украина. 2006. № 9/2. С. 55–61.

185. Котомин А. А., Козлов А. С., Душенюк С. А. Исследование детонационной способности энергоемких гетероциклических соединений. Химическая физика. 2007. Т. 26, № 12. С. 5–7.

186. А. А. Котомин, А. С. Козлов, С. А. Душенюк, М. А. Трапезников. Детонационная способность взрывчатых композиций с тяжелыми высокодисперсными металлами, оксидами и солями. Сб. научн. статей Национального горного университета Украины «Физика и техника высокоэнергетической обработки материалов». Днепропетровск. 2007. С. 19–30.

187. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С. Детонационная способность взрывчатых веществ с инертными добавками // Материалы Всероссийской конференции «Ударные волны в конденсированных средах». Санкт-Петербург. 23–26 ноября, 2008. С. 65–72.

188. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С. Критические диаметры детонации взрывчатых композиций с органическими и неорганическими инертными компонентами. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны». Труды межд. конф. «ХХ Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 16–20 марта, 2009. С. 11–16.

189. Котомин А. А., Душенюк С. А., Ефанов В. В., Трапезников М. А., Козлов А. С., Горовцов В. В. Критические диаметры детонации взрывчатых материалов, используемых в системах разделения космических аппаратов // Научно-технический журнал «Вестник ФГУП «НПО им. С. А. Лавочкина». 2010. № 1. С. 24–31.

190. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С., Трапезников М. А., Брешев Е. Н., Ефанов В. В., Горовцов В. В. Регулирование детонационной способности взрывчатых материалов, применяемых в системах разделения космических аппаратов // Научно-технический журнал «Вестник ФГУП «НПО им. С. А. Лавочкина». 2012. № 2. С. 12–18.

191. Котомин А. А., Козлов А. С., Душенюк С. А., Трапезников М. А. Детонационная способность бинарных смесей взрывчатых веществ. Матер. межд. конф. «Ударные волны в конденсированных средах». Киев, Украина. 16–21 сентября, 2012. С. 354–360.

192. A. A. Kotomin, S. A. Dushenok, V. V. Efanov, M. A. Trapeznikov, A. S. Kozlov and V. V. Gorovtsov. Critical Diameters of Detonation of Explosives Used in Spacecraft Separation Systems. Solar System Research. 2011. Vol. 45, No. 7. P. 631–637.

193. A. A. Kotomin, S. A. Dushenok, A. S. Kozlov, M. A. Trapeznikov, E. N. Breshev, V. V. Efanov and V. V. Gorovtsov. Regulation of Detonation Ability Explosive Materials, used in Spacecraft Separation Systems. Solar System Research. 2012. Vol. 46, No 7. P. 511–518.

194. А. А. Котомин, С. А. Душенюк, В. В. Ефанов, А. С. Козлов. Регулирование параметров эффективности высокоэнергетических материалов, применяемых



в системах детонационной автоматики космических аппаратов // Общероссийский науч.- техн. журнал «Полет». 2013. № 2. С. 11–23.

195. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С., Трапезников М. А. Критические диаметры детонации микронных взрывчатых веществ и их смесей. «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» // Сб. тезисов докладов межд. конф. «XV Харитоновские тематические научные чтения». Саров. 18–22 марта, 2013. С. 21–24.

196. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С. Критические диаметры детонации гетерогенных взрывчатых систем. Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). 2013. № 21 (47). С. 43–51.

197. Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С., Баранник Д. А., Широкова Н. П., Илюшин М. А. Критические диаметры детонации высокодисперсных энергетических веществ // Журнал прикладной химии. 2016. Т. 89. Вып. 5. С. 660–667.

198. A. A. Kotomin, S. A. Dushenok, A. S. Kozlov, D. A. Barannik, N. P. Shirokova, and M. A. Il'yushin. Critical Detonation Diameters of Highly Dispersed Energetic Substances // Russian Journal of Applied Chemistry. 2016. Vol. 89, No. 5. P. 793–799.

199. Котомин А. А., Душенюк С. А., Запорожченко Я. И., Яковлев С. М., Козлов А. С., Илюшин М. А. Детонационная способность водных суспензий взрывчатых веществ // Журнал прикладной химии. 2016. Т. 89. Вып. 6. С. 819–824.

200. Kotomin A. A., Dushenok S. A., Zaporozhchenko Ya. I., Yakovlev S. M., Kozlov A. S., and Ilyushin M. A. Detonability of Aqueous Suspensions of Explosives // Russian Journal of Applied Chemistry. 2016. Vol. 89, No. 6. P. 975–979.

201. Кобылкин И. Ф. Вычисление критического диаметра детонации зарядов взрывчатого вещества по данным их ударно-волнового инициирования. Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42, № 2. С. 112–115.

202. Кобылкин И. Ф., Соловьев В. С., Бойко М. М. Критический диаметр стационарной детонации высокоплотных ВВ. Влияние оболочки // Физика горения и взрыва. 1983. Т. 19, № 4. С. 120–123.

203. Кобылкин И. Ф., Селиванов В. В., Соловьев В. С., Сысоев Н. Н. Ударные и детонационные волны. Методы исследования. М.: Физматлит. 2004.

204. DeHope A., Pagoria P. F., Parrish D. New polynitro alkylamino furazans. New Trends Res. Energ. Mater. Proc. Semin., 16<sup>th</sup>. Pardubice, Czech Republic. April 10–12, 2013. P. 129–135.

205. Philip Pagoria. New Candidate Booster and Detonator Materials. 2016. Lawrence Livermore National Laboratory. (15-ERD-044).

206. Fischer N., Fischer D., Klapötke T. M., Piercey D. G., Stierstorfer J. Pushing the limits of energetic materials – the synthesis and characterization of dihydroxylammonium 5,50-bistetrazole-1,10-diolate // J. Mater. Chem.. 2012. 22. 20418–20422.

207. Astratiev A. A., Melnikova S. F., Dushenok S. A., Kotomin A. A., Dashko D. V., Stepanov A. I., Yakovleva O. F., Kozlov A. S., Barannik D. A., Loskutova L. A., Chernega I. M. Investigation of Properties of 3,4-bis(4-nitrofurazan-3-yl)furazane

(NTF) — New Meltable HE. International Conference «Shock Waves in Condensed Matter». Kiev, Ukraine. 16–21 September, 2012. P. 380–386.

208. *Pagoria P. F., Zhang M.-X., Zuckerman N. B., DeHope A. J., Parrish D. A.* Synthesis and characterization of multicyclic oxadiazoles and 1-hydroxytetrazoles as energetic materials // *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2017. 53(6–7). P. 760–778.

209. *Yakovleva G. S., Kurbangalina R. Kh., Stesik L. N.* Rate of Detonation of Hydrazonium Azide. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 1974. Vol. 10, № 2. P. 234–235.

210. *Klapötke T. M.* Estimation of the Crystalline Density of Nitramine (N-NO<sub>2</sub> based) High Energy Density Materials (HEDM). *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*. 2001. 26. P. 221–224.

211. *Sabatini J. J., Oyler K. D.* Recent Advances in the Synthesis of High Explosive Materials. *Crystals*. 2016. 6(1). P. 5.

212. *Димза Г. В.* О критических диаметрах детонации ВВ с инертными добавками. *ФГВ*. 1976. Т. 12, № 2. С. 244–247.

213. *Овчинников И. В., Махова Н. Н., Хмельницкий Л. И., Пенекин В. И. и др.* Динитродиазенофуроксан — новое взрывчатое вещество. *Доклады академии наук*. 1998. Т. 359, №4. С. 499–502.

214. *U. R. Nair, S. N. Asthana, A. Subhananda Rao.* Advances in High Energy Materials. *Gandhe Defence Science Journal*. 2010. Vol. 6, No. 2. P. 137–151.

215. *Котомин А. А., Душенюк С. А.* Разложение ряда жидких взрывчатых веществ и их растворов в детонационной волне. *Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета)*. 2013. № 21 (47). С. 65–71.

216. *Воскобойников И. М., Афанасенко А. Н., Богомолов В. И.* Обобщенная ударная адиабата органических жидкостей. *Физика горения и взрыва*. 1967. Т. 3, № 4. С. 585–593.

217. *Воскобойников И. М., Богомолов В. И., Апин А. Я.* Определение критических условий инициирования ударной волной гомогенных ВВ // *Физика горения и взрыва*. 1969. Т. 5, № 4. С. 471–474.

218. *Афанасенков А. Н., Богомолов В. И., Воскобойников И. М.* Критические давления инициирования взрывчатых веществ. В кн.: *Взрывное дело*. М.: Недра. 1970. № 68/25. С. 68–82.

219. *Долгобородов А. Ю.* Влияние физико-химических превращений на распространение ударных волн в конденсированных веществах. Диссертация ... доктора физико-математических наук. Ин-т хим. физики им. Н. Н. Семенова РАН. Москва. 2008. 379 с.

220. *Островский В. А., Колдобский Г. И.* Энергоемкие тетразолы // *Российский химический журнал*. 1997. Т. 41. № 2. С. 84–97.

*Александр Алексеевич КОТОМИН,  
Сергей Адамович ДУШЕНОК,  
Анатолий Сергеевич КОЗЛОВ*

## **ЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ И КОМПОЗИЦИЙ**

**МОНОГРАФИЯ**

*Издание второе, стереотипное*

Зав. редакцией  
инженерно-технической литературы *Е. В. Баженова*

ЛР № 065466 от 21.10.97  
Гигиенический сертификат 78.01.10.953.П.1028  
от 14.04.2016 г., выдан ЦГСЭН в СПб

**Издательство «ЛАНЬ»**  
lan@lanbook.ru; www.lanbook.com  
196105, Санкт-Петербург, пр. Ю. Гагарина, д. 1, лит. А.  
Тел./факс: (812) 336-25-09, 412-92-72.  
Бесплатный звонок по России: 8-800-700-40-71

### **ГДЕ КУПИТЬ**

#### **ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИЙ:**

*Для того, чтобы заказать необходимые Вам книги, достаточно обратиться  
в любую из торговых компаний Издательского Дома «ЛАНЬ»:*

**по России и зарубежью**  
«ЛАНЬ-ТРЕЙД». 196105, Санкт-Петербург, пр. Ю. Гагарина, д. 1, лит. А.  
тел.: (812) 412-85-78, 412-14-45, 412-85-82; тел./факс: (812) 412-54-93  
e-mail: trade@lanbook.ru; ICQ: 446-869-967

**www.lanbook.com**  
пункт меню «Где купить»  
раздел «Прайс-листы, каталоги»

**в Москве и в Московской области**  
«ЛАНЬ-ПРЕСС». 109387, Москва, ул. Летняя, д. 6  
тел.: (499) 722-72-30, (495) 647-40-77; e-mail: lanpress@lanbook.ru

**в Краснодаре и в Краснодарском крае**  
«ЛАНЬ-ЮГ». 350901, Краснодар, ул. Жлобы, д. 1/1  
тел.: (861) 274-10-35; e-mail: lankrd98@mail.ru

#### **ДЛЯ РОЗНИЧНЫХ ПОКУПАТЕЛЕЙ:**

*интернет-магазин*  
**Издательство «Лань»: <http://www.lanbook.com>**  
*магазин электронных книг*  
**Global F5: <http://globalf5.com/>**

Подписано в печать 01.11.20.  
Бумага офсетная. Гарнитура Школьная. Формат 70×100 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Печать офсетная. Усл. п. л. 31,20. Тираж 30 экз.

Заказ № 1441-20.

Отпечатано в полном соответствии  
с качеством предоставленного оригинал-макета  
в АО «Т8 Издательские Технологии».  
109316, г. Москва, Волгоградский пр., д. 42, к. 5.