

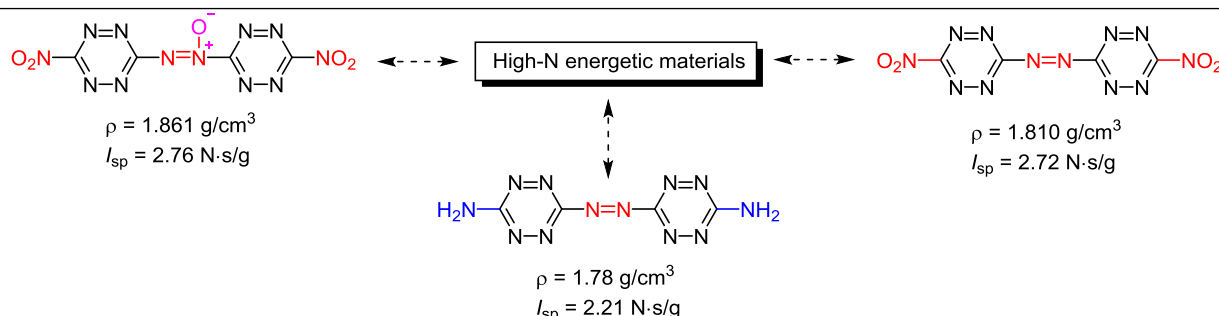
## Оценка влияния *N*-оксидной группы в новом высокоэффективном энергоемком производном тетразина на его физико-химические и термодинамические свойства, чувствительность, характеристики горения и детонации

Мохаммад Хоссейн Кешаварз<sup>1\*</sup>, Ясин Хаят Абади<sup>1</sup>,  
Карим Есмаилпоур<sup>1</sup>, Сайяд Даами<sup>1</sup>, Мохсен Офгадех<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Химический факультет, Технологический университет Малек-Аштар, Шахиншар 83145/115, Исламская Республика Иран; e-mail: keshavarz7@gmail.com

<sup>2</sup> Химический факультет, Университет Пайаме Нур, Тегеран 19395-4697, Исламская Республика Иран; e-mail: mmmoft@gmail.com

Поступило 6.10.2016  
Принято 13.01.2017



С использованием теории функционала плотности и соответствующих методов прогнозирования проведена оценка влияния *N*-оксидной группы на 1,2-бис(6-нитро-1,2,4,5-тетразин-3-ил)диазен-1-оксид – новый высокоэффективный взрывчатый материал на основе тетразина, на его теплофизические и эксплуатационные свойства. К важным свойствам относятся: физико-химические и термодинамические свойства, характеристики горения и детонации и чувствительность к внешним воздействиям. Прогнозируемые свойства нового соединения сравнимы со свойствами родственных соединений, 3,3'-дiazен-1,2-диилбис(6-нитро-1,2,4,5-тетразина) и 6,6'-дiazен-1,2-диилбис(1,2,4,5-тетразин-3-амина), а также со свойствами двух хорошо известных взрывчатых веществ – 2,4,6-тринитролуола (термостойкого взрывчатого вещества) и 1,3,5,7-тетранитрооктагидро-1,3,5,7-тетразолина (высокоэффективного взрывчатого вещества). Было показано, что введение *N*-оксида в гетарилдiazен может увеличить плотность его кристаллов, удельный импульс, теплоту и скорость детонации, а также давление детонации и мощность. Наличие *N*-оксидной группы оказывает больше влияния на повышение чувствительности к удару, чем на чувствительность к нагреву.

**Ключевые слова:** высокоэффективный энергоемкий материал, *N*-оксид, теория функционала плотности, чувствительность.

Азотистые гетероциклы составляют важный класс высокоэффективных энергоемких материалов и поэтому очень часто синтезируются в последние годы.<sup>1–3</sup> Среди этих гетероциклов энергоемкие соединения на основе тетразинового цикла особенно важны из-за высокого содержания азота.<sup>4–6</sup> В результате соединения с высокой плотностью энергии часто встречаются среди энергетических производных тетразина, поскольку у них высокая теплота образования и соответствующая чувствительность.<sup>7,8</sup> Многие богатые азотом производные тетразина, такие как 6,6'-дiazен-1,2-диилбис-

(1,2,4,5-тетразин-3-амин) (ДААТ), были синтезированы в последние годы.<sup>5,8–10</sup> Недавно было обнаружено, что введение *N*-оксидной группы в энергоемкие соединения на основе гетероциклов оказывает значительное влияние на их эффективность и физико-термические свойства.<sup>11</sup> Политцер с коллегами<sup>12</sup> рассчитал стабилизирующий эффект группы  $N \rightarrow O$  (*N*-оксид) на чередующихся атомах азота для двух изомеров ди(1,2,3,4-тетразин)тетраоксида (DTTO и изо-DTTO). Вей и коллеги оценили теплоту образования для ряда производных 1,2,4,5-тетразина,<sup>10</sup> тетраоло[1,5-*b*][1,2,4,5]-тетразина (TETZ) и [1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4,5]-тетразина (TTZ)<sup>13</sup> с использованием теории функцио-

Перевод с английского.

нала плотности (DFT). Физические и термодинамические свойства, чувствительность, характеристики детонации и горения двух новых производных тетразина, 3,3'-диазен-1,2-диилбис(6-нитро-1,2,4,5-тетразина) и 3,3'-гидразин-1,2-диилбис(6-нитро-1,2,4,5-тетразина), также были рассчитаны.<sup>6</sup>

Цель настоящей работы – оценить влияние связи N→O в новом высокоэффективном производном тетразина, 1,2-бис(6-нитро-1,2,4,5-тетразин-3-ил)диазеноксиде (**1**). Из-за важности плотности кристаллов при оценке детонационных характеристик энергоемкого соединения, она была оценена методом Райс и Берда, основанном на теории функционала плотности.<sup>14</sup> Для исследования влияния связи N→O на различные важные свойства используются новые надежные эмпирические зависимости структура–свойство (QSPR) и методы в рамках DFT. Сравнивались различные физические и термодинамические свойства, а также чувствительность и детонационные характеристики соединения **1** и родственного соединения – 3,3'-диазен-1,2-диилбис(6-нитро-1,2,4,5-тетразина) (**2**) (рис. 1). Из-за отсутствия группы N→O в соединении **2** были использованы другие методы прогнозирования, чем в предыдущем исследовании,<sup>6</sup> которые можно применять для обоих соединений **1** и **2**. Для оценки плотности вместо методов QSPR<sup>14</sup> использовался метод Райс и Берда на основе DFT, поскольку он может более надежно предсказать существование связи N→O. Прогнозируемые свойства этих соединений также сравнивались с расчетными и экспериментальными значениями характеристик двух хорошо известных взрывчатых веществ 2,4,6-тринитротолуола (TNT) и 1,3,5,7-тетранитрооктагидро-1,3,5,7-тетразоцина (HMX), а также DAAT как производного тетразина со структурой, аналогичной соединениям **1** и **2**.

Плотность кристалла может быть использована для оценки скорости и давления детонации нового взрыв-

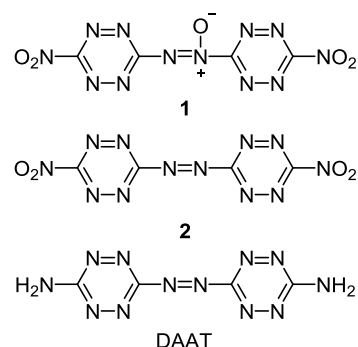


Рисунок 1. Структуры энергоемких соединений **1**, **2** и DAAT.

чатого вещества.<sup>1,2</sup> Расчет плотности кристалла проводился на основе усовершенствованного метода DFT<sup>14</sup> по уравнению (1), в который был введен индекс взаимодействия  $v\sigma_{tot}^2$ :

$$\rho = \alpha_1(M/V_M) + \beta_1(v\sigma_{tot}^2) + \gamma_1, \quad (1)$$

где  $\rho$  – плотность кристалла энергоемкого соединения, г/см<sup>3</sup>;  $V_M$  – объем внутри 0.001 а. е. изоповерхности электронной плотности, окружающей молекулу, рассчитанный методом DFT в приближении B3LYP/6-31G\*\* в программном пакете Гаусса;<sup>15</sup>  $M$ ,  $v$  и  $\sigma_{tot}^2$  – молекулярная масса соединения, степень равновесия положительного и отрицательного потенциалов на поверхности молекул и полное изменение электростатического потенциала на 0.001 а. е. молекулярной поверхности соответственно. Коэффициенты  $\alpha_1$ ,  $\beta_1$  и  $\gamma_1$  составляют 1.0462, 0.0021 и –0.1586 соответственно.<sup>14</sup> Как видно по табл. 1, присутствие N-оксидной группы может значительно увеличить значение плотности кристаллов. Однако плотности всех соединений по табл. 1 расположены в порядке убывания в ряду HMX > **1** > **2** > DAAT > TNT.

Таблица 1. Влияние N-оксида на различные свойства производных тетразина **1** и **2** в сравнении с DAAT, TNT и HMX

Свойство	Соединение <b>1</b>	Соединение <b>2</b>	DAAT*	TNT*	HMX*
Брутто-формула	C <sub>4</sub> N <sub>12</sub> O <sub>5</sub>	C <sub>4</sub> N <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>12</sub>	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>7</sub> O <sub>6</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>
$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	1.861	1.810	1.74 (1.78) <sup>32</sup>	1.579 (1.67) <sup>33</sup>	1.822 (1.78–1.96) <sup>34</sup>
$T_m$ , К	513.8	515.7	513.04 (523) <sup>31</sup>	348.6 (355.1) <sup>22</sup>	477.1 (548) <sup>22</sup>
$\Delta H_f^\circ(c)$ , кДж/моль	859.8	906.5	944.2 (862)** <sup>32</sup>	–59.9 (–63.22) <sup>35</sup>	44.5 (74.90) <sup>36</sup>
$\Delta H_{fus}$ , кДж/моль	32.96	31.70	39.55 (43.72)** <sup>31</sup>	24.89 (23.43) <sup>22</sup>	28.78 (32.1) <sup>37</sup>
$\Delta H_f^\circ(g)$ , кДж/моль	1249.6	1328.4 <sup>23</sup>	1135.1 <sup>23</sup>	16.64 <sup>38</sup> (24.1) <sup>39</sup>	252.71 <sup>40</sup>
$\Delta G_f^\circ$ , кДж/моль	1240.4	1240.4	–	243.0 (242.0) <sup>41</sup>	619.0 (623.1) <sup>41</sup>
$I_{sp}$ , Н·с/г	2.76	2.72	2.34 (2.21)** <sup>42</sup>	2.20 (2.10) <sup>43</sup>	2.61 (2.61) <sup>43</sup>
$Q_{det}$ , кДж/г	5.36	5.139	–	3.546 (4.56) <sup>35</sup>	– (6.197) <sup>35</sup>
$D$ , км/с	9.44	9.13	7.63 (8.77)** <sup>42</sup>	7.03 (7.2) <sup>36</sup>	8.89 (8.9) <sup>36</sup>
$P$ , кбар	403	375	282.95 (285.1)** <sup>42</sup>	222 (203) <sup>36</sup>	364 (366) <sup>36</sup>
$P_{ballistic\ mortar}$	144	140	–	107 (100) <sup>44</sup>	144 (150) <sup>44</sup>
$P_{Trauzl\ lead\ block}$	139	130	–	96 (100) <sup>44</sup>	150 (149) <sup>44</sup>
$DT$ , К	497.9	504.1	–	583 (573) <sup>45</sup>	583 (560) <sup>45</sup>
$E_l$ , Дж	16.56	45.74	–	16.91 (24.01) <sup>46</sup>	5.33 (7.10) <sup>46</sup>

\* Экспериментальные значения различных свойств DAAT, HMX и TNT приведены в круглых скобках вместе с литературными ссылками.

\*\* Расчетные данные.

Точка плавления зависит от межмолекулярных взаимодействий, свойств одиночной молекулы и наличия функциональных групп в соединении и может быть оценена по уравнению (2):<sup>16</sup>

$$T_m = 326.9 + 5.524a - 2.789b + 14.598c - 2.12d + 101.2T_{\text{nonadd}}, \quad (2)$$

где  $T_m$  – точка плавления в К;  $T_{\text{nonadd}}$  является неаддитивным вкладом некоторых конкретных групп в энергоемкие соединения с общей брутто-формулой  $C_aH_bN_cO_d$ .<sup>16</sup> Как видно по табл. 1, рассчитанные значения  $T_m$  соединений **1** и **2** выше, чем у HMX, DAAT и TNT.

Теплота образования в конденсированной фазе является очень важным параметром для расчетной оценки теплоты, скорости и давления детонации, как и удельного импульса.<sup>1</sup> Для ее расчета была применена новая модель (уравнение (3)):<sup>17</sup>

$$\begin{aligned} \Delta H_f^\circ(c) = & -111.4 + 333.1a - 28.84b + 86.80c - 62.03d - \\ & - 79.25(\Delta H_{f,\text{add,DHC}}^\circ + \Delta H_{f,\text{nonadd,DHC}}^\circ) + \\ & + 153.3(\Delta H_{f,\text{add,IHC}}^\circ + \Delta H_{f,\text{nonadd,IHC}}^\circ), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\Delta H_f^\circ(c)$  – теплота образования в конденсированной фазе, кДж/моль; индексы DHC и IHC в функциях  $\Delta H_{f,\text{add,DHC}}^\circ$ ,  $\Delta H_{f,\text{nonadd,DHC}}^\circ$ ,  $\Delta H_{f,\text{add,IHC}}^\circ$  и  $\Delta H_{f,\text{nonadd,IHC}}^\circ$  показывают уменьшение и увеличение содержания тепла в соединениях соответственно. Как указано в табл. 1, соединение **2** имеет более высокое положительное значение  $\Delta H_f^\circ(c)$ , чем соединение **1**. Таким образом, введение *N*-оксидной группы может уменьшить значение  $\Delta H_f^\circ(c)$ .

Для прогнозирования энтальпии плавления было использовано улучшенное соотношение следующей формы (уравнение (4)):<sup>18</sup>

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{fus}} = & 0.542a + 1.490b + 2.044c + 1.252d + 1.839e + \\ & + 9.848\Delta H_{\text{inc,fus}} - 11.675\Delta H_{\text{dec,fus}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\Delta H_{\text{fus}}$  – энтальпия плавления, кДж/моль;  $e$  – количество атомов галогена;  $\Delta H_{\text{inc,fus}}$  и  $\Delta H_{\text{dec,fus}}$  являются корректирующими функциями для увеличения и уменьшения расчетной энтальпии плавления на основе элементного состава. Поскольку число атомов углерода и азота в соединениях **1** и **2** одинаково, увеличение количества атомов кислорода в соединении **1** может увеличить его значение  $\Delta H_{\text{fus}}$ .

Энергия образования Гиббса ( $\Delta G_f^\circ$ ) является важным термодинамическим свойством, играющим ключевую роль в химических реакциях, которое можно рассчитать по уравнению (5):<sup>19</sup>

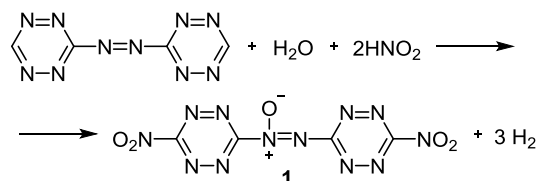
$$\begin{aligned} \Delta G_f^\circ = & 28.24a - 29.28b + 92.53c - 142.8e + \\ & + 109.1\Delta G_f^+ - 234.0\Delta G_f^-, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\Delta G_f^\circ$  в кДж/моль;  $\Delta G_f^-$  и  $\Delta G_f^+$  (оба в кДж/моль) показывают уменьшение и увеличение функций свободной энергии для корректировки вклада элементного состава соответственно.<sup>19</sup> Как видно по табл. 1, значения  $\Delta G_f^\circ$  и, следовательно, реакционная способность соединений **1** и **2** выше, чем у HMX.

Теплота образования в газовой фазе ( $\Delta H_f^\circ(g)$ ) является важным термодинамическим параметром, который может быть рассчитан методом DFT в програм-

мном пакете Гаусса.<sup>15</sup> Уилкокк совместно с коллегами использовал соответствующие изодесмические реакции для расчета теплоты образования в газовой фазе соединений **2** и DAAT.<sup>20</sup> В настоящей работе теория функционала плотности в приближении B3LYP/6-31G\*\* в программном пакете Гаусса<sup>15</sup> была использована для расчета  $\Delta H_f^\circ(g)$  соединения **1** на основе гипотетической реакции (схема 1).

#### Схема 1



Для оценки значения  $\Delta H_f^\circ(g)$  применялась процедура, состоящая из двух стадий: 1) была рассчитана стандартная энтальпия реакции и 2) рассчитанные значения использовались вместе со справочными значениями  $\Delta H_f^\circ(g)$  для  $H_2O$  ( $-241.83$  кДж/моль<sup>21,22</sup>),  $HNO_2$  ( $-76.73$  кДж/моль<sup>22</sup>) и 3,3'-диазен-1,2-диилбис(1,2,4,5-тетразина) ( $1256.9$  кДж/моль<sup>23</sup>) для расчета соответствующего значения для соединения **1**. Как видно по табл. 1, у соединения **1**, как и у соединения **2** и DAAT, также высокое положительное значение  $\Delta H_f^\circ(g)$ .

Удельный импульс ( $I_{sp}$ ) характеризует горение взрывчатого вещества, когда оно рассматривается как монотопливо, и определяется как тяга на единицу массы расхода топлива и может быть рассчитано по уравнению (6):<sup>24</sup>

$$\begin{aligned} I_{sp} = & 2.425 - 0.074a - 0.0036b + 0.0237c + 0.04d - \\ & - 0.1001n_{\text{NHx}} - 0.1466(n_{\text{Ar}} - 1), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $I_{sp}$  в Н·с/кг;  $n_{\text{NHx}}$  и  $n_{\text{Ar}}$  – количество групп  $NH_2$  или  $NH$  и количество ароматических циклов в молекуле соответственно.<sup>24</sup> Как видно по табл. 1, значение  $I_{sp}$  у соединения **1** выше, чем у других соединений, потому что присутствие *N*-оксидного фрагмента увеличивает количество атомов кислорода в молекуле. Следовательно, использование соединения **1** в качестве окислителя в твердых ракетных топливах может повысить эффективность их горения.

Теплота детонации ( $Q_{\text{det}}$ ) является одним из основных параметров детонации, который можно определить как энергию, способную совершать механическую работу, и для ароматических энергоемких соединений ее можно рассчитать по уравнению (7),<sup>25</sup> где  $H_2O$  как один из продуктов реакции находится в жидком состоянии.

$$Q_{\text{det}} = 2.129 + 0.178c + 0.874d/a + 0.160b/d + 0.965C_{\text{SFG}}, \quad (7)$$

где  $Q_{\text{det}}$  в кДж/г;  $C_{\text{SFG}}$  учитывает вклад некоторых особых функциональных групп. Значение  $Q_{\text{det}}$  соединения **1** выше, чем соединения **2** из-за более высокого содержания атомов кислорода в соединении **1**.

Надежная модель была использована для оценки скорости детонации через  $I_{sp}$  – уравнение (8),<sup>26</sup> которое подходит для идеальных и неидеальных взрывчатых веществ:

$$D = 1.453I_{sp}p_0 + 1.98, \quad (8)$$

где  $D$  – скорость детонации, км/с,  $\rho_0$  – плотность пресовки, г/см<sup>3</sup>. Согласно уравнению (8), высокие значения  $\rho_0$  и  $I_{sp}$  могут привести к большому значению скорости детонации. Таким образом, скорость детонации соединения **1** имеет наибольшее значение в табл. 1, поскольку значение  $I_{sp}\rho_0$  для соединения **1** больше, чем для других соединений.

Давление детонации – это давление, создаваемое в реакционной зоне детонирующего взрывчатого вещества, которое можно прогнозировать по уравнению (9):<sup>27</sup>

$$P = 44.4I_{sp}\rho_0^2 - 21, \quad (9)$$

где  $P$  – давление детонации, кбар. Прогнозируемые давления детонации всех соединений (табл. 1) согласуются с данными, полученными для скоростей детонации. Расчетные скорость и давление детонации для взрывчатых веществ располагаются в порядке убывания в ряду **1** > **2** > HMX > DAAT > TNT. Таким образом, введение  $N$ -оксидного фрагмента может значительно повысить эффективность детонации (скорость и давление).

Сила энергоемкого соединения является мерой его способности выполнять полезную работу, которая может быть определена как сумма всех форм механической работы, совершаемой во время процесса детонации.<sup>2,28</sup> Испытания с помощью баллистической мортиры и бомбы Трауцля часто используются для определения мощности энергоемкого соединения.<sup>1,2</sup> Для оценки мощности четырех соединений, приведенных в табл. 1, использовались два соответствующих соотношения для испытания в баллистической мортире (уравнение (10)) и бомбе Трауцля (уравнение (11)):<sup>28,29</sup>

$$P_{\text{ballistic mortar}} (\%TNT) = 113 - 5.16a + 2.79c + 3.61d - 46.18OCF, \quad (10)$$

$$P_{\text{Traulz lead block}} (\%TNT) = 363 - 6352(a/MW) - 4926(c/MW) - 21.17(\Delta H_f(c)/MW), \quad (11)$$

где  $P_{\text{ballistic mortar}} (\%TNT)$  и  $P_{\text{Traulz lead block}} (\%TNT)$  представляют собой взрывчатую мощность относительно TNT в качестве стандарта (100%) в баллистической мортире и бомбе Трауцля соответственно; OCF – завышенная корректирующая функция. Прогнозируемые значения  $P_{\text{ballistic mortar}} (\%TNT)$  и  $P_{\text{Traulz lead block}} (\%TNT)$  приведены для соединения **1**, а также для соединения **2** и HMX для сравнения. Как видно по табл. 1, результаты испытания в баллистической мортире и бомбе Трауцля сходны. Более того, оба теста показывают, что мощность соединения **1** близка к мощности HMX и немного выше, чем у соединения **2**. Таким образом, введение  $N$ -оксидной группы может увеличить мощность взрывчатых веществ на основе тетразина.

Температура вспышки является важным параметром безопасности при работе с энергоемкими соединениями, которую можно рассчитать по уравнению (12):<sup>30</sup>

$$DT = 476.6 + 13.08a - 6.21d + 103.7DT_{\text{nonadd}}^+ - 103.1DT_{\text{nonadd}}^-, \quad (12)$$

где  $DT$  – температура вспышки, К; две функции  $DT_{\text{nonadd}}^+$  и  $DT_{\text{nonadd}}^-$  показывают вклад увеличения и уменьшения неаддитивных структурных параметров

соответственно.<sup>30</sup> Все переменные в уравнении (12), кроме  $d$ , одинаковы для двух соединений **1** и **2**. Таким образом, значение  $DT$  уменьшается и, следовательно, наличие дополнительного атома кислорода в соединении **1** снижает его термическую стабильность. Наличие электроотрицательного атома кислорода, связанного с соседним атомом азота, может увеличить возможность термического разложения этого соединения, поэтому угроза безопасности при использовании соединения **1** выше, чем при использовании соединения **2**. Кроме того, соединения **1** и **2** имеют более высокую чувствительность к нагреву, чем TNT и HMX.

Чувствительность к удару является важным фактором, ответственным за многие аварии при работе с энергоемкими соединениями,<sup>2</sup> и может быть спрогнозирована по новому соотношению (уравнение (13)):<sup>31</sup>

$$E_1 = 0.245 \times 10^{-0.584 + \frac{61.62a + 21.53b + 27.96c + 84.47E_1^+ - 147.1E_1^-}{MW}}, \quad (13)$$

где  $E_1$  – чувствительность к удару, Дж.  $E_1^+$  и  $E_1^-$  учитывают наличие конкретных молекулярных фрагментов, способствующих увеличению и уменьшению значений  $E_1$  соответственно. Как указано в табл. 1, прогнозируемая  $E_1$  соединения **1** близка к соответствующему значению для TNT и меньше, чем у соединения **2**. Таким образом, наличие  $N$ -оксидной группы может повысить чувствительность энергоемких соединений на основе тетразина к ударному воздействию.

Таким образом, проведена оценка влияния  $N$ -оксидной группы на свойства нового взрывчатого вещества с высоким содержанием азота на основе производного тетразина – 1,2-бис(6-нитро-1,2,4,5-тетразин-3-ил)диазен-1-оксида. Проведено сравнение физических, термодинамических, эксплуатационных свойств и чувствительности к удару и тепловому воздействию этого соединения и 3,3'-диазен-1,2-диилбис(6-нитро-1,2,4,5-тетразина), а также 6,6'-диазен-1,2-диилбис(1,2,4,5-тетразин-3-амин), TNT и HMX. Результаты расчетов подтверждают, что введение  $N$ -оксидной группы может увеличить плотность кристалла, удельный импульс, теплоту и скорость детонации, давление детонации и мощность по сравнению с аналогом без  $N$ -оксидного атома кислорода. Введение  $N$ -оксидной группы также оказывает большее влияние на увеличение чувствительности к удару, чем на увеличение восприимчивости к тепловому воздействию.

Авторы благодарят Исследовательский комитет технологического университета Малек-Аштар за поддержку этой работы.

### Список литературы

1. Agrawal, J. P. *High Energy Materials: Propellants, Explosives and Pyrotechnics*; John Wiley & Sons, 2010.
2. Klapötke, T. M. *Chemistry of High-energy Materials*; De Gruyter: Berlin/Boston, 2015.
3. Thottempudi, V.; Forohor, F.; Parrish, D. A.; Shreeve, J. n. M. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2012**, *51*, 9881.
4. (a) Aizikovitch, A.; Shlomovich, A.; Cohen, A.; Gozin, M. *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 13939. (b) Piercey, D. G.; Chavez, D. E.; Heimsch, S.; Kirst, C.; Klapötke, T. M.; Stierstorfer, J.

- Propellants, Explos., Pyrotech.* **2015**, 40, 491. (c) Talawar, M.; Sivabalan, R.; Senthilkumar, N.; Prabhu, G.; Asthana, S. *J. Hazard. Mater.* **2004**, 113(1), 11. (d) Badgujar, D.; Talawar, M.; Asthana, S.; Mahulikar, P. *J. Hazard. Mater.* **2008**, 151(2), 289.
5. (a) Wei, H.; Gao, H.; Shreeve, J. n. M. *Chem.–Eur. J.* **2014**, 20, 16943. (b) He, P.; Zhang, J.-G.; Wang, K.; Yin, X.; Zhang, T.-L. *J. Org. Chem.* **2015**, 80, 5643.
  6. Keshavarz, M.; Esmailpour, K.; Oftadeh, M.; Abadi, Y. H. *RSC Adv.* **2015**, 5, 87392.
  7. (a) Pan, Y.; Zhu, W.; Xiao, H. *J. Mol. Model.* **2012**, 18, 3125. (b) Li, Z.-m.; Xie, S.-h.; Zhang, J.-g.; Feng, J.-l.; Wang, K.; Zhang, T.-l. *J. Chem. Eng. Data* **2012**, 57, 729. (c) Klapötke, T. M. In *High Energy Density Materials*; Klapötke, T. M., Ed.; Springer: Berlin, 2015, p. 85.
  8. Wu, Q.; Zhu, W.; Xiao, H. *J. Chem. Eng. Data* **2013**, 58, 2748.
  9. (a) Klapötke, T. M.; Sabaté, C. M. *Chem. Mater.* **2008**, 20, 3629. (b) Pagoria, P. F.; Lee, G. S.; Mitchell, A. R.; Schmidt, R. D. *Thermochim. Acta* **2002**, 384(1), 187. (c) Deswal, S.; Ghule, V. D.; Kumar, T. R.; Radhakrishnan, S. *Comput. Theor. Chem.* **2015**, 1054, 55. (d) Tan, B.; Huang, M.; Huang, H.; Long, X.; Li, J.; Nie, F.; Huang, J. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2013**, 38, 372. (e) Wei, T.; Wu, J.; Zhu, W.; Zhang, C.; Xiao, H. *J. Mol. Model.* **2012**, 18, 3467. (f) Klapötke, T. M.; Witkowski, T. G. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2015**, 40, 1. (g) Jochen Kerth, S. L. b. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2002**, 27, 111. (h) Yang, J.; Karver, M. R.; Li, W.; Sahu, S.; Devaraj, N. K. *Angew. Chem.* **2012**, 124, 5312. (i) Rao, G.-W.; Hu, W.-X. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2006**, 16, 3702. (j) Chavez, D. E.; Hiskey, M. A.; Naud, D. L. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2004**, 29, 209.
  10. Wei, T.; Zhu, W.; Zhang, X.; Li, Y.-F.; Xiao, H. *J. Phys. Chem. A* **2009**, 113, 9404.
  11. (a) He, P.; Zhang, J. G.; Yin, X.; Wu, J. T.; Wu, L.; Zhou, Z. N.; Zhang, T. L. *Chem.–Eur. J.* **2016**, 22, 7670. (b) Fischer, D.; Klapötke, T. M.; Piercey, D. G.; Stierstorfer, J. *Chem.–Eur. J.* **2013**, 19, 4602. (c) He, C.; Tang, Y.; Mitchell, L. A.; Parrish, D. A.; Jean'ne, M. S. *J. Mater. Chem. A* **2016**, 4, 8969. (d) Roknabadi, A. G.; Keshavarz, M. H.; Esmailpour, K.; Zamani, M. J. *Iran. Chem. Soc.* **2017**, 14, 57. (e) Chavez, D. E.; Parrish, D. A.; Mitchell, L.; Imler, G. H. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, 56, 3575. (f) He, C.; Zhang, J.; Parrish, D. A.; Jean'ne, M. S. *J. Mater. Chem. A* **2013**, 1, 2863. (g) Piercey, D. G.; Chavez, D. E.; Heimsch, S.; Kirst, C.; Klapötke, T. M.; Stierstorfer, J. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2015**, 40, 491. (h) Wei, H.; Gao, H.; Shreeve, J. n. M. *Chem.–Eur. J.* **2014**, 20, 16943. (i) Dippold, A. A.; Klapötke, T. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 9931. (j) Zhang, J.; Shreeve, J. n. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 4437. (k) Wei, H.; Zhang, J.; Shreeve, J. n. M. *Chem.–Asian J.* **2015**, 10, 1130.
  12. Politzer, P.; Lane, P.; Murray, J. S. *Cent. Eur. J. Energ. Mater.* **2013**, 10, 37.
  13. Wei, T.; Zhu, W.; Zhang, J.; Xiao, H. *J. Hazard. Mater.* **2010**, 179, 581.
  14. Rice, B. M.; Byrd, E. F. J. *Comput. Chem.* **2013**, 34, 2146.
  15. 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, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; 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, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. *Gaussian 09*, Gaussian, Inc.: Wallingford, 2009.
  16. Keshavarz, M. H. *J. Hazard. Mater.* **2009**, 171, 786.
  17. Nazari, B.; Keshavarz, M. H.; Hamadianian, M.; Mosavi, S.; Ghaedsharafi, A. R.; Pouretedal, H. R. *Fluid Phase Equilib.* **2016**, 408, 248.
  18. Oskoei, Y. M.; Keshavarz, M. H. *Fluid Phase Equilib.* **2012**, 326, 1.
  19. Keshavarz, M. H.; Pouretedal, H. R.; Ghaedsharafi, A. R.; Taghizadeh, S. E. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2014**, 39, 815.
  20. Elioff, M. S.; Hoy, J.; Bumpus, J. A. *Adv. Phys. Chem.* **2016**. DOI: 10.1155/2016/5082084.
  21. Burgess, D. R., Jr. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **2016**, 121, 108.
  22. *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*; Linstrom, P. J.; Mallard, W. G., Eds.; National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg. DOI: 10.18434/T4D303.
  23. Wilcox, C. F.; Zhang, Y.-X.; Bauer, S. J. *Energ. Mater.* **2002**, 20, 71.
  24. Keshavarz, M. H. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2008**, 33, 316.
  25. Keshavarz, M. H. *J. Hazard. Mater.* **2007**, 143, 549.
  26. Keshavarz, M.; Pouretedal, H. *Indian J. Eng. Mater. Sci.* **2004**, 11, 429.
  27. Gill, R.; Asaoka, L.; Baroody, E. J. *Energ. Mater.* **1987**, 5(3-4), 287.
  28. Keshavarz, M. H.; Seif, F. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2013**, 38, 709.
  29. Kamalvand, M.; Keshavarz, M. H.; Jafari, M. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2015**, 40, 551.
  30. Keshavarz, M. H.; Moradi, S.; Saatluo, B. E.; Rahimi, H.; Madram, A. R. *J. Therm. Anal. Calorim.* **2013**, 112, 1453.
  31. Keshavarz, M. H. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2013**, 38, 754.
  32. Huynh, M. H. V.; Hiskey, M. A.; Hartline, E. L.; Montoya, D. P.; Gilardi, R. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2004**, 43, 4924.
  33. Tarver, C. M. *J. Chem. Eng. Data* **1979**, 24, 136.
  34. Meyer, R.; Köhler, J.; Homburg, A. *Explosives*; Wiley-VCH Verlag: Weinheim, 2007, 6th ed., p. 238.
  35. Rice, B. M.; Hare, J. *Thermochim. Acta* **2002**, 384, 377.
  36. Hobbs, M. L.; B. MR, In *Tenth Symposium (International) on Detonation*; Boston, 1993.
  37. Zeman, S.; Jalový, Z. *Thermochim. Acta* **2000**, 345, 31.
  38. Oftadeh, M.; Keshavarz, M. H.; Khodadadi, R. *Cent. Eur. J. Energ. Mater.* **2014**, 11, 143.
  39. Afeefy, H. Y.; Liebman, J. F.; Stein, S. E. In *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*; Linstrom, P. J.; Mallard, W. G., Eds.; National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg. DOI: 10.18434/T4D303.
  40. Roknabadi, A. G.; Keshavarz, M. H.; Esmailpour, K.; Zamani, M. J. *Iran. Chem. Soc.* **2017**, 14, 57.
  41. DIPPR Project 801, American Institute of Chemical Engineers, 2006o. <https://www.aiche.org/dippr/events-products/801-database>
  42. Fuchs, B.; Stec, D., III In *Defense and Security Symposium*; International Society for Optics and Photonics, 2007, p. 65561B-65561B-12.
  43. Mader, C. L. *Numerical Modeling of Explosives and Propellants*; CRC press, 2007.
  44. Fedoroff, B. T.; Sheffield, O. E.; Reese, E. F.; Clift, G. D. *Encyclopedia of Explosives and Related Items*; Picatinny Arsenal: Dover, 1962, vol. 2, p. B270.
  45. Teipel, U. *Energetic Materials: Particle Processing and Characterization*; John Wiley & Sons, 2006, p. 5.
  46. Rice, B. M.; Hare, J. J. *J. Phys. Chem. A* **2002**, 106, 1770.