



UDC 662.2-3

MODIFICATION OF HIGH-ENERGY SUBSTANCES RECOVERED FROM PRODUCTS OF SOLID PROPELLANT DISPOSAL

Maxym M. Cheltonov¹, Oleksiy L. Kyrychenko¹, Elena Yu. Nesterova²¹State Enterprise Research-Industrial Complex "Pavlograd Chemical Plant",
Pavlograd, 51402, Ukraine;²State High Education Institution "Oles Honchar Dnipro National University",
Dnipro, 49010 Ukraine

Received 14 november 2019; accepted 12 December 2019; available online 15 January 2020

Abstract

The main components of high-energy compositions are nitramines: octogen (HMX) & hexogen (RDX). The solution to the problem of the lack of these components is possible through the use of returnable resources, which are obtained using a certain technology for the disposal of solid rocket fuel and ammunition, unsuitable for further use for its intended purpose. Purpose of this research is to develop a crystallization method for octogen extracted from solid rocket fuel and to obtain modified nitramine suitable for use in high-energy compositions (HEC). Parameters of the process of recrystallization of the extracted nitramine from an aqueous solution of dimethyl sulfoxide (DMSO) were determined in the laboratory: the dependence of the average particle size of the substance on the rotational speed of the mechanical stirrer and the cooling rate of the solution. The required crystal size of the modified nitramine is obtained in the process of crystallization with a rotational speed of a mechanical stirrer in the range of 200 – 330 rpm and a cooling rate of an aqueous solution of DMSO not higher than 2 °C / min, it was found. Addition of seed crystals of standard nitramine up to 10 % (by weight) and 0.5 % (by weight) modifier (isomethyltetrahydrophthalic anhydride) positively affects the crystalline form of the modified product with the formation of crystals of predominantly correct isometric form. The resulting modified nitramine has characteristics that satisfy the requirements for use in HEC.

Key words: nitramine; solid propellant; crystallization; octogen; extraction; dimethyl sulfoxide

МОДИФІКАЦІЯ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИХ РЕЧОВИН, ВИЛУЧЕНИХ ІЗ ПРОДУКТІВ УТИЛІЗАЦІЇ ТВЕРДОГО РАКЕТНОГО ПАЛИВА

Максим М. Челтонов¹, Олексій Л. Кириченко¹, Олена Ю. Нестерова²¹Державне підприємство «Науково-виробниче об'єднання «Павлоградський хімічний завод»,
м. Павлоград, 51402, Україна;²ДВНЗ «Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара»
м. Дніпро, 49010, Україна

Анотація

Основними компонентами, що входять до складу багатьох високоенергетичних композицій є нітраміни октоген та гексоген. Вирішення проблеми дефіциту зазначених компонентів можливе за рахунок використання зворотних ресурсів, які отримують за певною технологією утилізації твердого ракетного палива та боєприпасів, непридатних для подальшого застосування за прямим призначенням. Метою даних досліджень є розробка методу кристалізації вилученого з твердого ракетного палива октогену (нітраміну) із водного розчину диметилсульфоксиду (ДМСО) та отримання модифікованого нітраміну, придатного для використання у високоенергетичних композиційних складах (ВКС). У лабораторних умовах встановлено параметри процесу перекристалізації вилученого нітраміну з водного розчину ДМСО: залежність середнього розміру частинок речовини від швидкості обертання механічної мішалки і швидкості охолодження розчину. Виявлено, що для отримання кристалів модифікованого нітраміну необхідного розміру потрібно, щоб у процесі кристалізації швидкість обертання механічної мішалки знаходилась у діапазоні 200 – 330 об / хв, а швидкість охолодження водного розчину ДМСО не перевищувала 2 °C / хв. Додавання затравочних кристалів штатного нітраміну до 10 % (ваг.) і 0.5 % (ваг.) модифікатора (ізометилтетрагідрофталевого ангідриду) позитивно впливає на кристалічну форму модифікованого продукту та призводить до утворення кристалів переважно правильної ізометричної форми. Отриманий модифікований нітрамін має характеристики, що задовольняють вимогам для його застосування у ВКС.

Ключові слова: нітрамін; тверде ракетне паливо; кристалізація; октоген; вилучення; диметилсульфоксид

* Corresponding author: e-mail: kafedra_vms@mail.ru

МОДИФИКАЦІЯ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ, ИЗВЛЕЧЕННЫХ ИЗ ПРОДУКТОВ УТИЛИЗАЦИИ ТВЕРДОГО РАКЕТНОГО ТОПЛИВА

Максим М. Челтонов¹, Олексей Л. Кириченко¹, Елена Ю. Нестерова²

¹Государственное предприятие «Научно-производственное объединение «Павлоградский химический завод», г. Павлоград, 51402, Украина;

²ГВУЗ «Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара», г. Днепро, 49010, Украина

Аннотация

Основными компонентами в составе многих высокоэнергетических композиций являются нитрамини октоген и гексоген. Решение проблемы дефицита указанных компонентов возможно за счёт использования возвратных ресурсов, которые получают по определенной технологии утилизации твёрдого ракетного топлива и боеприпасов, непригодных для дальнейшего применения по прямому назначению. Целью настоящих исследований является разработка метода кристаллизации октогена, извлечённого из твёрдого ракетного топлива, и получение модифицированного нитрамина, пригодного для использования в высокоэнергетических композиционных составах (ВКС). В лабораторных условиях установлены параметры процесса перекристаллизации вторичного нитрамина из водного раствора ДМСО: зависимость среднего размера частиц вещества от скорости вращения механической мешалки и скорости охлаждения раствора. Выявлено, что для получения кристаллов модифицированного нитрамина заданного размера необходимо, чтобы в процессе кристаллизации скорость вращения механической мешалки находилась в диапазоне 200 – 330 об / мин, а скорость охлаждения водного раствора ДМСО не превышала 2 °С / мин. Добавление затравочных кристаллов штатного нитрамина до 10 % (вес.) и 0.5 % (вес.) модификатора (изометилтетрагидрофталевого ангидрида) положительно влияет на кристаллическую форму модифицированного продукта и приводит к образованию кристаллов преимущественно правильной изометрической формы. Полученный модифицированный нитрамин имеет характеристики, удовлетворяющие требованиям для его применения в ВКС.

Ключевые слова: нитрамин; твердое ракетное топливо; кристаллизация; октоген; извлечение; диметилсульфоксид

Вступ

Виробництво нітрамінів (октогену та гексогену), які є основними компонентами, що входять до складу багатьох високоенергетичних композицій, на сьогодні відсутнє в Україні. Рішення проблеми дефіциту зазначених речовин можливе за рахунок використання зворотних ресурсів, які отримують за певною технологією утилізації твердого ракетного палива (ТРП) та боеприпасів [1; 3], непридатних для подальшого застосування за прямим призначенням. Є декілька методів утилізації ТРП та боеприпасів зі збереженням необхідних компонентів ТРП і подальшого їх використання у якості сировинної бази [1–7] для створення нових ВКС. Одним з найефективніших є гідромеханічний метод, який полягає в гідродинамічному вилученні фрагментів твердого ракетного палива з подальшим його подрібненням [1]. Однак, при використанні зазначеної технології, вилучені з ТРП і боеприпасів нітрамини не відповідають вимогам до якості товарного продукту, що застосовується для виробництва ВКС.

Метою цих досліджень є розробка методу кристалізації октогену [8–23], вилученого з твердого ракетного палива, та отримання модифікованого нітраміну придатного для використання у ВКС.

На сьогодні модифікація нітраміну, вилученого з твердого ракетного палива, проводиться на ДП «НВО «ПХЗ» (м. Павлоград) з метою його подальшого використання у виготовленні неелектричних систем ініціювання.

Експериментальна частина

Форму та розмір кристалів модифікованого нітраміну визначали на мікроскопі Leica DMILM; густину вимірювали пікнометричним методом; гранулометричний склад визначали мокрим розсівом у етиловому спирті; диференційний термічний аналіз (ДТА) виконували на диференційно-термічному аналізаторі L81 Lenseis; кристалізацію нітраміну проводили з використанням термостату Brookfield TC-502D.

Кристалізацію вилученого з ТРП нітраміну проводили у лабораторній установці (рис. 1), яка містить склянку об'ємом 500 мл, обладнану пропелерною мішалкою, крапельною воронкою і термометром. Установка поміщена у термостат, який програмується за певним режимом охолодження або нагріву.

Процес модифікації проводився таким чином:

Суміш 60 г вихідного нітраміну-сирцю, вилученого з полімерної матриці ТРП, та 180 г ДМСО перемішують у склянці об'ємом 500 мл та підігривають у термостаті до температури

40 – 60 °С для практично повного розчинення осаду. Отриманий розчин фільтрують через складчастий паперовий фільтр і поміщують у склянку **1** (рис. 1), яку встановлюють у термостат **2** і обладнують крапельною воронкою **3** для подачі води, термометром **4**, пропелерною мішалкою **5** з електромотором **6** та автотрансформатором **7**.

У нагрітій у термостаті **2** до температури 90 °С розчин нітраміну в ДМСО при перемішуванні мішалкою **5** (швидкість обертання мішалки 200 – 500 об / хв) додають із крапельної воронки **3** зі швидкістю 2 – 40 мл/хв дистильовану воду з температурою 30 ± 3 °С до утворення співвідношення ДМСО : вода – 1 : 1.

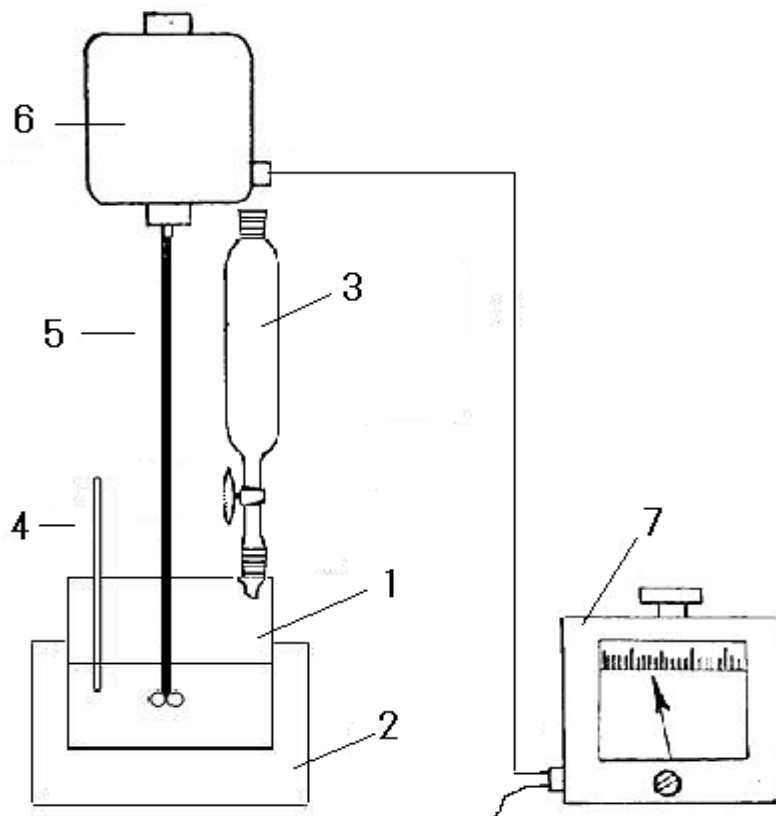


Fig. 1. Laboratory installation for obtaining modified nitramine
Рис. 1. Лабораторна установка для отримання модифікованого нітраміну

Отриманий розчин за допомогою термостату охолоджують з певною швидкістю при перемішуванні до температури 23 ± 3 °С з контролем температури контактним термометром **4**. Після охолодження отриманий розчин перемішують за даних умов ще протягом 30 хвилин та відфільтровують кристалічний осад модифікованого нітраміну через складчастий паперовий фільтр, промивають на фільтрі етиловим спиртом, сушать при кімнатній температурі до сталої маси. Визначають форму кристалів, гранулометричний склад, густину, а також проводять термічний аналіз (ДТА).

Результати та їх обговорення

В основу процесу модифікації нітраміну, вилученого з твердого ракетного палива, покладена існуюча на ДП «НВО «ПХЗ» методика очистки та кристалізації, яка полягає в екстракції за допомогою ДМСО [24] з

отриманої полімерної матриці ТРП нітраміну із подальшим відділенням екстракту від рафінованої крихти полімеру і висадженням нітраміну введенням в отриманий розчин екстракту компонента, що не розчиняє цільовий продукт – води. Таким чином одержують вихідний нітрамін – сирець. Однак одержаний таким способом продукт виходить дуже дрібним (основна фракція < 50 мкм), забрудненим і не задовольняє вимогам до нітраміну, що може застосовуватися у ВКС.

Для отримання з нітраміну-сирцю товарного продукту, що відповідає вимогам нормативної документації до стандартного зразка (табл.), нами була розроблена методика модифікації нітраміну-сирцю, яка полягає у його очищенні та перекристалізації за певних умов.

Відомо, що енергоємний 1,3,5,7-тетранітро-1,3,5,7-октагідротетразоцин (октоген) існує у чотирьох кристалічних модифікаціях – α , β , γ , δ

[8–9], та β -модифікація має найбільшу густину і тепловий ефект поліморфного переходу. Нітрамін β -модифікації можливо отримати у вигляді витягнутої брускоподібної або ізометричної форми. Витягнута брускоподібна форма знижує фізико-механічні властивості композиційних складів на його основі. Таким чином, найбільш актуальним є визначення умов отримання моноклінної орторомбічної β -модифікації нітраміну певного

гранулометричного складу з близькою до ізометричної формою кристалів та густиною не менше 1.89 г/см³.

У табл. наведені фізико-хімічні характеристики октогену, які передбачені галузевим стандартом та співпадають зі значеннями військової специфікації США, а також вихідного немодифікованого та модифікованого нітраміну.

Physico-chemical properties of the standard nitramine, nitramine before modified and modified nitramine

Table

Таблиця

| Фізико-хімічні властивості стандартного, немодифікованого та модифікованого нітраміну | | | |
|---|-------------------------|---------------------------|--------------------------|
| Parameter | Standard technical HMX | Nitramine before modified | Nitramine after modified |
| Crystalline form | β form, isometric | β form, whetstones | β form, isometric |
| Density of dehydrated nitramine, g/cm ³ , not less | 1.89 | 1.80 | 1.89 |
| DTA initial decomposition temperature (at heating rate of 10 K/min), °C | 273.8* | 271.7 | 274.9 |
| Particle size distribution of individual batch: | | | |
| $\geq 700 \mu\text{m}$ | not less 10% | 0% | 2% |
| 100 – 250 μm | 20–40% | 66.2% | 33.9% |
| $\leq 100 \mu\text{m}$ | not less 10% | 33.1% | 8.5% |

*- DTA results of commercial nitramine

За допомогою мікроскопу Leica DMILM було визначено форму кристалів немодифікованого нітраміну - сирцю і показано, що він має брускоподібну β -модифікацію зі зниженою густиною і гранулометричний склад з підвищеним вмістом дрібної фракції $\leq 100 \mu\text{m}$ (табл.). Також була виявлена наявність дрібних частинок полімерної матриці, з якої він був вилучений.

Очищення нітраміну-сирцю від домішок проводилось шляхом його розчинення у ДМСО при нагріванні до 60 °C та подальшою фільтрацією розчину, в якому полімерна крихта не розчинялась. Для отримання модифікованого нітраміну з характеристиками, що відповідають стандарту (див. табл.) нами була розроблена та відпрацьована методика кристалізації нітраміну-сирцю.

Загальновідомо, що на процес утворення кристалічного осаду речовини, розмір кристалів та їх форму впливають ступінь пересиченості розчину, швидкість перемішування та охолодження розчину. Нами була досліджена залежність форми та розміру кристалів нітраміну від швидкості обертання

механічної пропелерної мішалки, а також від швидкості охолодження розчину.

Одним з основних критеріїв оцінки якості кристалічного нітраміну є середній розмір частинок $d_{\text{сеп}}$, який розраховується за формулою [25]:

$$d_{\text{сеп}} = \sum_{i=1}^N m_i d_i \quad (1)$$

де m_i і d_i — вагові частки кожної фракції і середній розмір кристалів цієї фракції відповідно. Таким чином, з урахуванням формули (1), середній розмір частинок нітраміну, який згідно табл., застосовується для виготовлення ВКС, знаходиться у діапазоні 312 – 452 мкм.

На рис. 2 представлені результати експериментальних випробувань та наведена залежність середнього розміру часток нітраміну від швидкості обертання механічної мішалки в ході його модифікації, яка описується квадратним рівнянням (2) з величиною достовірної апроксимації $R^2 = 0.99$:

$$d_{\text{сеп}} = ax^2 + bx + c \quad (2)$$

де: $d_{сер}$ – середній розмір частинок, мкм; a, b, c – емпіричні коефіцієнти ($a = -0.0008$, $b = -0.5975$, $c = 593.25$).

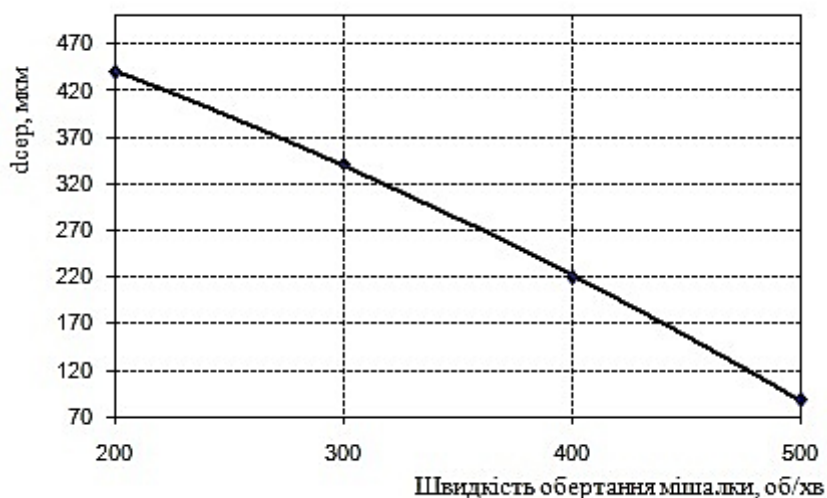


Fig. 2. The dependence of the average particle size of nitramine on the rotation of the mechanical stirrer during its modification ($t = 90\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Рис. 2. Залежність середнього розміру частинок нітраміну від швидкості обертання механічної мішалки в ході його модифікації ($t=90\text{ }^{\circ}\text{C}$)

Отже, для отримання необхідного середнього розміру частинок нітраміну (312 – 452 мкм) швидкість обертання механічної пропелерної мішалки в ході кристалізації з водного розчину ДМСО, згідно з рис. 2, треба встановлювати в інтервалі 200 – 330 об/хв у зазначених режимах кристалізації нітраміну.

Нами було експериментально доведено, що розмір кристалів нітраміну має поліноміальну залежність від швидкості охолодження

маточного розчину при однаковій швидкості обертання мішалки ($\omega = 400\text{ об/хв}$). На рис. 3 наведена залежність середнього розміру частинок нітраміну, отриманого в ході його модифікації, від швидкості охолодження водного розчину ДМСО, яка описується рівнянням другого ступеня (2) з величиною достовірної апроксимації $R^2 = 0.99$, де емпіричні коефіцієнти a, b, c мають наступні значення: $a = -1.9503$, $b = -48.526$, $c = 427.39$

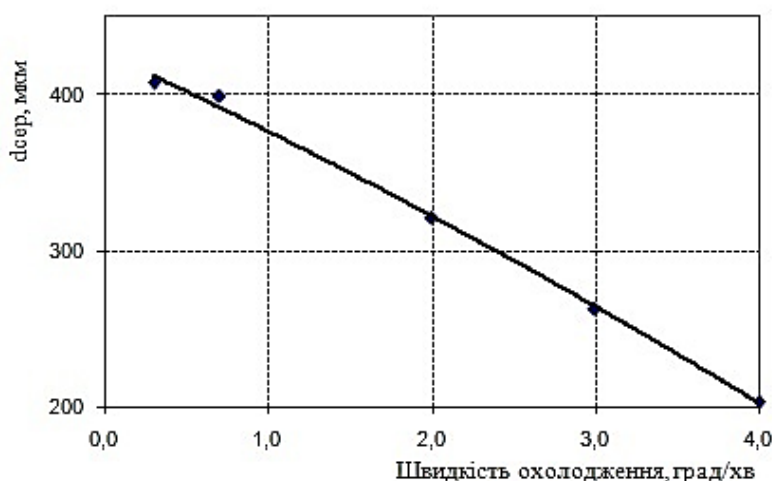


Fig. 3. The dependence of the average particle size of the modified nitramine on the cooling rate of an aqueous solution of DMSO ($\omega = 400\text{ rpm}$)

Рис. 3. Залежність середнього розміру часток модифікованого нітраміну від швидкості охолодження водного розчину ДМСО ($\omega=400\text{ об/хв}$)

Дані, наведені на рис. 3, дозволяють зробити висновок про поступове збільшення $d_{сер}$ кристалів при зменшенні швидкості охолодження водного розчину ДМСО від $4\text{ }^\circ\text{C} / \text{хв}$ до $1\text{ }^\circ\text{C} / \text{хв}$ в ході кристалізації нітраміну. При подальшому зменшенні швидкості охолодження кристалізаційного розчину (менше $1\text{ }^\circ\text{C} / \text{хв}$) $d_{сер}$ кристалів нітраміну істотно не змінюється. Градієнт збільшення $d_{сер}$ кристалів при зменшенні швидкості охолодження водного розчину ДМСО в експериментальних умовах становить $55.4\text{ (мкм}\cdot\text{хв)} / \text{ }^\circ\text{C}$.

Таким чином, згідно з поліноміальною залежністю (рис. 3), швидкість охолодження водного розчину ДМСО для отримання необхідного середнього розміру частинок нітраміну повинна бути $\leq 2\text{ }^\circ\text{C} / \text{хв}$.

На ступінь пересичення, який є одним з найважливіших критеріїв перебігу процесу зародкоутворення кристалів, впливає швидкість додавання води – компонента, в якому цільовий продукт нерозчинний. Оптимальне співвідношення ДМСО та води для повної кристалізації нітраміну складає 1 : 1. Експериментально визначена найбільш сприятлива для процесу кристалізації швидкість додавання води, яка складає 1 – 2 % від всієї маси води за хвилину. Збільшення швидкості розведення водою до 3 % / хв і вище приводить до утворення осаду з підвищеним вмістом дрібних кристалів (середній гранулометричний склад становить $\sim 239.4\text{ мкм}$ і менше).

Корекцію форми кристалів нітраміну в ході його модифікації проводили шляхом додавання модифікатора у кристалізаційний розчин та затравочних кристалів штатного нітраміну. Відомо [8], що додавання модифікатора, наприклад, ізометилтетрагідрофталевого ангідриду (далі ізо-МТГФА), сприяє утворенню ізометричної β -форми нітраміну при перекристалізації його з водного ацетону. Нами була поліпшена форма кристалів β форми нітраміну за рахунок додавання 0.5 % (ваг.) ізо-МТГФА у

кристалізаційний розчин ДМСО. Це сприяє отриманню моноклінної рівноосної β -форми нітраміну з мінімальною кількістю кристалічних дефектів. Додавання кристалів штатного нітраміну до початку зародкоутворення у маточний водний розчин ДМСО до 10 % (ваг.) також позитивно впливає на процес зародкоутворення кристалів модифікованого нітраміну і отримання продукту з необхідним гранулометричним складом, густиною і термогравиметричними показниками. Затравочні кристали готували мокрим розсівом (фракція +100-350 мкм) зі штатного нітраміну.

На рис. 4 наведено фото кристалів нітраміну, отриманих кристалізацією з водного розчину ДМСО у присутності 9.5 % затравочних кристалів та 0.5% модифікатора ізо-МТГФА.

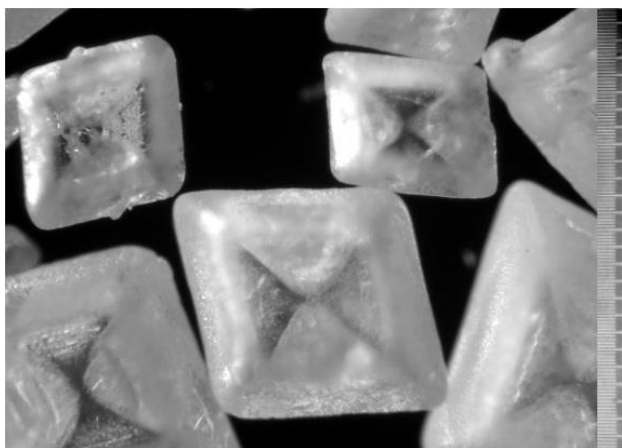


Fig. 4. Photo of modified nitramine crystals (minimum distribution price 10 μm , fraction +250 μm)
Рис. 4. Фото модифікованих кристалів нітраміну (ціна мінімальної ділянки шкали 10 мкм, фракція +250 мкм)

Якість отриманого кристалічного нітраміну (рис. 4) була перевірена за допомогою ДТА. На рис. 5 наведено термограму модифікованого нітраміну (швидкість нагріву $10\text{ }^\circ\text{C} / \text{хв}$), яка свідчить про відсутність домішок та чистоту отриманої речовини, що має більш високу температуру початку екзотермічного розкладу, ніж за стандартом (див. табл.).

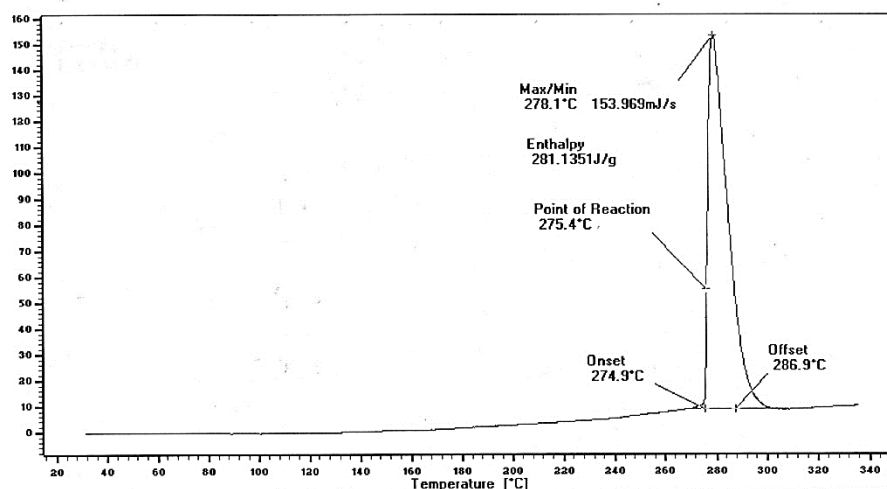


Fig. 5. The DTA thermogram for the modified nitramine (the heating rate is 10 °C / min)
Рис. 5. Термограма ДТА модифікованого нітраміну (швидкість нагріву 10 °C / хв)

Висновки

Експериментально доведено, що нітрамін, вилучений із полімерної матриці у процесі утилізації ТРП, може бути використаний у якості зворотного ресурсу цієї речовини.

Розроблена та відпрацьована методика вилучення нітраміну-сирцю з полімерної матриці ТРП та його модифікації з одержанням речовини, що відповідає вимогам товарного продукту і може бути використана у високоенергетичних композиціях.

Встановлено, що для отримання необхідного розміру кристалів модифікованого нітраміну швидкість обертання механічної мішалки повинна знаходитися в діапазоні 200 – 330 об / хв, а швидкість охолодження водного розчину ДМСО – не перевищувати 2 °C / хв.

Винайдено, що одночасне додавання 7–9.5 % (ваг.) затравочних кристалів штатного нітраміну та 0.5 % (ваг.) модифікатора із-МТГФА у нагрітий кристалізаційний розчин вихідного нітраміну-сирцю позитивно впливає на формування отриманих кристалів модифікованого продукту, забезпечуючи їх правильну ізометричну форму.

Бібліографічні посилання

- [1] Безопасность процессов производства и применения эмульсионных взрывчатых веществ с компонентами утилизируемых вооружений. Монография / Шиман Л. Н. Устименко Е. Б., Голинько В. И., Соболев В. В. – Д.: Лира, 2013. – 526 с.
- [2] Пат. 6653506 США, МПК⁸ С 07 С 24/00. Recovering nitramines and reformulation of by-products / Randall S. Phillips, Andrew W. Cain, Thomas J. Schilling, Michael Miks (США); заявник та патентовласник Randall S. Phillips (США), Andrew W. Cain (США), Thomas J. Schilling (США), Michael Miks (США), TPL Incorporated (США). - №10/246608; заявл. 16.09.2002; опубл. 25.11.2003. – 5 с.
- [3] Основы промышленной технологии утилизации крупногабаритных твёрдотопливных зарядов / Л. В. Забелин, Р. В. Гафиятулин, А. Н. Поник, В. Ю. Мелешко. – М.: Недра-Бизнесцентр, 2004. – 226 с.
- [4] Poulin I. Literature Review on Demilitarization of Munitions. Prepared for the RIGHTTRACT Technology Demonstration Project. / I. Poulin. - Quebec: Defense R&D Canada – Valcartier, 2010. – 64 p.
- [5] Пат. 4389265 США МПК⁸ С 06 В 45/10. Breakdown of solid propellants and explosives, recovery of nitramines / Tompa A. S., French D. M., White B. R. (США); заявник та патентовласник Tompa A. S. (США), French D. M. (США), White B. R. (США), The United States of America as represented by the Secretary of the Navy (США). - № 283,709; заявл. 16.07.81; опубл. 21.06.83. – 5 с.
- [6] Recovery and Reuse of HMX/RDX from Propellants and Explosives / S. Poehlein, C. Wilharm, K. Sims [at al.]. – Naval Surface Warfare Center, 2002. – 160 p.
- [7] Пат. 5284995 США МПК⁸ С 06 В 21/00. Method to extract and recover nitramine oxidizers from solid propellants using liquid ammonia / Melvin W. S. (США); заявник та патентовласник Melvin W. S. (США), The United States of America as represented by the Secretary of the Army (США). - № 28,014; заявл. 08.03.93; опубл. 08.02.94. – 19 с.
- [8] Ахмедшина В. А. Кристаллизация энергонасыщенных соединений из растворов: учебное пособие / В. А. Ахмедшина, В. Я. Базотов. – Казань: КНИТУ, 2012. – 124 с.
- [9] Октоген — термостойкое взрывчатое вещество / Е. Ю. Орлова, Н. А. Орлова, В. Ф. Жилин [и др.]. – М.: Недра, 1975. – 128 с.
- [10] Kinetics of reversible polymorphic transitions in high-energy compounds. Phase transformations in octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine / N. V. Chukanov, V. V. Zakharov, S. A. Vozchikova [et al.] // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2014. – Vol. 8, №5. – P. 641–650.
- [11] Structural and Vibrational Properties of Crystalline β -Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine at High Temperatures: Ab Initio Molecular Dynamics Studies / D. Xiang, G. Ji, W. Zhu // Chemistry Select. – 2019. – Vol. 4, №14. – P. 4244–4250.

- [12] Keshavarz M. H. Novel Organic Compounds Containing Nitramine Groups Suitable as High-Energy Cyclic Nitramine Compounds / M. H. Keshavarz, Y. H. Abadi // *Chemistry Select.* – 2018. – Vol. 3, №28. – P. 8238–8244.
- [13] Mathew N. Pressure-dependent Elastic Coefficients of β -HMX from Molecular Simulations / N. Mathew, T. Sewell // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2018. – Vol. 43, №3. – P. 223–227.
- [14] Jeong K. New theoretically predicted RDX- and β -HMX-based high-energy-density molecules / K. Jeong // *Int. J. Quantum Chem.* – 2018. – Vol. 118, №6. – P. e25528.
- [15] Energetic Characteristics of HMX-Based Explosives Containing LiH / X.-Y. Ding, Y.-J. Shu, N. Liu [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2016. – Vol. 41, №6. – P. 1079–1084.
- [16] Projectile Impact Ignition and Reaction Violent Mechanism for HMX-Based Polymer Bonded Explosives at High Temperature / X. Dai, Y. Wen, M. Wen [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2017. – Vol. 42, №7. – P. 799–808.
- [17] Modeling The Effects of Shock Pressure and Pore Morphology on Hot Spot Mechanisms in HMX / H. K. Springer, S. Bastea, A. L. Nichols [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2018. – Vol. 43, №8. – P. 805–817.
- [18] A Computational Study of Density of Some High Energy Molecules / J. F. Moxnes, F. K. Hansen, T. L. Jensen [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2016. – Vol. 42, №2. – P. 204–212.
- [19] A Three-Dimensional Hierarchical Dandelion-Like HMX Architecture Formed at a Liquid-Liquid Interface / M. Cheng, P. Li, X. Duan, C. Pei // *Crystal Research and Technology.* – 2018. – Vol. 53, №3. – P. 1700226.
- [20] The Effect of HMX Impurity and Irganox Antioxidant on Thermal Decomposition Kinetics of RDX by TG/DSC Non-Isothermal Method / H. Sinapour, S. Damiri, M. Ravanbod, H. R. Pouretdal // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2019. – Vol. 44. – P. 429.
- [21] X-ray Phase Contrast Imaging of the Impact of a Single HMX Particle in a Polymeric Matrix / N. E. Kerschen, C. J. Sorensen, Z. Guo [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2019. – Vol. 44. – P. 447.
- [22] Biotransformation of RDX and HMX by Anaerobic Granular Sludge with Enriched Sulfate and Nitrate / C. An, Y. Shi, Y. He [et al.] // *Water Environ. Res.* – 2017. – Vol. 89, №5. – P. 472–479.
- [23] Preparation and Performance of Nano HMX/TNT Cocrystals / H. Li, C. An, W. Guo [et al.] // *Prop., Explos., Pyrotech.* – 2015. – Vol. 40, №5. – P. 652–658.
- [24] Kim K. J. Solubilities of Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine in γ -Butyrolactone + Water, Dimethylsulfoxide + Water, and N-Methyl pyrrolidone + Water / K.J. Kim, H.S. Kim, J.S. Sim // *Journal of Chemical & Engineering Data.* – 2013. – Vol. 58, №9. – P. 2410–2413.
- [25] Матусевич Л. Н. Кристаллизация в присутствии затравочных кристаллов / Л. Н. Матусевич // *Ж. прикл. химии.* – 1961. – Vol. 34, №5. – С. 986–993.
- [3] Zabelin, L. V., Gafiyatulin, R. V., Ponik, A. N., Meleshko, V. YU. (2004). [*Fundamentals of industrial technology for the disposal of large solid propellant charges*]. Moscow, Russian Federation: Nedra-Biznescentr. (in Russian).
- [4] Poulin, I. (2010). *Literature Review on Demilitarization of Munitions*. Prepared for the RIGHTTRACT Technology Demonstration Project. Defense R&D, Quebec, Canada: Valcartier.
- [5] Tompa, A. S., French, D.M., White, B.R. (1983). *US Patent No 4389265*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [6] Poehlein, S., Wilharm, C., Sims, K., Burch, D., Schilling, T. and Keys, F. (2002). *Recovery and Reuse of HMX/RDX from Propellants and Explosives*. USA: Naval Surface Warfare Center.
- [7] Melvin, W. S. *US Patent No. 5284995*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [8] Ahmedshina, V. A., Bazotov, V. Ja. (2012). [*Crystallization of Energy-Saturated Compounds from Solutions: A Training Manual*]. Kazan, Russian Federation: KNITU. (in Russian).
- [9] Orlova, E.Yu., Orlova, N.A., Zhilin, V.F., Zbarsky, V.L., Vitkovskaya, L.I. (1975). [*Octogen - heat resistant explosive*]. Moscow, USSR: Nedra. (in Russian).
- [10] Chukanov, N. V., Zakharov, V. V., Vozchikova, S. A., Chervonnyi, A. D., Korsounskii, B. L. (2014). Kinetics of reversible polymorphic transitions in high-energy compounds. Phase transformations in octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine. *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 8(5), 641–650. <https://doi.org/10.1134/S1990793114050133>
- [11] Xiang, D., Ji, G., Zhu, W. (2019). Structural and Vibrational Properties of Crystalline β -Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine at High Temperatures: Ab Initio Molecular Dynamics Studies. *Chemistry Select*, 4(14), 4244–4250. <https://doi.org/10.1002/SLCT.201803385>
- [12] Keshavarz, M. H., Abadi, Y. H. (2018). Novel Organic Compounds Containing Nitramine Groups Suitable as High-Energy Cyclic Nitramine Compounds. *Chemistry Select*, 3(28), 8238–8244. <https://doi.org/10.1002/slct.201800887>
- [13] Mathew, N., Sewell, T. (2018). Pressure-dependent Elastic Coefficients of β -HMX from Molecular Simulations. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 43(3), 223–227. <https://doi.org/10.1002/prop.201700286>
- [14] Jeong, K. (2017). New theoretically predicted RDX- and β -HMX-based high-energy-density molecules. *Int. J. Quantum Chem.*, 118(6), e25528. <https://doi.org/10.1002/qua.25528>
- [15] Ding, X.-Y., Shu, Y.-J., Liu, N., Wu, M.-J., Zhang, J.-G., Gou, B.-W., Wang, W. (2016). Energetic Characteristics of HMX-Based Explosives Containing LiH. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 41(6), 1079–1084. <https://doi.org/10.1002/prop.201500321>
- [16] Dai, X., Wen, Y., Wen, M., Huang, F., Li, M., & Deng, C. (2017). Projectile Impact Ignition and Reaction Violent Mechanism for HMX-Based Polymer Bonded Explosives at High Temperature. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 42(7), 799–808. <https://doi.org/10.1002/prop.201600130>
- [17] Springer, H. K., Bastea, S., Nichols, A. L., Tarver, C. M., & Reaugh, J. E. (2018). Modeling The Effects of Shock Pressure and Pore Morphology on Hot Spot Mechanisms in HMX. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 43(8), 805–817. <https://doi.org/10.1002/prop.201800082>
- [18] Moxnes, J. F., Hansen, F. K., Jensen, T. L., Sele, M. L., & Unneberg, E. (2016). A Computational Study of Density

References

- [1] Shiman, L. N., Ustimenko, E. B., Golinko, V. I., Sobolev, V. V. (2013). [*Safety of processes for the production and use of emulsion explosives with components of utilized weapons*]. Monograph. Dnipropetrovsk, Ukraine: Lira (in Russian).
- [2] Randall, S., Phillips, A., Cain, W., Thomas, J., Schilling, M. M. (2003). *US Patent No. 6653506*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.

- of Some High Energy Molecules. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 42(2), 204–212.
<https://doi.org/10.1002/prop.201600105>
- [19] Cheng, M., Li, P., Duan, X., Pei, C. (2018). A Three-Dimensional Hierarchical Dandelion-Like HMX Architecture Formed at a Liquid-Liquid Interface. *Crystal Research and Technology*, 53(3), 1700226. <https://doi.org/10.1002/crat.201700226>
- [20] Sinapour, H., Damiri, S., Ravanbod, M., & Pourtedal, H. R. (2019). The Effect of HMX Impurity and Irganox Antioxidant on Thermal Decomposition Kinetics of RDX by TG/DSC Non-Isothermal Method. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 44, 429. <https://doi.org/10.1002/prop.201800236>
- [21] Kerschen, N. E., Sorensen, C. J., Guo, Z., Mares, J. O., Fezzaa, K., Sun, T., Chen, W. W. (2019). X-ray Phase Contrast Imaging of the Impact of a Single HMX Particle in a Polymeric Matrix. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 44, 447. <https://doi.org/10.1002/prop.201800002>
- [22] An, C., Shi, Y., He, Y., Huang, G., Liu, Y., & Yang, S. (2017). Biotransformation of RDX and HMX by Anaerobic Granular Sludge with Enriched Sulfate and Nitrate. *Water Environ. Res.*, 89(5), 472–479. <https://doi.org/10.2175/106143017X14839994523622>
- [23] Li, H., An, C., Guo, W., Geng, X., Wang, J., & Xu, W. (2015). Preparation and Performance of Nano HMX/TNT Cocrystals. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 40(5), 652–658. <https://doi.org/10.1002/prop.201400175>
- [24] Kim K. J., Kim H. S., Sim J. S. (2013). Solubilities of Octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine in γ -Butyrolactone + Water, Dimethylsulfoxide + Water, and N-Methyl pyrrolidone + Water. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 58(9), 2410-2413. <https://doi.org/10.1021/jc400199m>
- [25] Matusevich L. N. (1961). [Crystallization in the presence of seed crystals]. *J. Appl. Chemistry*, 34(5), 986-993. (in Russian).