

Аннотация к отчету получателя стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам, м.н.с. лаб 1315 Мельникова Игоря Никитича  
Тема проекта: Исследование термической стабильности перспективных энергетических материалов экспериментальными и теоретическими методами

В соответствии с календарным планом работ, в ходе третьего года выполнения проекта проведен анализ теоретических методов прогнозирования энтальпии образования в газовой фазе для энергетических материалов. Проведено тестирование недавно предложенного полуэмпирического метода с нейросетевым потенциалом AIQM1 [1], предназначенного для расчета газофазной энтальпии образования CHNO соединений. Результаты расчетов сопоставлялись со значениями энтальпии образования, полученными с помощью простого полуэмпирического метода PM3 и высокоточной многоуровневой явно-коррелированной процедуры W1-F12 (средняя точность ~ 4 кДж/моль). На примере производных 1,2,5-оксадиазол-2-оксида (фуроксана) с различными эксплозафорными заместителями (рассмотрено 256 соединений) обнаружено, что среднее отклонение от метода W1-F12 составляет 17 кДж/моль, а максимальное абсолютное отклонение не превышает 100 кДж/моль. Ошибка в прогнозировании энтальпии образования  $\pm 50$  кДж/моль приводит к ошибке в расчетной скорости детонации 0.1 км/с [2]. Установлено, что наибольшее отклонение наблюдается для соединений, содержащих функциональную группу C(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>. Таким образом, метод AIQM1 является эффективным инструментом для высокоскоростного скрининга перспективных энергетических материалов.

Вторая часть работы посвящена сопоставлению расчетных данных с экспериментальными значениями энтальпии образования в конденсированной фазе для энергетических материалов различных химических классов (205 CHNO соединений). Для этого значения газофазной энтальпии дополнялись оценкой энтальпии сублимации, полученной с помощью модифицированного уравнения Трутона-Вильямса для энергетических материалов [2]. Расчетные и экспериментальные данные согласуются в пределах среднего отклонения 57 кДж/моль. Кроме того, данный подход позволил обнаружить ряд литературных данных, для которых отклонение от расчетных значений превышает 100 кДж/моль. Эти значения требуют дальнейшего уточнения.

Результаты работы докладывались на конференциях:

- 1) XXIV Международная конференция по химической термодинамике в России, Иваново, ИГХТУ, 1-5 июля 2024 г.
- 2) XVII Всероссийский симпозиум по горению и взрыву, Суздаль, ГТК «Суздаль», 16-20 сентября 2024 г.

Результаты тестирования метода AIQM1 готовятся к публикации.

#### Список источников

- (1) Zheng, P.; Yang, W.; Wu, W.; Isayev, O.; Dral, P. O. Toward Chemical Accuracy in Predicting Enthalpies of Formation with General-Purpose Data-Driven Methods. *J. Phys. Chem. Lett.* **2022**, *13*, 3479–3491. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.2c00734>.
- (2) Muravyev, N. V.; Wozniak, D. R.; Piercey, D. G. Progress and Performance of Energetic Materials: Open Dataset, Tool, and Implications for Synthesis. *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*, 11054–11073. <https://doi.org/10.1039/D2TA01339H>.
- (3) Muravyev, N. V.; Monogarov, K. A.; Melnikov, I. N.; Pivkina, A. N.; Kiselev, V. G. Learning to Fly: Thermochemistry of Energetic Materials by Modified Thermogravimetric Analysis and Highly Accurate Quantum Chemical Calculations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 15522–15542. <https://doi.org/10.1039/D1CP02201F>.