

УДК 662.2: 547.414.5: 662.215.121

ОЦЕНКА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ДЕТОНАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ НИТРОГИДРАЗИНА

А. М. Астахов

Сибирский государственный университет науки и технологий им. М. Ф. Решетнева
660037 Красноярск, alexastachov@mail.ru

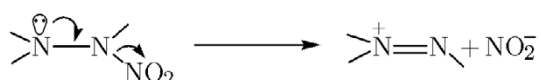
Проведена оценка энтальпии образования, плотности, энергетических и детонационных параметров гипотетического цвиттер-ионного нитрогидразина $\text{H}_3\text{N}^+\text{N}^-\text{NO}_2$. Полученные вероятные значения энтальпии образования (-20 кДж/моль), плотности (1.90 г/см³) и скорости детонации ($9.4 \div 9.8$ км/с) нитрогидразина позволяют рассматривать его как перспективное энергоемкое соединение, оправдывающее усилия по поиску путей его синтеза.

Ключевые слова: нитрогидразин, цвиттер-ион, энтальпия образования, детонационные параметры.

DOI 10.15372/FGV20230214

ВВЕДЕНИЕ

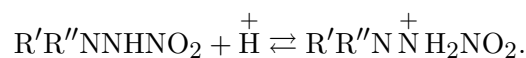
Нитрогидразины давно привлекают внимание исследователей, попытки их синтеза предпринимались еще более ста лет назад. Интенсивные поиски путей получения нитрогидразинов проводились в свое время в Институте органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН [1–4]. Анализ многочисленных попыток получения нитрогидразинов дан в [3]. В работах [2, 3] описано получение ряда замещенных производных нитрогидразина, в основном с электроноакцепторными заместителями, поскольку авторы считают, что распад нитрогидразинов «обусловлен нуклеофильностью атома азота, связанного с N-нитрофрагментом:



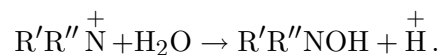
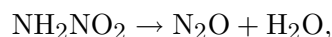
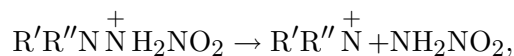
Наличие электроноакцепторных заместителей у атома азота, связанного с N-нитрофрагментом, приводит к делокализации неподеленной электронной пары и стабилизации нитрогидразина». В [3] также описаны стабильные (с температурой плавления $T_{\text{пл}} = 135 \div 168$ °C) соли $\text{K}^+[\text{R}'\text{R}''\text{NNNO}_2]^-$, где R' и R'' — электроноакцепторные заместители. Сами свободные нитрогидразины получить из них не удалось, поскольку «соли довольно быстро разлагаются в протонных растворителях».

Однако можно предположить и другой путь распада нитрогидразинов, свойственный

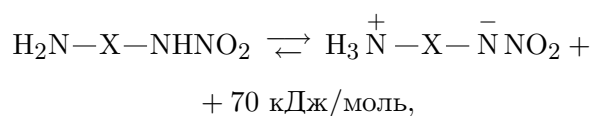
первичным нитраминам, через первичный протолиз (либо автопротолиз) по атому азота первичной аминогруппы:



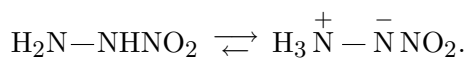
Обратимая реакция протонирования будет проходить и по другим атомам с повышенной электронной плотностью (атомы кислорода нитрогруппы, вторичная аминогруппа), но именно при протонировании по первичной аминогруппе возможно протекание реакции дальнейшего разложения по пути, свойственному первичным нитраминам [5, 6]:



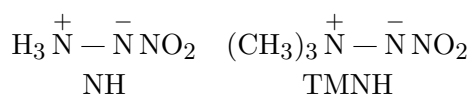
Ранее было показано, что значительно увеличить термическую стабильность первичных нитраминах можно путем создания цвиттер-ионной структуры [6, 7]:



где X — какой-либо органический молекулярный фрагмент. Простейшим подобным соединением как раз и является нитрогидразин (NH):



Согласно *ab initio* расчетам прочность связей N—N в нитрогидразине [8] и в 1,1-диметил-2-нитрогидразине [9] (в первичной нитраминной форме) выше, чем в гидразине. Закономерно ожидать, что при переходе к цвиттер-ионному строению стабильность соединения будет еще больше.



Необходимо отметить, что цвиттер-ионный 1,1,1-триметил-2-нитрогидразин (TMNH, триметиламмонийнитрамидат) получен более 50 лет назад [10] и является довольно стабильным соединением как термически, так и химически ($T_{\text{пл}} = 212 \div 214$ °C; выдерживает длительный нагрев при 200 °C, не разлагается в концентрированной серной кислоте и при длительном кипячении в растворе щелочи). Хорошо известны и другие цвиттер-ионные замещенные производные нитрогидразина [1]. Цвиттер-ионное строение некоторых соединений однозначно установлено методом рентгеноструктурного анализа [11–13].

Можно предположить, что простейший незамещенный нитрогидразин также будет стабилен именно в цвиттер-ионной форме. Такой вариант строения видится более предпочтительным в плане его химической и термической стабильности и дает надежду на возможность синтеза этого соединения в будущем.

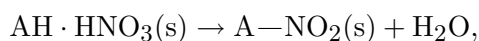
Цвиттер-ионное строение существенным образом сказывается на плотности и энтальпии образования вещества, а следовательно, и на его детонационных параметрах. В настоящей работе с помощью известных методов дана оценка плотности и энтальпии образования цвиттер-ионного нитрогидразина, проведены расчеты детонационных параметров.

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ

В [8] вычислены энтальпии образования первичной нитраминной формы нитрогидразина (H_2NNHNO_2) в газовой фазе с использованием квантово-химических методов G2, G3, CBS-QB3 и CBS-APNO. Полученные значения находятся в диапазоне $117.1 \div 131.5$ кДж/моль. Для нахождения энтальпии образования в твердом

состоянии в [8] была использована энтальпия сублимации, вычисленная по эмпирической зависимости из работы [14] и составившая 63.2 кДж/моль. Таким образом, расчетный диапазон энтальпии образования в твердой фазе нитрогидразина (в первичной нитраминной форме) составляет $52 \div 68$ кДж/моль. Следует отметить, что даже если найденные энтальпии образования в газовой фазе достаточно точны и не вызывают возражений, то использованный эмпирический метод нахождения энтальпии сублимации имеет невысокую точность, его среднеквадратичная погрешность согласно [8, 14] составляет 37.7 кДж/моль. Таким образом, для энтальпии образования нитрогидразина (в первичной нитраминной форме) в твердой фазе можно ориентироваться на примерное значение 60 ± 40 кДж/моль.

В настоящей работе оценка энтальпии образования нитрогидразина сделана исходя из термохимических соображений. Рассмотрена общая формальная реакция образования N-нитросоединений из соответствующих нитратов (солей аминов и азотной кислоты):



где $\text{AH} = \text{NH}_3$, CH_3NH_2 , $\text{H}_2\text{NC}(=\text{O})\text{NH}_2$, $\text{H}_2\text{NC}(=\text{NH})\text{NH}_2$, $\text{H}_2\text{NC}(=\text{NH})\text{NHNH}_2$, $\text{H}_2\text{NC}(=\text{NH})\text{N}_3$. Эта реакция в отдельных случаях вполне реальная (хорошо известные методы получения нитромочевина из нитрата мочевины и нитрогуанидина из нитрата гуанидина). Для других случаев в силу ряда причин она лишь гипотетическая, а соответствующие N-нитросоединения получают другими способами. Но для нашей задачи это значения не имеет.

Среднее значение разницы между энтальпиями образования в твердом состоянии вышеприведенных ониевых нитратов и соответствующих им N-нитросоединений составляет 292.4 ± 9.2 кДж/моль. Сравнительно небольшая погрешность (порядка 3 %) обусловлена не только различиями в природе самих соединений, а прежде всего невысокой точностью самих исходных данных по энтальпии образования. Так, например, для нитрата мочевины, казалось бы давно известного и хорошо изученного соединения, в базе термодинамических данных ICT [15] приведены четыре значения, часть из которых заметно различаются между собой.

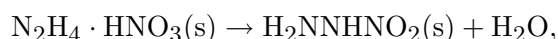
Если от полученного значения разницы энтальпий отнять теплоту образования воды (285.8 кДж/моль), то в остатке будет средний тепловой эффект реакции образования N-нитросоединения (6.6 кДж/моль):

$$\Delta H_{\text{реакц}}^0 = \Delta H_f^0(\text{A}-\text{NO}_2) + \Delta H_f^0(\text{H}_2\text{O}) - \Delta H_f^0(\text{АН} \cdot \text{HNO}_3).$$

Отсюда можно записать выражение для расчета энтальпии образования N-нитросоединения:

$$\Delta H_f^0(\text{A}-\text{NO}_2) = \Delta H_f^0(\text{АН} \cdot \text{HNO}_3) - \Delta H_f^0(\text{H}_2\text{O}) + \Delta H_{\text{реакц}}^0.$$

Применяя аналогичный подход для реакции



при известной энтальпии образования нитрата гидразина (–246.4 кДж/моль [15]) получаем значение энтальпии образования нитрогидразина (в первичной нитраминной форме) 46 кДж/моль, или округленное примерное значение 50 ± 10 кДж/моль. Нельзя не отметить, что это значение неплохо согласуется с выше-рассмотренными данными работы [8].

Интересно, что расчет совершенно иным способом, отличным от рассмотренных выше, по корреляционному уравнению, связывающему теплоту образования твердых соединений с составом и плотностью (уравнение (5) в работе [16]), также дает практически аналогичное значение 51.1 кДж/моль.

Цвиттер-ионная форма нитрогидразина будет иметь меньшую энтальпию образования, чем первичная нитраминная форма, как за счет выделения так называемой теплоты нейтрализации при взаимодействии кислотного фрагмента с основанием (перенос протона на аминогруппу), так и за счет возрастания энергии кристаллической решетки в силу большего межмолекулярного взаимодействия в ионном соединении. Сделанная нами ранее оценка этого эффекта для цвиттер-ионных аминонитраминов составляет ≈ 70 кДж/моль [6, 7].

Таким образом, оценочное значение энтальпии образования цвиттер-ионного нитрогидразина составляет –20 кДж/моль.

РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ МОНОКРИСТАЛЛА

Несмотря на то, что для оценки плотности гипотетических соединений разработано большое количество методов [16–27], надежная оценка плотности нитрогидразина является непростой задачей.

Использовать квантово-химические методы для оптимизации геометрии цвиттер-ионных нитросоединений на сегодняшний день не удается, что сразу же исключает возможность применения этих методов как для оценки молекулярного объема, так и для поиска последующей оптимальной упаковки молекул в кристалле.

Для оценки способности известных простых аддитивных схем расчета плотности [16–27] прогнозировать плотность цвиттер-ионных структур были использованы тестовые соединения, имеющие сходные с нитрогидразином молекулярные фрагменты, для которых известны надежные экспериментальные значения плотности из данных рентгеноструктурного анализа. В качестве таких соединений использованы цвиттер-ионные 1-амино-2-нитраминоэтан (АНЕ) и уже упомянутый ранее 1,1,1-триметил-2-нитрогидразин (ТМНН).

Ряд рассматриваемых методов разрабатывался для расчета прежде всего молекулярных, а не ионных энергоемких соединений, поэтому они не имеют необходимых для расчета ионов инкрементов (например, H_3N^+). В этом случае использовались соответствующие инкременты для незаряженных атомных или групповых фрагментов.

Полученные результаты представлены в табл. 1. Из таблицы видно, что по значениям плотности, получаемым для нитрогидразина, методы можно условно разбить на три группы: показывающие относительно низкие значения 1.70 г/см³ (методы Holden [19], Ye и Shreeve [27]), средние $1.82 \div 1.86$ г/см³ (методы Cady [17], Ammon [26], Котомина [21]) и высокие $1.91 \div 1.94$ г/см³ (корректированные методы Cady и Stine [18], методы Кузьмина [24, 25] и Смирнова [16]).

Среди рассмотренных методов наилучшие результаты для тестовых соединений АНЕ и ТМНН показал кристаллографический метод Кузьмина [24, 25]. Поэтому можно ожидать, что и для нитрогидразина расчет этим методом будет наиболее точным. Все рассмотренные методы, за исключением метода Кузьмина, в той или иной степени занижают плотность

Таблица 1

Экспериментальные и вычисленные различными методами [16–27] значения плотности
нитрогидразина и тестовых соединений

Соединение	$\rho_{\text{эксп}}, \text{г/см}^3$	$\rho_{\text{расч}}, \text{г/см}^3$									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\text{H}_3\text{N}^+\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NO}_2^-$ ANE	1.56	1.47	1.50	1.37	1.48 1.48	1.47	1.48 1.67	1.57	1.52	1.35 1.42	1.42
$(\text{CH}_3)_3\text{NNNO}_2^+$ TMNH	1.38	1.33	1.34	1.31	1.36 1.35	1.35	1.33	1.39	1.35	1.36 1.31	1.30
$\text{H}_3\text{NNNO}_2^+$ NH	—	1.85	1.94	1.70	1.91 1.92	1.94	1.86 2.31	1.91	1.91	1.82 1.86	1.70

Методы расчета: 1 — Cady [17]; 2 — скорректированный метод Cady [18]; 3 — Holden [19]; 4 — Stine (в линейном и нелинейном приближении) [20]; 5 — скорректированный метод Stine [18]; 6 — Котомин [21–23]; 7 — Кузьмин [24, 25]; 8 — Смирнов [16]; 9 — Ammon (в линейном и нелинейном приближении) [26]; 10 — Ye и Shreeve [27].

тестовых соединений, что свидетельствует о недооценке в них межмолекулярных взаимодействий в цвиттер-ионных структурах. Метод Кузьмина, напротив, несколько завышает (на 0.01 г/см^3 или на $0.6 \div 0.7 \%$) плотность тестовых соединений. Если предположить, что и для нитрогидразина ситуация будет аналогичной, то его реальная плотность все равно останется достаточно высокой, порядка 1.90 г/см^3 . Примечательно, что методы Stine [20] и Смирнова [16], несмотря на худшую погрешность в описании тестовых соединений по сравнению с методом Кузьмина, для нитрогидразина показывают аналогичную плотность. Наиболее низкие значения плотности нитрогидразина получены методами Holden [19] и Ye, Shreeve [27], а еще более высокие значения, чем в методах Кузьмина, Stein и Смирнова, дают скорректированные методы Cady и Stine [18]. Методы Cady [17] и Котомина [21] недооценивают плотность обоих тестовых соединений и показывают одинаковые, но меньшие значения плотности нитрогидразина. Метод Котомина изначально имеет ионные инкременты и позволяет рассчитывать ионные структуры, но по тестовым соединениям его результаты не очень хороши. В последних публикациях [22, 23] пересмотрены значения некоторых инкрементов, в частности H_3N^+ —. Однако это только ухудшило результат для тестового соединения ANE: вместо заниженного значения плотности получено сильно завышенное. Для нитрогидразина при новом значении объ-

ема инкремента плотность оказалась слишком высокой, 2.31 г/см^3 , что, очевидно, нереально.

Таким образом, наиболее надежные результаты показал кристаллографический метод Кузьмина [24, 25]. Рассчитанное этим методом значение плотности 1.90 г/см^3 (с учетом его возможного незначительного завышения) будем считать базовым для дальнейшего расчета детонационных параметров.

РАСЧЕТ ДЕТОНАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ

Определившись со значениями энтальпии образования и плотности, можно приступить к расчету детонационных параметров. Был использован термодинамический метод с уравнением состояния ВКВ при различной его параметризации [28–30], а также наиболее широко применяемые корреляционные экспресс-методы [16, 31–37]. Результаты представлены в табл. 2.

Расчет выполнялся не только для плотности 1.90 г/см^3 (до получения экспериментального подтверждения мы все же не знаем, насколько это значение достоверно), но и для плотностей, меньших и больших на 0.10 г/см^3 . Можно полагать, что экспериментальное значение в любом случае попадет в диапазон $1.80 \div 2.00 \text{ г/см}^3$. Кроме этого, выбор не единичного значения, а диапазона позволяет увидеть зависимость детонационных параметров от плотности. Зависимость скорости детонации нитрогидразина от плотности заряда показана на рисунке.

продуктов взрыва взято из идеального уравнения взрывчатого превращения. При этом для нитрата гидразина значение скорости детонации оказалось несколько заниженным (-1.3%) по сравнению с экспериментальным. Во втором случае количество молей продуктов взрыва рассчитывается по интерполяционной формуле и это позволяет получить меньшую погрешность вычисления скорости детонации (для нитрата гидразина соответствие с экспериментальным значением). Однако при этом утрачивается физический смысл самого числа молей продуктов взрыва! Для нитрата гидразина и нитрогидразина число молей продуктов взрыва, определенное по интерполяционной формуле, заметно больше, чем по идеализированному уравнению взрывчатого превращения, чего быть не может. Первый вариант расчета показывает меньшее на $2 \div 3.5\%$ значение скорости детонации, чем в термодинамическом методе, а второй, наоборот, большее на $4 \div 6\%$.

Метод Айзенштадта [34], который согласно анализу [35] суть один из наиболее эффективных экспресс-методов, дает значение скорости детонации, близкое к значениям, полученным термодинамическим методом.

Метод Смирнова [16, 36] несколько занижает значение ($1 \div 2.5\%$) скорости детонации по сравнению с термодинамическим методом. По сравнению с другими рассмотренными корреляционными методами эти расхождения самые минимальные.

Аддитивный метод Котомина [22, 23] (не требующий знания теплоты образования взрывчатого вещества) показал наибольшее среди рассмотренных методов значение скорости детонации, близкое к найденному методом Пепекина [33] во втором варианте расчета.

Значение скорости детонации, превышающее 10 км/с , получено также методом Stine [37].

Таким образом, диапазон рассчитанных значений скорости детонации варьируется от 8.9 до 10.2 км/с . Какое значение верное и какой метод расчета наилучший? Без наличия экспериментальных данных однозначно ответить на этот вопрос невозможно. Субъективно можно ориентироваться на средние значения результатов термодинамического расчета, которые лежат в данном диапазоне, а также на согласующиеся с ними результаты корреляционных методов Айзенштадта, Смирнова и Пепекина (по первому варианту расчета). Метод Rothstein, очевидно, имеет низкую точность,

а три метода, показывающие значения скорости детонации $10 \div 10.2\text{ км/с}$, по мнению автора, дают слишком оптимистичные результаты. В итоге диапазон скоростей детонации $9.4 \div 9.8\text{ км/с}$ видится наиболее реалистичным для нитрогидразина. Но даже относительно низкая оценка 9.0 км/с , полученная методом Kamlet, тоже вполне неплохое значение для скорости детонации. В целом причина большого разброса результатов корреляционных методов понятна. Все они построены в рамках интерполяционных статистических моделей, и на экстраполяционных задачах (каковым является расчет взрывчатого вещества экстремального состава) их точность заранее не предсказуема.

Следует также отметить влияние погрешности расчета энтальпии образования на значения скорости детонации. При ошибке в величине энтальпии образования нитрогидразина в пределах 10 кДж/моль возможная вариация в теплоте взрывчатого превращения будет составлять $\approx 3\%$. Поскольку скорость детонации пропорциональна квадратному корню от теплоты взрыва, то это может дать ошибку в расчете скорости детонации $\approx 1.7\%$ или $0.15 \div 0.17\text{ км/с}$ для рассматриваемых значений скорости детонации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные расчетные значения энтальпии образования, плотности и детонационных параметров нитрогидразина позволяют рассматривать его как перспективное энергоемкое соединение, оправдывающее усилия по поиску путей его синтеза. Это взрывчатое вещество при относительно невысокой теплоте взрывчатого превращения (даже ниже, чем у тетрила) должно иметь высокие детонационные параметры, достигаемые за счет высокой плотности и большого газообразования. Положительный кислородный баланс делает нитрогидразин перспективным окислителем во взрывчатых и метательных составах. В последнем случае, с учетом невысокой теплоты взрывчатого превращения, наиболее интересным видится возможность его применения как компонента «холодных» порохов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Tartakovskii V. A. The design of stable high nitrogen systems // MRS Online Proc.

- Library. — 1995. — V. 418. — P. 15–24. — DOI: 10.1557/PROC-418-15.
2. **Tartakovskii V. A., Ioffe S. L., Kalinin A. V., Apasov E. T., Strelenko Yu. A.** N-nitrohydrazines and their salts // *Mendeleev Commun.* — 1991. — V. 1, N 3. — P. 95–97. — DOI: 10.1070/MC1991v001n03ABEH000058.
 3. **Калинин А. В., Апасов Е. Т., Иоффе С. Л., Тартаковский В. А.** N-нитрогидразины и их соли // *Изв. АН СССР. Сер. хим.* — 1991. — Т. 40, № 5. — С. 1108–1114.
 4. **Калинин А. В., Стреленко Ю. А., Апасов Е. Т., Иоффе С. Л.** Исследование N-нитрогидразинов методами ЯМР // *Изв. АН СССР. Сер. хим.* — 1991. — Т. 40, № 9. — С. 2024–2031.
 5. **Stepanov R. S., Astachov A. M., Kruglyakova L. A.** Influence of the primary nitramines structure on their thermostability // *Proc. 29th Int. Annu. Conf. ICT. Energetic Materials — Production, Processing and Characterization.* — 1998. — P. 128/1–7.
 6. **Астахов А. М.** Термическое разложение первичных нитраминов в конденсированной фазе: дис. ... канд. хим. наук / СибГТУ. — Красноярск, 1999.
 7. **Astachov A. M., Stepanov R. S., Kruglyakova L. A., Kekin Y. V.** Zwitterionic amine-nitramine as a new class of energetic materials // *Proc. 31st Int. Annu. Conf. ICT. Energetic Materials — Analysis, Diagnostics and Testing.* — 2000. — P. 13/1–10.
 8. **Ball D. W.** Nitrohydrazines as potential high energy materials: High level calculation // *J. Mol. Struct.: THEOCHEM.* — 2006. — V. 773, N 1–3. — P. 1–7. — DOI: 10.1016/j.theochem.2006.06.038.
 9. **Politzer P., Sukumar N., Jayasuriya K., Ranganathan S.** Computational evaluation and comparison of some nitramine properties // *J. Am. Chem. Soc.* — 1988. — V. 110, N 11. — P. 3425–3430. — DOI: 10.1021/ja00219a014.
 10. **Epszajn J., Katritzky A. R.** Amine-nitroimides: A new functional group // *Tetrahedron Lett.* — 1969. — V. 10, N 54. — P. 4739–4742. — DOI: 10.1016/S0040-4039(01)88797-9.
 11. **Cameron A. F., Hair N. J., Morris D. G.** Structural investigations of ylides. Pt I. Crystal and molecular structures of trimethylammonio-benzamidate and trimethylammonionitramidate: two stabilised nitrogen-nitrogen ylides // *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2.* — 1972. — N 9. — P. 1071–1076. — DOI: 10.1039/P29720001071.
 12. **Smith G. T., Mallinson P. R., Frampton C. S., Howard J. A. K.** Experimental investigation of the bonding characteristics and charge distribution of a nitrogen ylide by high resolution X-ray diffraction // *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2.* — 1997. — N 7. — P. 1329–1334. — DOI: 10.1039/A608234C.
 13. **Vasiliev A. D., Astachov A. M., Stepanov R. S., Kirik S. D.** 4-Nitramino-1,2,4-triazole // *Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun.* — 1999. — V. 55. — P. 830–832. — DOI: 10.1107/S0108270199002243.
 14. **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. — DOI: 10.1016/S0010-2180(99)00008-5.
 15. **ICT Database of thermochemical values.** — Version 7, 2004.
 16. **Смирнов А. С., Смирнов С. П., Пивина Т. С., Лемперт Д. Б., Маслова Л. К.** Комплексная оценка физико-химических свойств новых энергоёмких материалов // *Изв. АН. Сер. хим.* — 2016. — Т. 65, № 10. — С. 2315–2332.
 17. **Cady H. H.** Estimation of the density of organic explosives from their structural formulas // *Rep. LA-7760-MS UC-45.* — Los Alamos: LANL, 1979.
 18. **Piacenza G., Jacob G., Graindorge H., Blaive B., Gallo R.** Molecular mechanics versus volume additivity methods in prediction of energetic materials density. Comparative analysis and improvements for solids and liquids // *28th Int. Annu. Conf. ICT. Energetic Materials — Combustion and Detonation.* — 1997. — P. 123/1–14.
 19. **Cichra D. A., Holden J. R., Dickinson C.** Estimation of «normal» densities of explosive compounds from empirical atomic volumes // *Rep. NSWC-TR-79-273.* — Silver Springs: NSWC, 1980.
 20. **Stine J. R.** Prediction of crystal densities of organic explosives by group additivity // *Rep. LA-8920 UC-45.* — Los Alamos: LANL, 1981.
 21. **Котомин А. А., Козлов А. С.** Метод расчета плотности органических соединений по вкладам фрагментов молекул // *Журн. прикл. химии.* — 2006. — Т. 79, № 6. — С. 966–977.
 22. **Котомин А., Илюшин М., Душенюк С.** Методы расчета характеристик энергетических веществ различного химического строения. — Mauritius: LAP Lambert Academ. Publ., 2020.
 23. **Котомин А. А., Душенюк С. А., Козлов А. С.** Эмпирические методы расчета взрывчатых веществ и композиций. — СПб.: Лань, 2021.
 24. **Порай-Кошиц М. А., Кузьмин В. С.** О связи между молекулярной структурой и плотностью органических веществ // *Докл. АН СССР.* — 1991. — Т. 317, № 5. — С. 1148–1149.
 25. **Кузьмин В. С., Кацер С. Б.** Расчет ван-дер-ваальсовых объемов органических молекул // *Изв. АН. Сер. хим.* — 1992. — Т. 41, № 4. — С. 922–931.

26. **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 // *Propell., Explos., Pyrotech.* — 2008. — V. 33, N 2. — P. 92–102. — DOI: 10.1002/prop.200700054.
27. **Ye Ch.-F., Shreeve J. M.** New atom/group volume additivity method to compensate for the impact of strong hydrogen bonding on densities of energetic materials // *J. Chem. Eng. Data.* — 2008. — V. 53, N 2. — P. 520–524. — DOI: 10.1021/je700617n.
28. **Mader C. L.** Numerical Modeling of Explosives and Propellants. — 3d ed. — Boca Raton: CRC Press, 2008.
29. **Губин С. А., Одинцов В. В., Пепекин В. И.** Термодинамический расчет идеальной и неидеальной детонации // *Физика горения и взрыва.* — 1987. — Т. 23, № 4. — С. 75–84.
30. **Fried L. E., Souers P. C.** BKWC: An empirical BKW parametrization based on cylinder test data // *Propell., Explos., Pyrotech.* — 1996. — V. 21, N 4. — P. 215–223. — DOI: 10.1002/prop.19960210411.
31. **Rothstein L. R., Petersen R.** Predicting high explosive detonation velocities from their composition and structure // *Propell., Explos., Pyrotech.* — 1979. — V. 4, N 3. — P. 56–60. — DOI: 10.1002/prop.19790040305.
32. **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. — DOI: 10.1063/1.1667908.
33. **Пепекин В. И., Лебедев Ю. А.** Критерий оценки параметров детонации ВВ // *Докл. АН СССР.* — 1977. — Т. 234, № 6. — С. 1391–1394.
34. **Айзенштадт И. Н.** Метод расчета идеальной скорости детонации конденсированных ВВ // *Физика горения и взрыва.* — 1976. — Т. 12, № 5. — С. 754–758.
35. **Трубников А. А., Козырев Н. В.** Анализ экспресс-методов расчета скорости детонации C–H–N–O конденсированных взрывчатых веществ // *Ползуновский вестн.* — 2009. — № 3. — С. 121–125.
36. **Смирнов А. С., Смирнов С. П.** Прогнозирование характеристик взрывчатых веществ // *Журн. прикл. химии.* — 2009. — Т. 82, № 10. — С. 1655–1663.
37. **Stine J. R.** On predicting properties of explosives — detonation velocity // *J. Energ. Mater.* — 1990. — V. 8, N 1. — P. 41–73. — DOI: 10.1080/07370659008017245.

Поступила в редакцию 01.04.2022.

После доработки 23.05.2022.

Принята к публикации 16.07.2022.