

УДК 536.46

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ *s*-ТРИАЗИНЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АМИНОФУРАЗАНА И АМИНОФУРОКСАНА — ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Д. Фрем

Институт молекулярной химии и химии материалов, 91405 Орсе, Франция, dany.frem@u-psud.fr

Проведено теоретическое исследование ряда *s*-триазинзамещенных производных аминифуразана и аминифуроксана в качестве потенциальных высокоэнергетических твердых/плотных материалов. Кристаллическая плотность, теплота образования в конденсированном состоянии, детонационные характеристики, метательная способность и критическое давление инициирования оценены с применением эмпирических соотношений. Установлено, что эти соединения характеризуются высокими значениями теплоты образования ($817 \div 4067$ кДж/кг) и кристаллической плотности ($1.76 \div 1.95$ г/см³). Расчет детонационных характеристик показал, что производные с заместителями $-\text{N}_3$ и $-\text{C}(\text{NO}_2)_3$ могут рассматриваться как кандидаты в высокоэнергетические материалы. Более того, из значений критического давления инициирования следует, что производные фуроксана более чувствительны к удару и сжатию, чем производные фуразана, и в случае заместителей $-\text{NH}_2$ или азотсодержащих гетероциклов может быть получена такая же чувствительность к удару, как у TNT (2,4,6-тринитротолуол), или ниже.

Ключевые слова: взрывчатые вещества, 1,2,5-оксадиазол, детонационные свойства, критическое давление инициирования, *s*-триазин.

ВВЕДЕНИЕ

Взрывчатые вещества, ракетные топлива и пиротехнические вещества, обычно называемые высокоэнергетическими плотными материалами (ВЭПМ), в настоящее время широко используются в военных, космических и коммерческих приложениях [1, 2]. В последние годы большое внимание уделяется синтезу новых энергетических материалов с высоким содержанием азота [3–8]. 1,3,5-триазин (или *s*-триазин), шестичленный циклический гетероцикл с чередующимися связями C—N, является потенциальным строительным блоком для разрабатываемых энергетических материалов благодаря положительной теплоте образования в конденсированном состоянии ΔH_f^0 , высокому содержанию азота (53.8 %) и термической устойчивости. Недавно был синтезирован новый полиазидо-ди-1,3,5-триазин с гидразо- и азомостиками [9] и обнаружено, что это соединение — 4,4',6,6'-тетра(азидо)азо-1,3,5-триазин (ТААТ) — характеризуется одним из самых

больших значений ΔH_f^0 среди энергетических материалов: 6 164 кДж/кг (+2 171 кДж/моль). Кроме того, рассчитано, что ТААТ обладает хорошими детонационными параметрами: скоростью $D = 7.80$ км/с и давлением $p = 26$ ГПа [10]. Более того, при взрыве соединений с высоким содержанием азота в первую очередь в качестве промежуточного продукта образуется экологичный и нетоксичный молекулярный N_2 . Поэтому такие соединения считаются привлекательной заменой современным взрывчатым веществам на основе свинца (например, азиду свинца) для применения в качестве детонатора.

Производные фуразана и фуроксана выполняют важные функции в биологических системах (например, они используются как доноры NO [11], антималярийные средства [12]), а также являются мощными синтонами для новых ВЭПМ. В качестве примера мощных взрывчатых веществ на основе фуроксана с высокой кристаллической плотностью и хорошими детонационными характеристиками можно указать (Е,Е)-3,4-бис(оксиметил)фуроксан [13] и бензотрифуроксан [14], хотя они и не содержат традиционных «взрывофорных» групп — нитро-, нитрато- и нит-

раминогрупп. В 1981 г. был синтезирован 3,3'-диамино-4,4'-азоксифуразан путем окисления диаминофуразана [15]. В работе [16] было установлено, что это соединение термически стабильно вплоть до 230 °С. Его исследовали [17] в качестве замены им 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола, используемого в настоящее время министерством обороны США в малочувствительном взрывчатом веществе PBXN-7.

Поскольку синтез и тестирование новых систем ВЭПМ — длительные и дорогостоящие процедуры, теоретические исследования представляются идеальным выбором для скрининга новых энергетических материалов перед тем, как предпринимать попытки их синтеза. В работе проведено теоретическое исследование кристаллической плотности, теплоты образования, детонационных характеристик и чувствительности к удару ряда производных фуразана и фуроксана, связанных через —NH— группу с *s*-триазиновым кольцом (рис. 1).

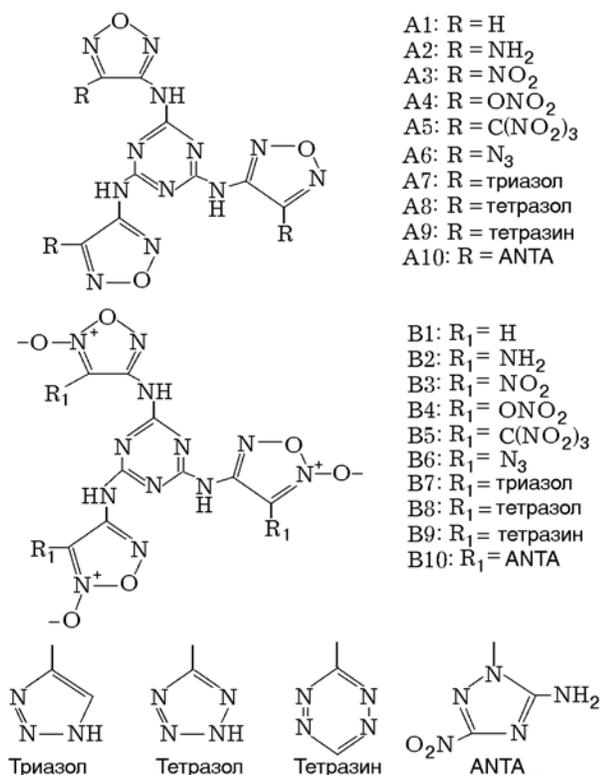


Рис. 1. Структуры аминифуразановых и аминифуроксановых производных *s*-триазина

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ

Физико-химические свойства

Для расчета ρ_0 и ΔH_f^0 использовали эмпирические соотношения, предложенные в [18, 19]. Они применимы к большому числу энергетических молекул сложной структуры и требуют только знания молекулярной формулы. Для различных соединений $C_aH_bN_cO_d$ можно воспользоваться соотношениями

$$\rho_0 = -1.609 + \frac{29.20a + 1.515b + 53.06c + 61.30d}{M_w} + 0.0703C_{PG} - 0.0751C_{NG} \quad [\text{г/см}^3], \quad (1)$$

$$\Delta H_f^0 = \Delta H_{EC}^0 + 105.0\Delta H_{IEC}^0 - 106.6\Delta H_{DEC}^0 \quad [\text{кДж/моль}], \quad (2)$$

где $\Delta H_{EC}^0 = 32.33a - 39.49b + 92.41c - 63.85d$ — энергосодержание, предсказываемое исходя из элементного состава, M_w — молекулярная масса, C_{PG} , C_{NG} и ΔH_{IEC}^0 , ΔH_{DEC}^0 — положительные и отрицательные вклады некоторых особых структурных групп, влияющих соответственно на ρ_0 и ΔH_f^0 . Было показано, что уравнение (1) дает более надежные результаты по сравнению с методом аддитивности групп Тарвера [20] и Эммона [21], в то время как уравнение (2) дает меньшие среднеквадратичные величины, чем аддитивный [22] и квантово-химический [23, 24] методы.

Энергетические свойства

Скорость D и давление p детонации вычисляли по эмпирическим уравнениям Кэмлента — Якобса [25]:

$$D = 1.01\varphi^{1/2}(1 + 1.30\rho_0) \quad [\text{км/с}], \quad (3)$$

$$p = 15.58\rho_0^2\varphi \quad [\text{ГПа}]. \quad (4)$$

Здесь $\varphi = N\sqrt{MQ}$, N — число молей газообразных продуктов на 1 г взрывчатого вещества, M — средняя молекулярная масса газовых продуктов, Q — теплота взрыва, кал/г, ρ_0 — начальная плотность.

Еще одно важное свойство взрывчатого материала — баллистическая способность. Конечная скорость фрагментов (без сопротивления воздуха), разогнанных при детонации взрывчатого вещества, заключенного в оболочку сферической, цилиндрической или плоской формы из металла (или другого инертного материала), может быть вычислена по аналитической модели Гарни [26, 27]:

$$v = \sqrt{2E_g} \left(\mu + \frac{n}{n+2} \right)^{-1/2}, \quad (5)$$

где $n = 1, 2, 3$ соответственно для планарной, цилиндрической и сферической геометрии, μ — отношение массы металла к массе взрывчатого вещества, $\sqrt{2E_g}$ — скорость Гарни (постоянная величина для данного взрывчатого вещества), км/с, вычисляемая по уравнению, предложенному в работе [28]:

$$\sqrt{2E_g} = 0.6 + 0.54\sqrt{1.44\varphi\rho_0}. \quad (6)$$

Разрабатываемые новые энергетические материалы должны обладать высокими детонационными характеристиками и в то же время сохранять низкую чувствительность к внешним воздействиям, таким как давление, удар и трение. В данном исследовании уравнение из работы [29] было адаптировано к вычислению p_{cr} , которое определяется как нижнее значение давления, приводящее к инициированию взрыва. В [29], где исследовалось 15 органических взрывчатых веществ различного состава C—H—N—O, показано, что критическое давление инициирования p_{cr} линейно связано с максимальной волюметрической теплотой взрыва $\rho_0 Q_{\max}$:

$$p_{cr} = (26.2 \pm 1.7) - (6.4 \pm 0.6) \cdot 10^{-3} \rho_0 Q_{\max} \quad [\text{кбар}] \quad (r = 0.962), \quad (7)$$

$\rho_0 Q_{\max}$ — в кал/см³, $Q_{\max} \equiv Q$ (см. таблицу).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Плотность и теплота образования

Для любого энергетического материала кристаллическая плотность и теплота образования в твердом состоянии — ключевые свойства для прогнозирования динамических параметров, таких как скорость и

давление детонации. Отраженная на рис. 1 структурная особенность заключается в том, что ряд В (производные аминифураксана с *s*-триазиновым заместителем) имеет дополнительный кислород вне цикла при атоме N2 (N-оксид) 1,2,5-оксадиазольного кольца по сравнению с соединениями ряда А (*s*-триазинзамещенные аминифуразановые производные), что приводит к большей теоретической кристаллической плотности в первом случае (см. таблицу). Однако введение N-оксидного компонента уменьшает теплоту образования всех членов ряда В (кроме соединения В4) по сравнению с рядом А, согласно сравнительному изучению ВЭПМ на основе фуразанов и фуроксанов [32]. Как видно из таблицы, для обоих рядов меньшая теплота образования (менее положительные значения, кДж/моль) получается для заместителей —NO₂, —ONO₂ или —C(NO₂)₃ по сравнению с незамещенными соединениями (R = R₁ = —H) и —NH₂-замещенными структурами. Хорошо известно, что ВЭПМ с аминогруппами способны образовывать множество внутри- и межмолекулярных водородных связей с другими полярными группами (например, —NO₂, —NH₂), что уменьшает теплоту образования (стабилизирует систему) и увеличивает плотность. Таким образом, соединения А1, В1 характеризуются более высокими значениями теплоты (2 262 ÷ 2 052 кДж/кг), чем соединения А2, В2 (1 817 ÷ 1 680 кДж/кг). Очень высокая теплота получена в случаях, когда заместителями являются группы —N₃ или гетероциклы, богатые азотом (А6–А10 и В6–В10) из-за большого числа эндотермических связей N—N и N=N. Все предложенные структуры обладают высокой кристаллической плотностью (≥ 1.76 г/см³, см. таблицу). Одной из причин этого является плоская структура как 1,2,5-оксадиазола, так и *s*-триазинового кольца. Особый интерес вызывают соединения А5, А6 и В5, В6, в которых замещение группами —N₃ и —C(NO₂)₃ ясно показывает важность этих заместителей в качестве перспективных кандидатов для получения очень плотных структур. В целом, 16 из предложенных структур имеют плотность, равную или превосходящую плотность хорошо известных нитраминиров RDX (1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадиазоциклогексан) и HMX (1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетраазадиазоциклооктан).

Вычисленные физико-химические и энергетические характеристики соединений рядов А и В

Соединение	ρ , г/см ³	Q , Дж/г	$\Delta H_f(s)$		D , км/с	p , ГПа	КБ ^a , %	$\sqrt{2E_g}$, км/с
			кДж/моль	кДж/кг				
A1	1.77	1066	747	2262	7.00	21.60	-87.3	2.41
A2	1.81	939	682	1817	7.10	22.50	-83.20	2.43
A3	1.86	1334	760	1634	8.18	30.30	-36.10	2.69
A4	1.82	1380	535	1042	8.26	30.40	-23.40	2.72
A5	1.93	1489	645	830	8.93	34.60	-9.30	2.87
A6	1.91	1291	1792	3953	8.13	30.20	-53.30	2.67
A7	1.76	1113	1683	3167	6.76	20.00	-94.90	2.35
A8	1.86	1296	2173	4067	7.84	27.80	-71.90	2.61
A9	1.80	1268	2302	4036	7.37	24.10	-84.20	2.50
A10	1.81	1201	1602	2252	7.71	26.50	-57.40	2.58
B1	1.83	1322	776	2052	7.85	27.60	-63.50	2.62
B2	1.86	1182	711	1680	8.10	28.00	-62.40	2.62
B3	1.89	1498	789	1537	8.67	34.30	-23.40	2.81
B4	1.84	1539	597	1064	8.68	33.80	-12.80	2.83
B5	1.95	1581	674	817	9.20	36.90	-2.90	2.93
B6	1.95	1554	2013	4016	8.79	35.90	-43.10	2.83
B7	1.80	1276	1712	2955	7.50	25.00	-78.80	2.53
B8	1.90	1364	2010	3452	8.20	30.80	-57.70	2.69
B9	1.84	1409	2331	3770	7.86	27.80	-69.90	2.62
B10	1.83	1320	1631	2148	8.10	29.00	-47.40	2.67
RDX	1.81 ^b	1501	79.10 ^c	356	8.84	34.81	-21.60	2.88
HMX	1.90 ^b	1476	75.00 ^c	253	9.12	38.10	-21.60	2.92

^aДля соединения состава $C_aH_bN_cO_d$ КБ = $(d - 2a - b/2) \cdot 1600/M_w$, ^b данные [30], ^c [31].

Детонационные характеристики и метательная способность

Чтобы охарактеризовать мощность взрывчатого материала, традиционно используются скорость и давление детонации. Эмпирические соотношения Кэмлета — Якобса (3), (4) оказались надежными для предсказания их значений для органических взрывчатых веществ состава C—H—N—O при $\rho_0 > 1$ г/см³ [30, 33]. Столь же важным параметром является скорость Гарни $\sqrt{2E_g}$, которая, как показывает уравнение (5), при заданных геометрии и значении μ суть единственный параметр, необходимый для оценки способности детонирующего взрывчатого вещества разогнать матери-

ал оболочки (особое внимание уделяется металлам). Скорость Гарни можно вычислить по уравнению (6) или получить экспериментально в цилиндр-тесте [34]. В таблице приведены результаты расчета D , p , Q , $\sqrt{2E_g}$ и кислородного баланса (КБ) для *s*-триазинзамещенных аминифуразановых и аминифуроксановых производных.

Вычисленные значения Q показывают, что полезными заместителями для увеличения теплоты детонации являются $-\text{NO}_2$, $-\text{ONO}_2$ и $-\text{C}(\text{NO}_2)_3$. Этого и следовало ожидать, поскольку введение нитрогрупп обеспечивает положительный кислородный баланс, что означает образование при детонации более окислен-

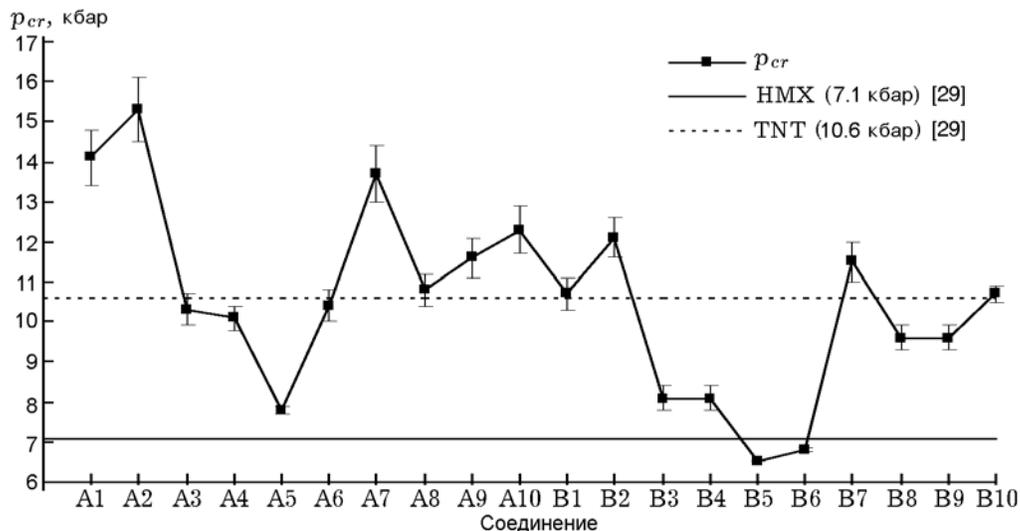


Рис. 2. Результаты расчета критического давления инициирования по уравнению (7) (точки)

ных продуктов. Это также справедливо и для членов ряда В, которые имеют один добавочный атом кислорода по сравнению с соответствующими соединениями ряда А и, следовательно, характеризуются более высокими значениями Q .

С другой стороны, соединения обоих рядов отличаются хорошими детонационными характеристиками: $D = 6.76 \div 9.2$ км/с, $p = 20.00 \div 36.90$ ГПа. Конечно, на D и p влияют теплота взрыва и кристаллическая плотность, что делает соединения В5 и В6 интересными системами для новых ВЭПМ. В то же время, хотя соединения с гетероциклами-заместителями (А7–А10 и В7–В10) в обоих рядах характеризуются большой теплотой образования, их детонационные характеристики не столь высоки, как у соединений с нитросодержащими группами или $-\text{N}_3$. Это частично связано с их более низкой плотностью и сильноотрицательным кислородным балансом, что снижает теплоту взрыва. Значения $\sqrt{2E_g}$ ведут себя аналогично детонационным характеристикам, следовательно, на метательную способность опять же существенно влияет плотность ρ_0 . В [35] показано, что с увеличением ρ_0 продукты детонации приобретают большую внутреннюю и кинетическую энергию в результате высокого энерговыделения на фронте детонации. Этот факт вместе с положительным кислородным балансом благоприятствует образованию молекул CO_2 , что в свою очередь увеличивает метательную способность. Приве-

денные в таблице данные подтверждают изложенные выше результаты, и всё вместе это доказывает, что метательная способность сильно зависит от ρ_0 и кислородного баланса. Кроме того, из таблицы видно, что значение $\sqrt{2E_g}$ для молекулы соединения В5 сравнимо с величиной, полученной для НМХ (например, 2.93 и 2.92 км/с соответственно). Напомним, что соединение В5 является возможным кандидатом для использования в высокоэффективных осколочных боеголовках.

Критическое давление инициирования

Чувствительность к внешним воздействиям (ударные волны, удар, трение и т. п.) является сложной характеристикой ВЭПМ, зависящей как от химического, так и от физического состояния материала. Ударные волны могут использоваться в эксперименте для определения критического давления инициирования данного ВЭПМ с применением мелко-масштабного и крупномасштабного гар-теста, который дает только относительное значение чувствительности к удару, так как критическое ударное давление изменяется при изменении размеров и геометрии тестируемого образца, а также других физических свойств [30]. На рис. 2 представлены результаты расчета критического давления инициирования по уравнению (7), а также два экспериментальных значения для умеренно чувствительного НМХ и низкочувствительного TNT (2,4,6-тринитротолуол). Видно, что вещества ряда А

менее чувствительны к удару, чем соединения ряда В. Для обоих рядов соединения с самой низкой чувствительностью (с самыми высокими значениями p_{cr}) получены для заместителей —Н и —NH₂, а также для триазольных групп. В целом чувствительность гетероциклических замещенных структур близка к чувствительности TNT. С другой стороны, заметно увеличение чувствительности к удару у соединений А5, В3, В4, В5 и В6, которые характеризуются самыми высокими значениями $\rho_0 Q_{max}$ (2 874, 2 831, 2 832, 3 083, 3 030 кал/см³ соответственно) и потому отнесены к чувствительным ВЭПМ (их чувствительность близка к таковой для НМХ).

ВЫВОДЫ

1. Сочетание *s*-триазинового кольца со структурой аминифуразана и аминифуроксана приводит к образованию перспективных энергетических материалов с высокой кристаллической плотностью ($\rho_0 \geq 1.76$ г/см³) и положительной теплотой образования ($\Delta H_f^0 \geq +817$ кДж/кг).

2. Группы —N₃ и —C(NO₂)₃ являются важными дензофорами (заместителями, увеличивающими плотность), что сильно влияет на скорость и давление детонации. В целом группы, богатые кислородом, такие как —NO₂ и —ONO₂, увеличивают энергию детонации соединения, потому что благоприятствуют большему положительному значению кислородного баланса, что приводит к более высоким детонационным и ускорительным характеристикам.

3. Вычисления показывают, что соединения с замещенными гетероциклами, содержащими большое число атомов азота, обладают более высокой теплотой образования, но их функциональные характеристики умеренные. Между тем значения их критической энергии инициирования аналогичны таковым для TNT, что делает эти соединения перспективными энергетическими материалами с точки зрения безопасности.

Автор благодарит лабораторию синтеза биомолекул Института молекулярной химии и химии материалов Университета Южного Парижа за разрешение опубликовать статью, а также преподавателя английского языка этого университета А. Бернар-Гайрар за корректурование рукописи.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Agrawal J. P.** High Energy Materials: Propellants, Explosives and Pyrotechnics. — Wiley-VCH, Germany, 2010.
2. **Klapötke T. M.** Chemistry of High Energy Materials. — Berlin; N. Y.: De Gruyter, 2012.
3. **Gunasekaran A., Jayachandran T., Boyer J. H., Trudell M. L.** A convenient synthesis of diaminoglyoxime and diaminofurazan: useful precursors for the synthesis of high density energetic materials // *J. Heterocycl. Chem.* — 1995. — V. 32, N 4. — P. 1405–1407.
4. **Klapötke T. M., Stierstorfer J.** Synthesis and characterization of the energetic compounds aminoguanidinium-, triaminoguanidinium-, and azidoformamidinium perchlorate // *Cent. Eur. J. Energ. Mater.* — 2008. — V. 5, N 1. — P. 13–30.
5. **Талавар М. Б., Сивабалан Р., Астана С. Н., Сингх Х.** Новые сверхмощные энергетические материалы // *Физика горения и взрыва.* — 2005. — Т. 41, № 3. — С. 29–45.
6. **Stepanov A. I., Dashko D. V., Astrat'ev A. A.** 3,4-Bis(4'-nitrofurazan-3'-yl)furoxane: a melt cast powerful explosive and a valuable building block in 1,2,5-oxadiazole chemistry // *Cent. Eur. J. Energ. Mater.* — 2012. — V. 9, N 4. — P. 329–342.
7. **Fischer N., Klapötke T. M., Stierstorfer J., Wiedemann C.** 1-Nitratoethyl-5-nitriminotetrazole derivatives-shaping future high explosive // *Polyhedron.* — 2011. — V. 30, N 14. — P. 2374–2386.
8. **Gao H., Shreeve J. M.** Azole-based energetic salts // *Chem. Rev.* — 2011. — V. 111, N 11. — P. 7377–7436.
9. **Huynh M. H. V., Hiskey M. A., Hartline E. L., Montoya D. P., Gilardi R.** Polyazido high-nitrogen compounds: hydrazo and azo-1,3,5-triazine // *Angew. Chem. Intern. Ed.* — 2004. — V. 43, N 37. — P. 4924–4928.
10. **Wang F., Du H. C., Zhang J. Y., Gong X. D.** Comparative theoretical studies of energetic azo *s*-triazines // *J. Phys. Chem. A.* — 2011. — V. 115, N 42. — P. 11852–11860.
11. **Chen L., Qiu W., Tang J., Wang Z. F., He S. Y.** Synthesis and bioactivity of novel nitric oxide-releasing ursolic acid derivatives // *Chin. Chem. Lett.* — 2011. — V. 22, N 4. — P. 413–416.
12. **Galli U., Lazzarato L., Bertinaria M., Sorba G., Gasco A., Parapini S., Taramelli D.** Synthesis and antimalarial activities of some furoxan sulfones and related furazans // *Eur. J. Med. Chem.* — 2005. — V. 40, N 12. — P. 1335–1340.
13. **Klapötke T. M., Piercey D. G., Stierstorfer J.** The facile synthesis and energetic properties of an energetic furoxan lacking traditional «explosophore» moieties: (*E,E*)-3,4-bis(oximomethyl)furoxan (DPX1) // *Propellants,*

- Explos., Pyrotech. — 2011. — V. 36, N 2. — P. 160–167.
14. **Пепекин В. И., Корсунский Б. Л., Матюшин Ю. Н.** Взрывчатые свойства фуросанов // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 1. — С. 123–128.
 15. **Солодяк Г. Д., Болдырев М. Д., Гидаспов Б. В., Николаев В. Д.** Окисление 3,4-диаминофуразана некоторыми перокисными реагентами // Журн. орган. химии. — 1981. — Т. 17, № 4. — С. 861–865.
 16. **Talawar M. B., Sivabalan R., Senthil Kumar N., Prabhu G., Asthana S. N.** Synthesis, characterization and thermal studies on furazan- and tetrazine-based high energy materials // J. Hazard. Mater. — 2004. — V. 113, N 1-3. — P. 11–25.
 17. **Francois G. E., Harry H. H., Hartline L. E., Hooks E. D., Johnson E. C., Morris S. J., Novak M. A., Ramos J. K., Sanders E. V., Scovel A. C., Lorenz T., Wright M., Botcher T., Marx E., Gibson K.** Summary of booster development and qualification report // LANL Report LA-UR-12-22394. — 2012.
 18. **Keshavarz M. H.** Novel method for predicting densities of polynitro arene and polynitro heteroarene explosives in order to evaluate their detonation performance // J. Hazard. Mater. — 2009. — V. 165, N 1-3. — P. 579–588.
 19. **Keshavarz M. H.** Prediction of the condensed phase heat of formation of energetic compounds // J. Hazard. Mater. — 2011. — V. 190, N 1-3. — P. 330–344.
 20. **Tarver C. M.** Density estimation for explosives and related compounds using the group additivity approach // J. Chem. Eng. Data. — 1979. — V. 24, N 2. — P. 136–145.
 21. **Ammon H. L.** Updated atom/functional group and atom code volume additivity parameters for the calculation of crystal densities of single molecules, organic salts, and multi-fragment materials containing, H, C, B, N, O, F, S, P, Cl, Br and I // Propellants, Explos., Pyrotech. — 2008. — V. 33, N 2. — P. 92–102.
 22. **Salmon A., Dalmazzone D.** Prediction of enthalpy of formation in the solid state (at 298.15 K) using second-order group contributions-part 2: carbon — hydrogen, carbon — hydrogen — oxygen, and carbon — hydrogen — nitrogen — oxygen compounds // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 2007. — V. 36, N 1. — P. 19–57.
 23. **Rice B. M., Pai S. V., Hare J.** Predicting heats of formation of energetic materials using quantum mechanical calculations // Combust. Flame. — 1999. — V. 118, N 3. — P. 445–458.
 24. **Rice B. M., Hare J.** Predicting heats of detonation using quantum mechanical calculations // Thermochim. Acta. — 2002. — V. 384, N 1-2. — P. 377–391.
 25. **Kamlet M. J., Jacobs S. J.** Chemistry of detonation. I. A simple method for calculating detonation properties of C, H, N, O explosives // J. Chem. Phys. — 1968. — V. 48, N 1. — P. 23–35.
 26. **Gurney R. W.** The initial velocities of fragments from bombs, shell, grenades // BRL Report N 405. — 1943.
 27. **Danel J. F., Kazandjian L.** A few remarks about the gurney energy of condensed explosives // Propellants, Explos., Pyrotech. — 2004. — V. 29, N 5. — P. 314–316.
 28. **Hardesty D. R., Kennedy J. E.** Thermochemical estimation of explosive energy output // Combust. Flame. — 1977. — V. 28. — P. 45–59.
 29. **Пепекин В. И., Корсунский Б. Л., Денисаев А. А.** Возбуждение взрыва твердых взрывчатых веществ при механическом воздействии // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 5. — С. 101–105.
 30. **Dobratz B. M.** Properties of chemical explosives and explosive simulants // LLNL Report UCRL-51319 (Rev. 1). — 1974.
 31. **NIST Chemistry WebBook / Linstrom P. J., Mallard W. G (Eds).** — NIST standard Reference Database Number 69, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. — <http://webbook.nist.gov>.
 32. **Zhang C.** Computational investigation of the detonation properties of furazans and furoxans // J. Mol. Struct.: THEOCHEM. — 2006. — V. 765, N 1-3. — P. 77–83.
 33. **Politzer P., Murray J. S.** Some perspectives on estimating detonation properties of C, H, N, O compounds // Cent. Eur. J. Energ. Mater. — 2011. — V. 8, N 3. — P. 209–220.
 34. **Fuchs B. E.** Picatinny arsenal cylinder expansion test and a mathematical examination of the expanding cylinder // ARAED Report TR-95014. — 1995.
 35. **Пепекин В. И., Губин С. А.** Метательная способность органических взрывчатых веществ и их пределы по мощности и скорости детонации // Физика горения и взрыва. — 2007. — Т. 43, № 1. — С. 99–111.

Поступила в редакцию 10/VII 2013 г.