

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МЕХАНИЗМА НАЧАЛЬНЫХ СТАДИЙ РАСПАДА ЛИГАНДОВ НА ИНИЦИИРУЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ АММИНТЕТРАЗОЛАТОВ КОБАЛЬТА(III)

© 2020 г. М. А. Илюшин^{a,*}, И. В. Шугалей^a, А. С. Тверьянович^b, А. В. Смирнов^a

^a Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Московский пр. 26, Санкт-Петербург, 190013 Россия

^b Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 198504 Россия
*e-mail: explaser1945@yandex.ru

Поступило в Редакцию 1 октября 2019 г.
После доработки 1 октября 2019 г.
Принято к печати 3 октября 2019 г.

Представлены результаты квантово-химических расчетов изолированных молекул перхлоратов пентааммин-(5-циано-2*H*-тетразolato-*N*²)кобальта(III), пентааммин-(5-нитротетразolato-*N*²)кобальта(III), тетрааммин-*цис*-бис(5-нитро-2*H*-тетразolato-*N*²)кобальта(III), тетрааммин-*цис*-бис-(1-метил-5-аминотетразоло-*N*³,*N*⁴)кобальта(III) и продуктов их возможной первичной стадии разложения. Определены энергетика и пути протекания таких реакций. Впервые с помощью квантово-химических расчетов показано, что распад амминатов кобальта может начаться с деструкции тетразольного лиганда и элиминирования молекулы азота, а не с диссоциации молекулы координированного аммиака из внутренней сферы комплекса кобальта(III). Определены энергии активации и диссоциации этих процессов.

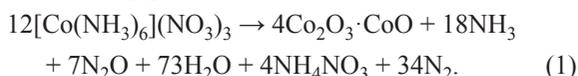
Ключевые слова: квантово-химический расчет, разложение, комплексные амминтетразолаты, инициирующая способность

DOI: 10.31857/S0044460X20040137

Известно, что на первой стадии термического разложения, являющейся общей для всех энергетических материалов, происходит разрыв слабых связей в молекуле, протекающий с поглощением тепла (стадия фрагментации). Последующие экзотермические процессы, включающие окислительно-восстановительные реакции, рекомбинацию свободных радикалов и т. д., приводят к образованию стабильных конечных продуктов [1]. При этом легкость возбуждения быстрого разложения энергетических материалов, в том числе детонации, в значительной степени зависит от энергии активации и энтальпии начальных стадий разложения [1, 2].

На первой стадии термораспада изученных к настоящему времени амминатов кобальта(III) происходит диссоциация из внутренней сферы

комплекса и последующее элиминирование молекулярного аммиака [3, 4]. Например, термическое разложение энергонасыщенного комплекса $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{NO}_3)_3$ является окислительно-восстановительным процессом и сопровождается элиминированием на начальных стадиях распада 1.5 молей аммиака на 1 моль исходного комплекса {см. уравнение (1) [3]}.



Можно предположить, что разложение амминатов кобальта(III), содержащих тетраазольные лиганды, начинается с диссоциации молекул аммиака из внутренней сферы октаэдра, находящихся в *транс*-положении по отношению к азольным лигандам. Далее, вероятно, протекают параллельно-последовательные процессы изомеризации

Минимальный заряд комплексов кобальта **1–4** по циклотриметилентринитроамину

Комплекс	Минимальный заряд, г	Ссылка
1	0.30	[6]
2	0.15	[6]
3	0.05	[4]
4	0.10	[4]

во внутренних сферах комплексов. Эти реакции сопровождаются изменением дентатности тетразолатных лигандов, окислением лигандов и частичным восстановлением центрального иона. Исследования показали, что оксид кобальта Co_3O_4 является основным твердым продуктом разложения перхлоратных аммиаатов кобальта(III) с тетразольными лигандами. В твердых продуктах термораспада этих соединений также найдены следы CoCl_2 . Восстановление Co(III) до Co(II) в процессе термолитиза амминных комплексов кобальта(III), очевидно, осуществляется внутрисферным аммиаком.

Амминаты кобальта(III) с тетразольными лигандами являются энергетическими материалами и некоторые из них обладают иницирующей способностью. Если задаться постоянством импульса иницирующей ударной волны, выбрав некоторый вторичный (бризантный) энергетических материалов с известными и постоянными параметрами чувствительности к ударной волне при неизменных условиях нагружения, то критерием иницирующей способности может стать масса иницирующего заряда, так как она определяет временные характеристики ударной волны и ее суммарный импульс фазы сжатия. Минимальную массу иницирующего (первичного) энергетического материала, обеспечивающую детонацию в испытываемом бризантном энергетическом материале, называют минимальным иницирующим импульсом или предельным иницирующим зарядом (минимальным зарядом). Сравнивая величины предельного (минимального) заряда иницирующего энергетического материала по отношению к какому-нибудь одному вторичному энергетическому материалу, можно судить об их относительной иницирующей способности, если испытания проводили в одних и тех же условиях, например в гильзе от капсуля-детонатора КД №8. Иницирование заряда первичного энергетическо-

го материала проводили лучом огня отрезка огнепроводного шнура или электровоспламенителем.

Например, минимальный заряд перхлоратов пентааммин-(5-циано-2*H*-тетразолато- N^2)-кобальта(III) **1**, пентааммин-(5-нитротетразолато- N^2)-кобальта(III) **2**, тетрааммин-*цис*-бис(5-нитро-2*H*-тетразолато- N^2)-кобальта(III) **3** и тетрааммин-*цис*-бис(1-метил-5-аминотетразоло- N^3, N^4)-кобальта(III) **4** по вторичному энергетическому материалу – циклотриметилентринитроамину уменьшается в ряду **1** < **2** < **4** < **3** (см. таблицу). Чем меньше минимальный заряд, тем выше иницирующая способность и эффективность комплекса кобальта. Энергонасыщенные комплексы **1–4** представляют собой кристаллические вещества оранжевого цвета плотностью от 1.90 до 2.05 г/см³. Уровень чувствительности рассматриваемых комплексов к механическому воздействию соответствовал уровню современных мощных бризантных энергетических материалов, т. е. они значительно безопаснее в обращении по сравнению с классическими иницирующими энергетическими материалами [1]. Поскольку комплексы **1–4** не содержат в составе суперэкоксидантов – атомов свинца и ртути, то они более экологичны, чем штатные иницирующие энергетические материалы (например, азид свинца или гремучая ртуть) [5].

Сокращение минимального заряда в ряду комплексов **1–3** не противоречит приведенному единому механизму термораспада амминатов кобальта(III). Так, введение вместо нитрильной группы эксплозифорной NO_2 -группы в тетразольный лиганд должно было увеличить эффективность комплекса **2** по сравнению с комплексом **1**. Действительно, минимальный заряд комплекса **2** в два раза меньше, чем у комплекса **1** (см. таблицу). Замена молекулы аммиака на 5-нитротетразолатный лиганд в комплексе **3** также привела к ожидаемому сокращению участка перехода горения в детонацию и уменьшению минимальный заряд по сравнению с комплексом **2** (см. таблицу). Повышение иницирующей способности в приведенном ряду амминатов кобальта **1–3** сопровождалось сокращением времени перехода горения в детонацию (75, 12 и 6–8 мкс соответственно), что также можно связать с накоплением числа эксплозифорных групп у тетразолатных лигандов в комплексах кобальта **1–3** [7].

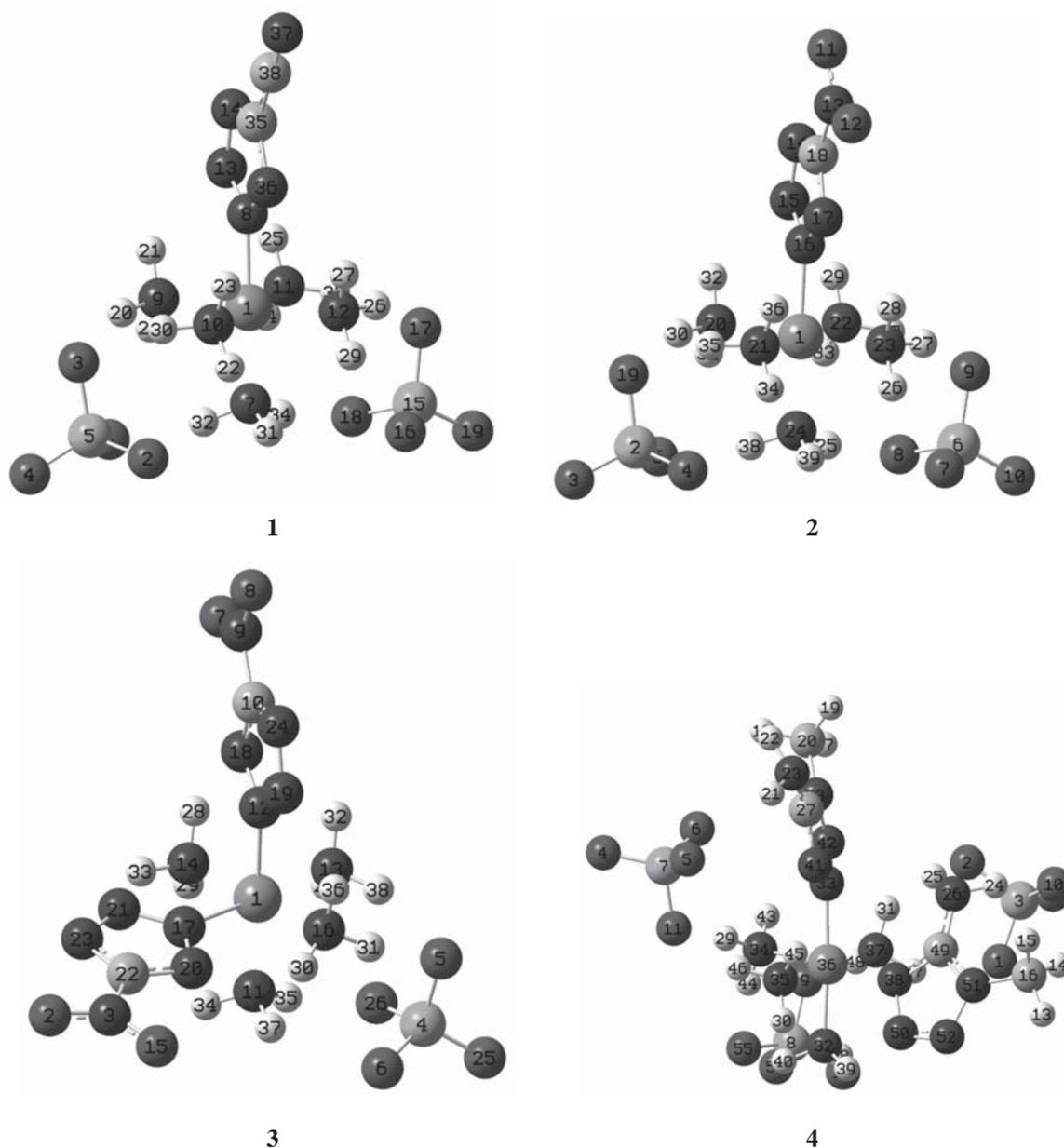


Рис. 1. Оптимизированные в базисе 6-31+G(d) структуры молекул 1–4.

В стройную картину влияния NO_2 -группы на инициирующую способность комплексов кобальта не вписывается необычно высокая инициирующая способность комплекса **4**, который по эффективности оказался на втором месте, лишь незначительно уступая комплексу **3**. Так, минимальный заряд комплекса **4** по циклотримелитринитроамину больше, чем у комплекса **3**, но меньше, чем у комплекса **2** (см. таблицу). Полученный результат не может быть объяснен в рамках единого механизма разложения амминатов кобальта(III), первой ста-

дией которого является элиминирование молекулы аммиака, поскольку в комплексе **4** тетразольные лиганды не имели эксплозифорных заместителей, а введение метильной группы в азольный лиганд практически всегда ранее приводило к снижению эффективности металлокомплекса как первичного энергетического материала, по сравнению с комплексом, в состав которого входил лиганд – незамещенный тетразол, не говоря уже о комплексе с лигандом, содержащем эксплозифорную группу (5-нитротетразол) [2, 4, 8].

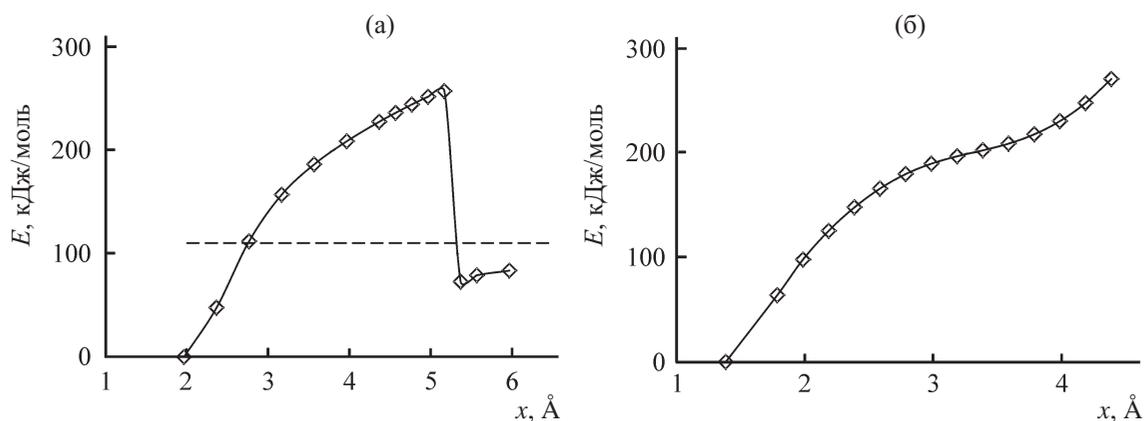


Рис. 2. Элиминирование молекулы аммиака (а) и раскрытие тетразольного цикла (б) в молекуле комплекса **1**. (а) Растяжение связи центрального иона с аммиаком $\text{Co}^{\text{I}}-\text{N}^{\text{9}}$; (б) растяжение связи в тетразольном цикле $\text{N}^{\text{8}}-\text{N}^{\text{13}}$.

Мы предположили, что для амминатов кобальта с тетразольными лигандами, имеющими заместители, могут реализовываться и иные механизмы начальных стадий разложения, отличные от процессов элиминирования молекулярного аммиака из внутренней сферы комплекса. Квантово-химические расчеты позволили выявить основные первичные механизмы и энергетику разложения комплексов **1–4**. Квантово-химические расчеты были выполнены с привлечением пакета программ Gaussian 09 в приближении теории функционала плотности [9] с использованием гибридного функционала B3LYP и спин-поляризованного базисного набора электронных функций 6-31+G(d). Простейший валентно-расщепленный базисный набор 3-21G использовали для большого числа предварительных и вспомогательных расчетов. Так, набор 3-21G был применен для большого объема вычислений различных возможных путей первичных стадий разложения: определения энергетических барьеров этих реакций, переходных состояний и кривых потенциальной энергии для процессов отрыва фрагментов или раскрытия цикла. Свойства рассмотренных веществ определяли для состояния изолированных молекулярных комплексов. Проводили расчеты геометрии и электронных состояний молекул и образующихся при их разложении отдельных фрагментов. Поправки на энергию нулевых колебаний E_0 принимали во внимание в расчетах всех стационарных и переходных состояний. Были определены практически все молекулярные свойства рассмотренных

молекул и фрагментов, в том числе, полные электронные энергии молекул E_e , поправки на нулевые энергии E_0 , энергии атомизации, энергии высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО) и энергетические зазоры между ними E_g , распределения электронной плотности на атомах (малликовских зарядов). Инфракрасные спектры для основных состояний молекул **1–4**, их ионов и фрагментов молекул, образующихся при разложении, также были рассчитаны и сравнены с экспериментальными ИК спектрами кристаллических образцов. Оптимизированные в базисе 6-31+G(d) структуры молекул **1–4** показаны на рис. 1 [10].

Вычисления механизмов начальных стадий разложения были выполнены для оптимизированных молекулярных структур **1–4** в основном состоянии, а также в возбужденном триплетном и заряженном (положительно и отрицательно) состояниях. Были рассмотрены иные механизмы начальных стадий распада комплексов **1–4**, в том числе раскрытие тетразольного цикла. Некоторые из полученных результатов рассмотрены ниже. На рис. 2–5 показаны кривые изменения потенциальной энергии при последовательном растяжении одной из межатомных связей. Результаты для молекулярных единиц **1** и **2** показаны на рис. 2, 3. Из рис. 2 следует, что для комплекса **1** раскрытие тетразольного цикла на начальных стадиях разложения энергетически невыгодно (рис. 2б). Для этого соединения реализуется только классический механизм первой стадии распада – элиминирование

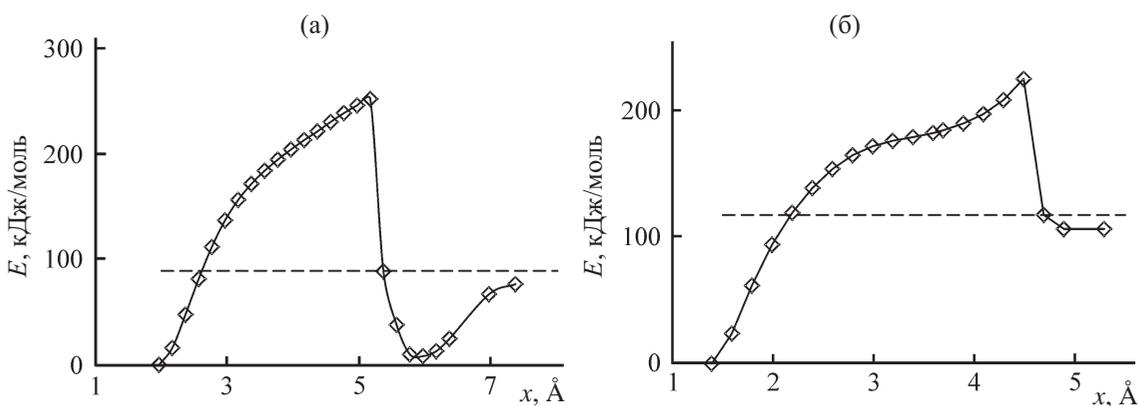


Рис. 3. Элиминирование молекулы аммиака (а) и раскрытие тетразольного цикла с последующим элиминированием молекулы азота (б) в молекуле комплекса **2**. (а) Растяжение связи центрального атома с аммиаком $\text{Co}^1\text{-N}^{20}$; (б) растяжение связи в тетразольном цикле $\text{N}^{15}\text{-N}^{16}$.

молекулы аммиака из внутренней сферы комплекса (рис. 2а).

Для комплекса **2** реализуется как классический механизм первой стадии распада – элиминирование молекулы аммиака из внутренней сферы комплекса (рис. 3а), так и разрыв связи в тетразольном кольце с элиминированием молекулы N_2 (рис. 3б). Причем в молекуле комплекса **2** диссоциация NH_3 сопровождается одновременной перестройкой оставшегося молекулярного фрагмента [11, 12]. Следует отметить, что в комплексе **2** более энергетически выгодно элиминирование молекулы аммиака из внутренней сферы координационного соединения. Энергетически невыгодным оказалось отщепление от комплекса **2** хлорной кислоты, 5-нитротетразолатного лиганда, и нитрогруппы от 5-нитротетразолатного лиганда [11, 12].

Результаты исследования термораспада комплекса **2** полностью подтвердили результаты квантово-химических расчетов. Так, методом масс-спектрометрии было показано, что термолит соли **2** начинается с диссоциации молекулы аммиака в диапазоне 150–250°C. Однако выше 200°C в продуктах термораспада обнаружен HCN , что является прямым доказательством предсказанной деструкции тетразольного кольца в комплексе **2** [13, 14].

Для комплекса **3** возможны несколько путей начала разложения: элиминирование молекулы аммиака из основного (рис. 4а), возбужденного (триплетного) (рис. 4е), и положительно заряженного

состояний (рис. 4ж), находящегося в *транс*-положении по отношению к 5-нитротетразолатному заместителю. Причем в молекуле комплекса **3** в основном состоянии диссоциация NH_3 сопровождается одновременной перестройкой оставшегося молекулярного фрагмента, в то время как диссоциация молекулы аммиака в *цис*-положении к аниону 5-нитротетразола энергетически невыгодна для данного соединения (рис. 4б). Также энергетически невыгодным оказалось отщепление хлорной кислоты (рис. 4г) и отщепление нитрогруппы от 5-нитротетразолатного лиганда (рис. 4д). Полученные результаты совпали с результатами предварительных квантово-химических исследований для комплекса **3** [11, 12]. Для комплекса **3** вероятно также раскрытие тетразольного цикла лиганда (рис. 4в).

Несколько менее вероятен процесс элиминирования молекулы аммиака из *транс*-положения к 5-нитротетразолатному лиганду от катиона (рис. 4з), образовавшегося после потери комплексом **3** перхлорат-аниона (рис. 5а) [10].

Для комплекса **4** возможно элиминирование молекулы NH_3 , находящейся в *транс*-положении к тетразольному лиганду (рис. 6а). Энергетически значительно менее выгодна диссоциация молекулы NH_3 , расположенной в *цис*-положении по отношению к тетразольному лиганду (рис. 6б) Еще менее энергетически выгодно элиминирование молекулы NH_3 от катиона комплекса **4** (рис. 6в) после потери им внешнесферных перхлорат-

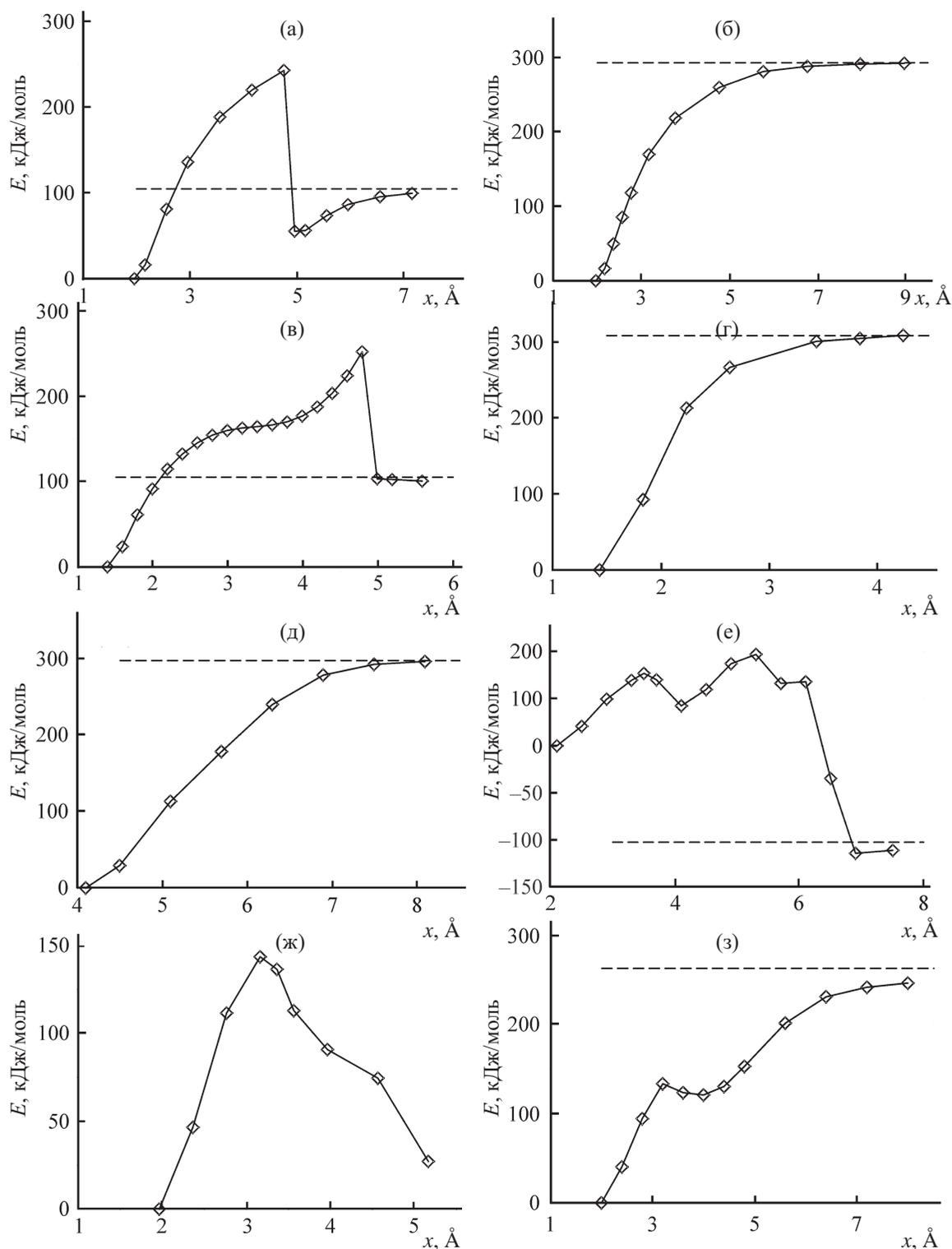


Рис. 4. Возможные пути начальных стадий разложения в молекуле комплекса **3**. (а, б) Элиминирование молекулы аммиака (растяжение связи $\text{Co}^1\text{-N}^{13}$ и $\text{Co}^1\text{-N}^{14}$ соответственно); (в) раскрытие тетразольного цикла (растяжение связи $\text{N}^{12}\text{-N}^{19}$); (г) отщепление нитрогруппы (растяжение связи $\text{N}^3\text{-C}^{22}$); (д) отщепление молекулы хлорной кислоты (растяжение связи $\text{Co}^1\text{-Cl}^4$); (е, ж) отщепление молекулы аммиака от возбужденного состояния и положительно заряженной молекулы (растяжение связи $\text{Co}^1\text{-N}^{13}$); (з) элиминирование молекулы аммиака от катиона (растяжение связи $\text{Co}^1\text{-N}^{10}$).

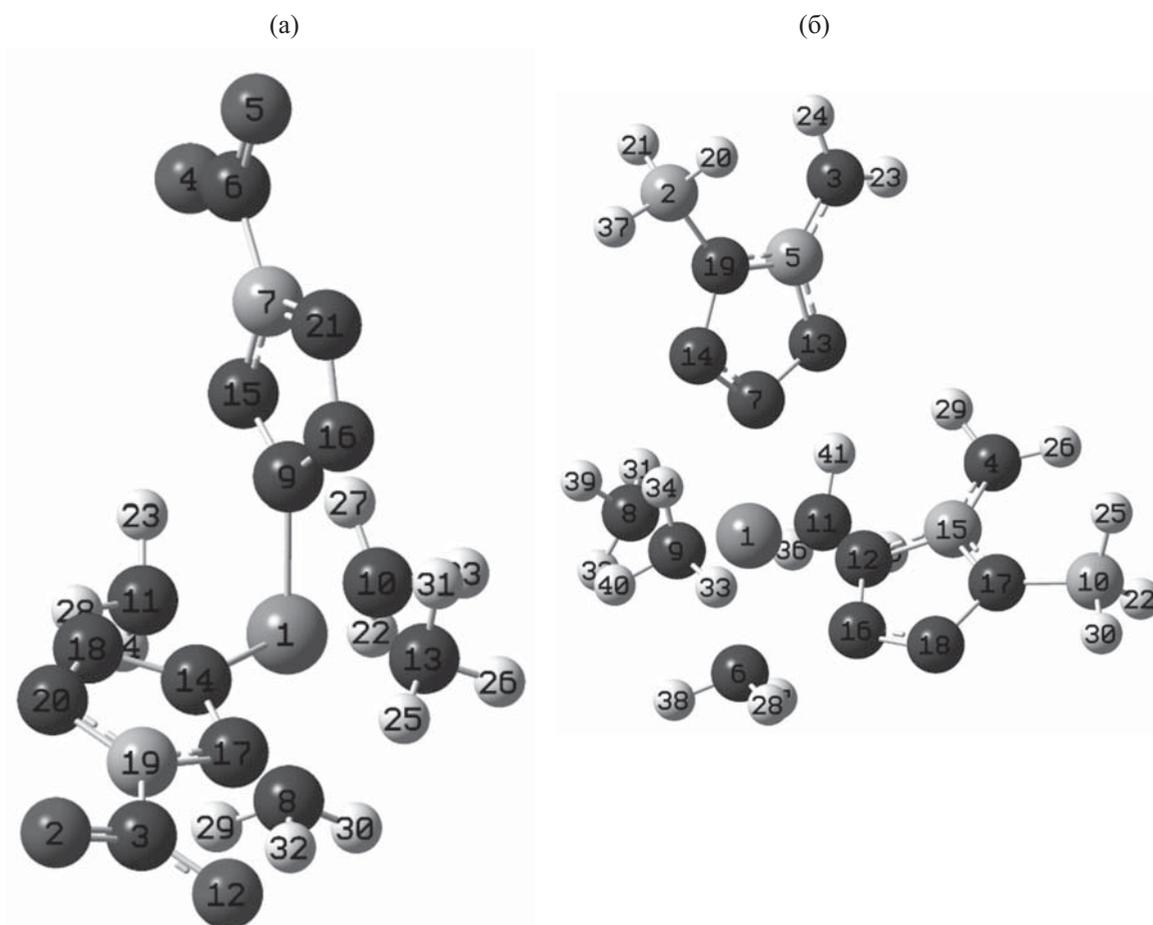


Рис. 5. Оптимизированные структуры катионов комплексов **3** (а) и **4** (б) после потери ими перхлорат-анионов.

ионов (рис. 6б). Наличие заместителя у атома азота N^1 приводит к тому, что раскрытие тетразольного цикла становится более выгодным у атома азота N^4 , не имеющего заместителя (ср. рис. 6г и 6е). Процесс начинается с раскрытия тетразольного цикла у атома азота N^4 , затем осуществляется элиминирование молекулы N_2 , что является наиболее энергетически выгодным для комплекса (рис. 6е).

Изменение начальной стадии распада комплекса **4** и ее повышенная энтальпия за счет образования молекулы азота привели к сокращению участка перехода горения в детонацию соединения **4** и повышения эффективности как инициирующего энергетического материала (см. таблицу). Раскрытие тетразольного цикла по атомам азота N^2 или N^3 (рис. 6ж, з) оказалось энергетически значительно менее выгодным, чем по атому азота N^4 с последующим элиминированием молекулы N_2 (рис. 6е). Поэтому протекание данных превра-

щений на начальной стадии разложения комплекса **4** является маловероятным.

Можно отметить, что в первом приближении реализуются два основных наблюдаемых механизма разложения перхлоратов амминтетразолатовкобальта(III): элиминирование молекулы аммиака и раскрытие тетразольного кольца с последующим удалением молекулы азота, которые имеют достаточно близкие энергетические барьеры. Уточнение этой проблемы требует более сложных методов исследования.

Таким образом, расчетно-экспериментальными исследованиями было подтверждено предположение, что на механизм начальных стадий термораспада амминатов кобальта с тетразольными лигандами влияет природа заместителей в тетразольном лиганде. Впервые расчетами показано, что распад амминатов кобальта может начаться с деструкции тетразольного лиганда и элиминирования молеку-

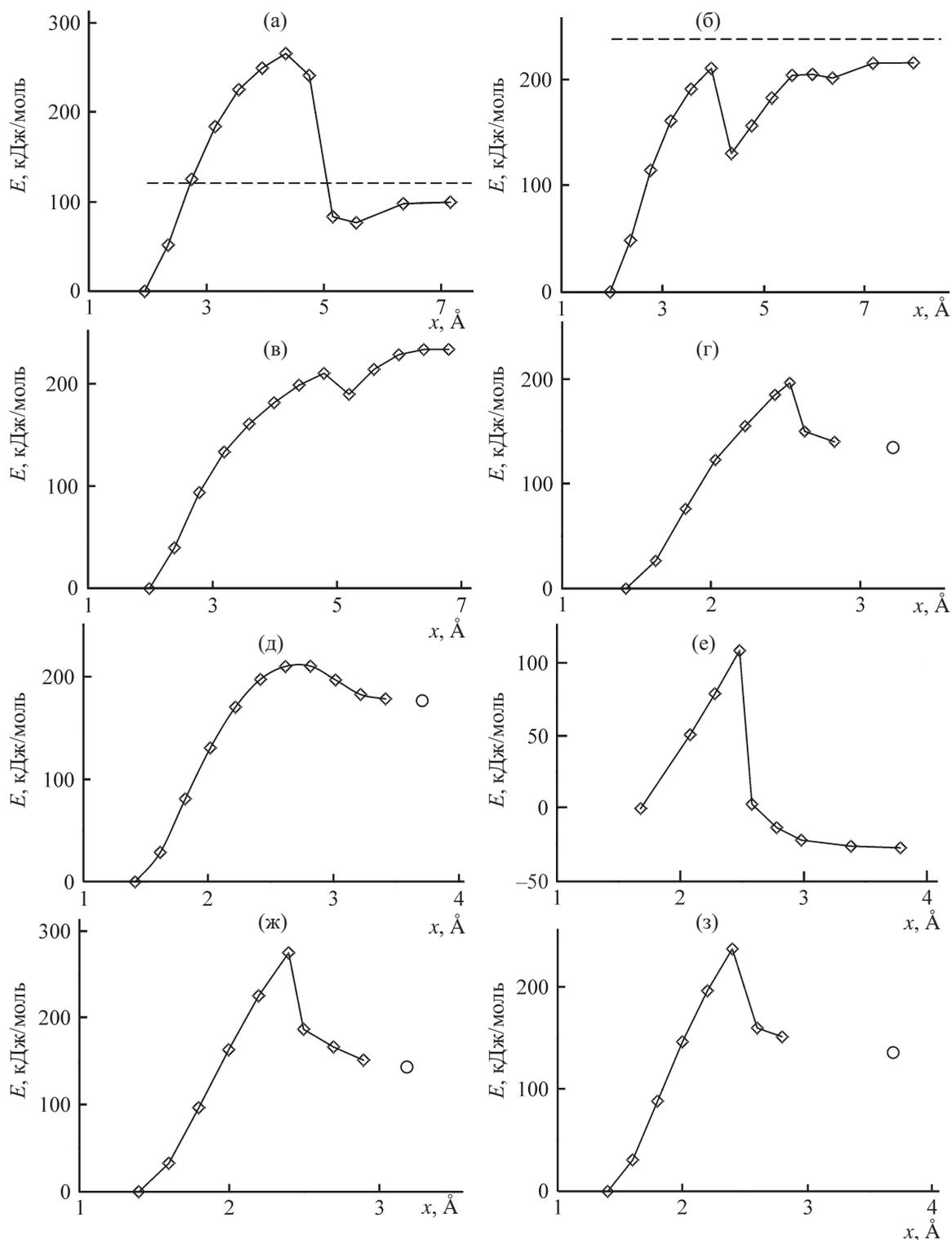


Рис. 6. Возможные пути начальных стадий разложения в молекуле комплекса 4. (а, б) Элиминирование молекулы аммиака (растяжение связи $N^{34}-Co^{36}$ и $N^{35}-Co^{36}$); (в) элиминирование молекулы аммиака от катиона (растяжение связи $Co^{1}-N^8$); (г) раскрытие тетразольного цикла по атому азота N^4 (растяжение связи $N^{38}-N^{50}$); (д) раскрытие тетразольного цикла по атому азота N^1 , имеющего метильную группу (растяжение связи $N^{51}-N^{52}$); (е) элиминирование молекулы азота после раскрытия тетразольного цикла по атому азота N^4 (растяжение связи $N^{38}-N^{50}$); (ж) раскрытие тетразольного цикла по атому азота N^2 (растяжение связи $N^{42}-N^{53}$); (з) раскрытие тетразольного цикла по атому азота N^3 (растяжение связи $N^{33}-N^{41}$).

лы азота, а не с диссоциации молекулы координированного аммиака из внутренней сферы комплекса кобальта(III). Возможность изменения начальных стадий разложения амминатов кобальта(III) с тетразольными лигандами в зависимости от природы заместителей в тетразольном кольце следует учитывать при прогнозировании эффективности этих комплексов как инициирующих энергетических материалов.

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №№ 16-29-01056-офи_м, 17-03-00566).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Matyáš R., Pachman J.* Primary explosives. Heidelberg: Springer, 2013. doi 10.1007/431 978-8-642-28436-6
2. *Klapoetke T.M.* Chemistry of High-Energy Materials. Berlin; Boston: Walter de Gruyter GmbH, 2017.
3. *Браун М., Доллимор Д., Галвей А.* Реакции твердых тел. М.: Мир, 1983. 359 с.; Comprehensive Chemical Kinetics / Eds C.H. Bamford, C.F.H. Tipper. Amsterdam; Oxford; New York: Elsevier, 1980. Vol. 22.
4. *Илюшин М.А., Шугалей И.В., Судариков А.М.* Высокоэнергетические металлокомплексы. Синтез, свойства, применение. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing RU, 2017. 268 с.
5. *Ilyushin M.A., Shugalei I.V.* In: Handbook of Ecomaterials / Eds L.M.T. Martínez, O.V. Kharissova, B.I. Kharisov. Cham: Springer Nature Switzerland AG, 2019. P. 3433. doi 10.1007/978-3-319-68255-6_46
6. *Смирнов А.В., Федотов С.А., Агеев М.В., Ведерников Ю.Н., Илюшин М.А.* // Боеприпасы и высокоэнергетические конденсированные системы. 2018. № 1. С. 31.
7. Bates L.R. // Proc. 13 Symposium on Explosives and Pyrotechnics, Hilton Head Island, USA, 1986. P. III/1.
8. *Ostrovskii V.A., Popova E.A., Trifonov R.E.* // Adv. Heterocycl. Chem. 2017. Vol. 123. P. 1. doi 10.1016/bs.aihch.2016.12.003
9. *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Peralta J.E., Jr., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J.* Gaussian 09, Revision A1, Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.
10. *Golubev V.K., Ilyushin M.A.* // Proc. 20 Seminar «New trends in research of energetic materials», Pardubice, Czech Republic, 2017. Pt 1. P. 580.
11. *Голубев В.К., Илюшин М.А.* // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 2. С. 312; *Golubev V.K., Ilyushin M.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 2. P. 286. doi 10.1134/S1070363217020220
12. *Golubev V.K., Ilyushin M.A.* // Proc. 19 Seminar «New trends in research of energetic materials», Pardubice, Czech Republic, 2016. Pt 2. P. 535.
13. *Ilyushin M.A., Smirnov A.V., Shugalei I.V., Golubev V.K.* // Proc. 20 Seminar «New trends in research of energetic materials», Pardubice, Czech Republic, 2017. Pt 2. P. 701.
14. *Илюшин М.А., Тверьянович Ю.С., Тверьянович А.С., Аверьянов А.О., Смирнов А.В., Шугалей И.В.* // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 11. С. 1860; *Ilyushin M.A., Tverjanovich Yu.S., Tverjanovich A.S., Aver'yanov A.O., Smirnov A.V., Shugalei I.V.* // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 11. P. 2600. doi 10.1134/S1070363217110147

Influence of Peculiarities of the Mechanism of the Initial Stages of Ligand Decomposition on the Initiating Ability of Cobalt(III) Amminetetrazolates

M. A. Ilyushin^{a,*}, I. V. Shugaley^a, A. S. Tver'yanovich^b, and A. V. Smirnov^a

^a St. Petersburg State Institute of Technology (Technical University), St. Petersburg, 190013 Russia

^b St. Petersburg State University, St. Petersburg, 198504 Russia

*e-mail: explaser1945@yandex.ru

Received October 1, 2019; revised October 1, 2019; accepted October 3, 2019

The results of quantum chemical calculations of isolated molecules of pentaammine-(5-cyano-2*H*-tetrazolato-*N*²)-, pentaammine-(5-nitrotetrazolato-*N*²)-, tetraammine-*cis*-bis(5-nitro-2*H*-tetrazolato-*N*²)-, tetraammine-*cis*-bis(1-methyl-5-aminotetrazolo-*N*³,*N*⁴)cobalt(III) perchlorates and the products of their possible primary decomposition stage are presented. The energetics and pathways of such reactions are determined. For the first time, using quantum chemical calculations, it was shown that the decomposition of cobalt aminates can begin with the destruction of the tetrazole ligand and elimination of the nitrogen molecule, and not with the dissociation of the coordinated ammonia molecule from the inner sphere of the cobalt(III) complex. The activation and dissociation energies of these processes are determined.

Keywords: quantum-chemical calculation, decomposition, complex amminetetrazolates, initiating ability