

“УТВЕРЖДАЮ”

Директор ИНЭОС РАН
Член-корреспондент РАН А.А. Трифонов



3 февраля 2020 г.

№ 12111-6251/345

ЭКСПЕРТНОЕ ЗАКЛЮЧЕНИЕ О ВОЗМОЖНОСТИ ОПУБЛИКОВАНИЯ

Руководитель-эксперт Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук, рассмотрев статью Larin Alexander A., Shaferov Alexander V., Epishina Margarita A., Melnikov Igor N., Muravyev Nikita V., Ananyev Ivan V., Fershtat Leonid L., Makhova Nina N. "Pushing the Energy-Sensitivity Balance with High-Performance Bifuroxans», направляемую в журнал ACS Applied Energy Materials, подтверждает, что в материале не содержатся сведения, предусмотренные Постановлением Правительства РФ №1233 от 30.11.1994г. и на публикацию материала не следует получать разрешение Минобрнауки России и/или Президиума РАН

Заключение: статья может быть опубликована в открытой печати, т.к. она не содержит сведений, не подлежащих открытой публикации

Руководитель-эксперт

(подпись)

Ю.В. Нелюбина, зав. лаб.

(ф. и. о., должность)

Pushing the energy-sensitivity balance with high-performance bifuroxans

*Alexander A. Larin,^a Alexander V. Shaferov,^a Margarita A. Epishina,^a Igor Melnikov,^b Nikita V. Muravyev,^{*b} Ivan V. Ananyev,^{c,d} Leonid L. Fershtat,^{*a} Nina N. Makhova^a*

^a N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences
Leninsky Prosp. 47, Moscow 119991 (Russian Federation)

^b N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
4 Kosygin Str., Moscow 119991 (Russian Federation)

^c A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Russian Academy of Sciences,
Vavilova str., 28, Moscow, 119991 (Russian Federation)

^d National Research University Higher School of Economics, Moscow, 101000 (Russian Federation)

KEYWORDS: energetic materials, furoxan, 1,2,5-oxadiazole, nitrogen heterocycles, detonation performance.

ABSTRACT: Several energy-rich bifuroxans incorporating nitro and azido functionalities have been synthesized and thoroughly characterized by IR and multinuclear NMR spectroscopy, elemental analysis, single-crystal X-ray diffraction and differential scanning calorimetry. *N*-oxide

Notes

The authors declare no competing financial interest.

ACKNOWLEDGMENT

This work was supported by the Russian Science Foundation (grant 19-73-20074). The X-ray structural study and DFT computations were supported by the Russian Foundation for Basic Research (RFBR project # 18-33-20075). We are also grateful to Dr. D. V. Khakimov for conducting calculations of the enthalpies of formation. Characterization of the substances was performed in the Department of Structural Studies of Zelinsky Institute of Organic Chemistry.

REFERENCES

1. Zhao, G.; He, C.; Yin, P.; Imler, G. H.; Parrish, D. A.; Shreeve, J. M. Efficient Construction of Energetic Materials via Nonmetallic Catalytic Carbon–Carbon Cleavage/Oxime-Release-Coupling Reactions, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 3560-3563.
2. Barton, L. M.; Edwards, J. T.; Johnson, E. C.; Bukowski, E. J.; Sausa, R. C.; Byrd, E. F. C.; Orlicki, J. A.; Sabatini, J. J.; Baran, P. S. Impact of Stereo- and Regiochemistry on Energetic Materials, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *142*, 12531-12535.
3. Bernstein, A.; Ronen, Z. *Biodegradation of the Explosives TNT, RDX and HMX*, in *Microbial Degradation of Xenobiotics*, ed. S. N. Singh, Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, ch. 5, pp. 135-176.
4. Kuchurov, I. V.; Zharkov, M. N.; Fershtat, L. L.; Makhova, N. N.; Zlotin, S. G. Prospective Symbiosis of Green Chemistry and Energetic Materials, *ChemSusChem*, **2017**, *10*, 3914-3946.