

УДК 536.45

# ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА И СКРИНИНГ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЭНЕРГИИ: СОЧЕТАНИЕ ЦИКЛОВ 1,2,4-ОКСАДИАЗОЛА И 1,3,4-ОКСАДИАЗОЛА

H. Lin<sup>1</sup>, D.-D. Yang<sup>1</sup>, N. Lou<sup>1</sup>, Sh.-G. Zhu<sup>2</sup>, H.-Zh. Li<sup>3</sup><sup>1</sup>Университет Лудонг, Яньтай 264025, Китай, helin201212@gmail.com<sup>2</sup>Нанкинский научно-технологический университет, Нанкин 210094, Китай<sup>3</sup>Китайская академия инженерной физики, Мянъян 621900, Китай

Энергетические материалы со сбалансированным сочетанием детонационных свойств и чувствительности являются долговременной целью разработки материалов с высокой плотностью энергии (HEDM). Проведены вычисления в рамках теории функционала плотности для характеристики соотношений между структурой и свойствами четырех связанных производных 1,2,4-оксадиазола/1,2,4-оксадиазола и 1,2,4-оксадиазола/1,3,4-оксадиазола. Показано, что все эти соединения обладают хорошим кислородным балансом, положительной энергией образования, высокой плотностью кристаллов, хорошим детонационным поведением и приемлемой чувствительностью к воздействию. В частности, первое из исследованных соединений характеризуется наилучшим соотношением между детонационным поведением и чувствительностью, причем детонационные свойства этого соединения превосходят таковые гексогена, а его чувствительность к удару ниже, чем у октогена. Принимая во внимание эти исключительные свойства, можно ожидать, что все эти расчетные соединения являются кандидатами в HEDM с низкой чувствительностью.

Ключевые слова: материалы с высокой плотностью энергии, детонационное поведение, чувствительность, теория функционала плотности.

DOI 10.15372/FGV20190504

## ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия в области высокоэнергетических материалов большое внимание уделяется разработке новых материалов с высокой плотностью энергии (HEDM) [1–3]. В настоящее время большинство HEDM гражданского и военного применения чувствительны к внешнему воздействию, например, 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазинан (гексоген, RDX), 1,3,5,7-тетранитро-1,3,5,7-тетразокан (октоген, HMX) и 2,4,6,8,10,12-гексанитро-2,4,6,8,10,12-гексаазаизовюрцитан (CL-20). Интенсивное взрывчатое вещество 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензол (TATB) также хорошо известно, но его детонационное поведение хуже, чем у HEDM. К сегодняшнему дню толь-

ко 3-нитро-1,2,4-триазол-5-он (NTO), 1,1-диамино-2,2-динитроэтилен (FOX-7) и 2,6-диамино-3,5-динитро-1,4-пирозин-1-оксид (LLM-115) проявляют мощные детонационные свойства и низкую чувствительность. Поэтому вызывают интерес поиски новых HEDM, обладающих хорошим соотношением между детонационными свойствами и чувствительностью [4].

Внимание исследователей привлекают богатые азотом гетероциклические соединения [5–7], поскольку они характеризуются высокой плотностью, благоприятным кислородным балансом, положительной теплотой образования и экологичностью. Ключевым соединением, служащим основой для дизайна и синтеза HEDM, является оксадиазол, типичный пятичленный гетероцикл. Существует три стабильных изомера оксадиазола: 1,2,5-оксадиазол, 1,2,4-оксадиазол и 1,3,4-оксадиазол. Первый из них — 1,2,5-оксадиазол (фуразан) — высокоэнергетическое соединение, но очень чувствительное из-за того, что две его связи N—O легко разрываются при высокой температу-

© Lin H.<sup>1</sup>, Yang D.-D.<sup>1</sup>, Lou N.<sup>1</sup>, Zhu Sh.-G.<sup>2</sup>, Li H.-Zh.<sup>3</sup>, 2019.

<sup>1</sup>School of Chemistry and Materials Science, Ludong University, Yantai, 264025, China. <sup>2</sup>School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing, 210094, China. <sup>3</sup>Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics (CAEP), Mianyang, 621900, China

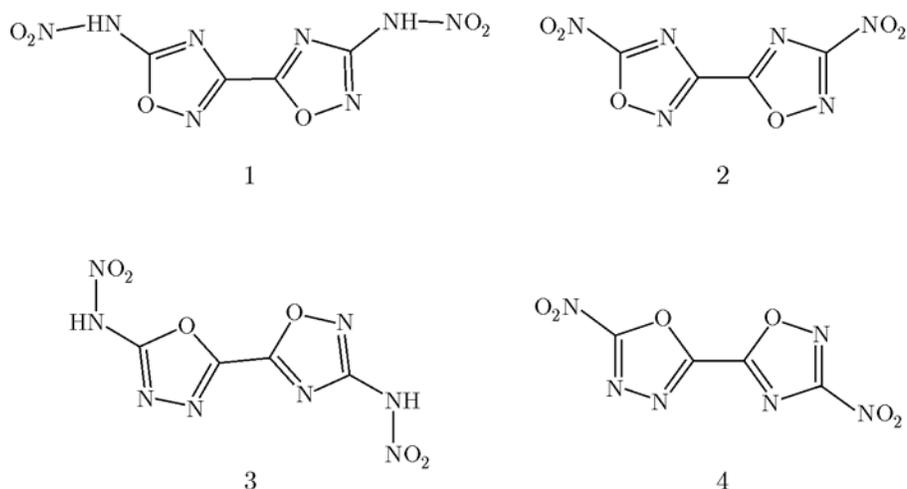


Рис. 1. Молекулярные структуры исследуемых соединений

ре [8]. Недавние исследования показали, что 1,2,4-оксадиазол и 1,3,4-оксадиазол гораздо более стабильны, чем фуразан. Кроме того, энергетические материалы, спроектированные на их основе, демонстрируют хороший компромисс между высокой энергетичностью и характеристиками безопасности [9–13]. Например, в [9] обнаружено, что введение цикла 3-нитро-1,2,4-оксадиазола может существенно улучшить термическую устойчивость и уменьшить чувствительность получаемых на этой основе HEDM. Исследование в [10, 11] HEDM, сконструированных из связанных предшественников 1,2,5-оксадиазол/1,3,4-оксадиазол и 1,2,5-оксадиазол/1,2,4-оксадиазол, показало их хорошую термическую устойчивость, приемлемую чувствительность и прекрасное детонационное поведение. В [12] авторы синтезировали шитые производные 1,3,4-оксадиазол/1,3,4-оксадиазол в качестве экономичных HEDM и показали, что 1,3,4-оксадиазол — перспективный блок для дизайна новых HEDM со сбалансированным соотношением детонационных свойств и чувствительности. Поскольку 1,2,4-оксадиазол и 1,3,4-оксадиазол проявляют высокую эффективность, возникает естественный вопрос, не могут ли шитые производные 1,2,4-оксадиазол/1,2,4-оксадиазол и 1,2,4-оксадиазол/1,3,4-оксадиазол обладать еще лучшими детонационными характеристиками и более низкой чувствительностью.

Мы предложили четыре шитых производных 1,2,4-оксадиазол/1,2,4-оксадиазол и 1,2,4-оксадиазол/1,3,4-оксадиазол в качестве HEDM (рис. 1) и исследовали взаимосвязь

их структуры и свойств при помощи всеобъемлющих вычислений методом функционала плотности. Результаты показали, что все эти соединения имеют мощные детонационные характеристики (скорость детонации  $8.39 \div 8.84$  км/с, давление детонации  $31.65 \div 36.23$  ГПа) и низкую чувствительность к удару ( $H_{50} = 18 \div 66$  см). Кроме того, энергетические характеристики соединения 1 выше, чем у RDX, а чувствительность к удару меньше, чем у HMX. Таким образом, эти соединения являются перспективными HEDM с низкой чувствительностью.

## 1. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ПРОЦЕДУРА

Вычисления методом функционала плотности были проведены с использованием гибридного B3LYP-функционала с базисным набором 6-311G(d,p), встроенным в пакет программ Gaussian 09 [14]. Геометрические структуры предложенных соединений были оптимизированы с критериями сходимости по умолчанию, и показано при помощи колебательного анализа, что они являются истинными локальными минимумами энергии на поверхности потенциальной энергии. На основе оптимизированных геометрических структур были рассчитаны электронные структуры и инфракрасные спектры.

Для оценки детонационного поведения предложенных соединений были вычислены теплота их образования, кристаллическая плотность и давление детонации. Газофазную теплоту образования получали из изодесмиче-

ских реакций, а твердофазную — в соответствии с законом Гесса. Кристаллическая плотность, определяющий параметр для энергии детонации, вычислена по уравнению, выведенному в [15], а также методом Монте-Карло в полиморфном модуле программы Materials Studio. Наконец, скорость и давление детонации были рассчитаны по эмпирическим уравнениям Камлета — Якобса [16].

Для проверки чувствительности к удару ( $H_{50}$ ) рассматриваемых соединений использовались следующие методы [17, 18]:

$$1) H_{50} = -0.0064\sigma_+^2 + 241.42\nu - 3.43,$$

$$2) H_{50} = 9.2 +$$

$$+ 8.03 \cdot 10^2 \exp(-0.3663|\bar{V}^+ - |\bar{V}^-||),$$

$$3) H_{50} = 29.3 + 1.386 \cdot 10^{-3} \exp(48.84\nu),$$

$$4) H_{50} = 27.8 +$$

$$+ 0.1135 \exp[-11.0793(Q_d - 1.6606)],$$

где  $\sigma_+^2$  указывает силу и изменение положительных поверхностных потенциалов по контуру 0.002 электронной плотности,  $|\bar{V}^+ - |\bar{V}^-||$  — разность между положительными и отрицательными поверхностными потенциалами по контуру 0.001 электронной плотности,  $\nu$  — параметр электростатического равенства,  $Q_d$  — теплота детонации.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 2.1. Геометрические и электронные структуры

Для поиска устойчивых конфигураций исследуемых соединений (рис. 2) была проведена геометрическая оптимизация. Ее результаты показали, что цикл 1,2,4-оксадиазола связан с циклом 1,3,4-оксадиазола в одной плоскости, но в другой плоскости связан с нитро- и нитроаминными группами. На рис. 3 представлены высшая занятая молекулярная орбиталь (НОМО), низшая вакантная молекулярная орбиталь (LUMO) и энергетический барьер между ними. Положительная фаза показана более темным (красным) цветом, а отрицательная —

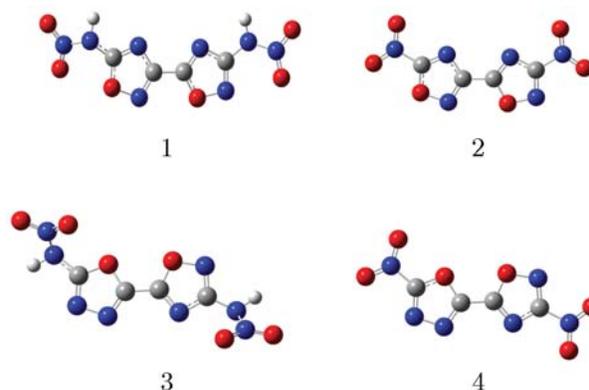


Рис. 2. Оптимизированные структуры исследуемых соединений

более светлым (зеленым). Видно, что распределения НОМО и LUMO различаются в разных соединениях. Для соединений 2 и 4 НОМО и LUMO в большей степени локализованы на цикле 1,3,4-оксадиазола. При этом орбитали C—NO<sub>2</sub> и N—NO<sub>2</sub> также видны на НОМО и LUMO, а это позволяет предполагать, что добавление или удаление электрона на орбитали C—NO<sub>2</sub> и N—NO<sub>2</sub> может понижать устойчивость этих соединений. Более того, энергетический барьер между НОМО и LUMO является важным параметром для определения реакционной способности молекулы [19]. Из рис. 3 также видно, что все рассматриваемые соединения имеют довольно высокие энергетические барьеры в диапазоне 4.83 ÷ 5.08 эВ, а это означает, что внутримолекулярные заряды не могут легко переноситься от донора электронов к акцептору. Следовательно, химическая устойчивость соединений 1–4 должна быть превосходной.

Более того, электростатический потенциал (ESP) — это полезный инструмент для того, чтобы понять, какие участки в молекулах HEDM ответственны за чувствительность к удару и за реакционную способность [17, 18, 20]. Величины электростатических потенциалов исследуемых соединений показаны для изоповерхности электронной плотности 0.001 эл/бор<sup>3</sup> на рис. 4. Видно, что положительные потенциалы (синий цвет) привязаны к оксадиазольному циклу, тогда как отрицательные (красный цвет) — в основном к нитро- и нитроаминным группам. Ясно, что положительные потенциалы соединений 2 и 4 выше, чем у остальных соединений, что может при-

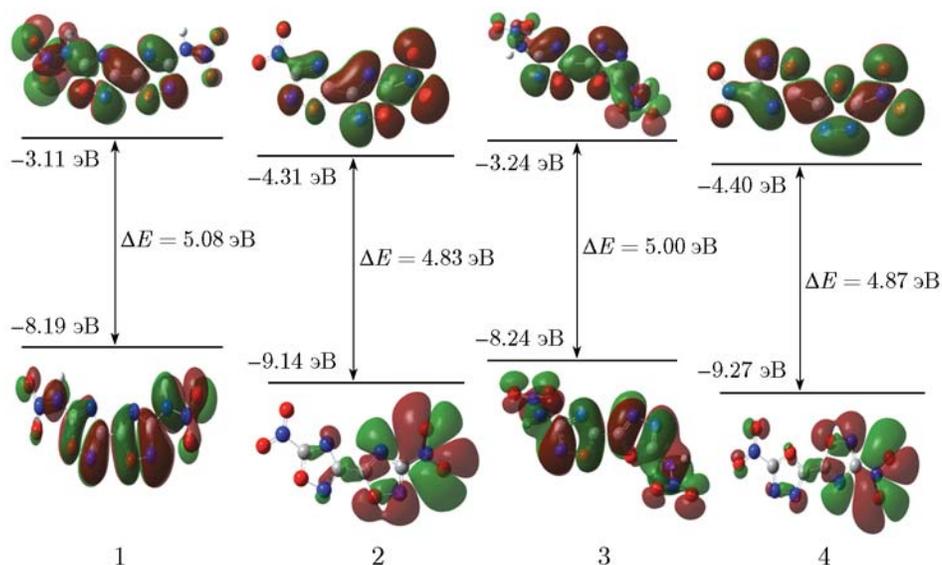


Рис. 3. Высшие занятые (НОМО), низшие вакантные (LUMO) орбитали и энергетические барьеры исследуемых соединений

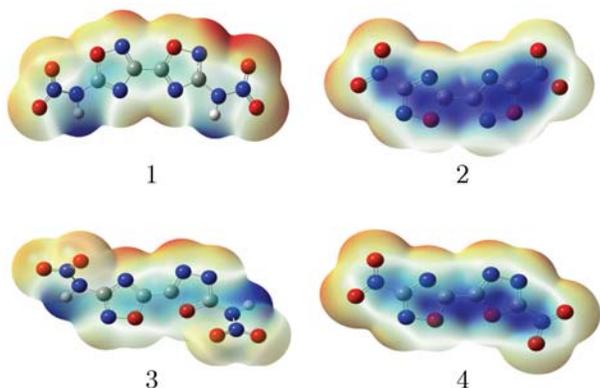


Рис. 4. Электростатические потенциалы исследуемых соединений (от отрицательного до положительного)

водить к относительно высоким чувствительности к удару и реакционной способности.

## 2.2. Инфракрасные спектры

Инфракрасные спектры, показанные на рис. 5, дают информацию о характеристическом поглощении исследуемых соединений. Для всех этих соединений характеристические полосы асимметричных валентных колебаний группы  $\text{NO}_2$  лежат в узкой области  $\nu = 1575 \div 1664 \text{ см}^{-1}$ , а симметричные валентные колебания — в области  $\nu = 1168 \div 1287 \text{ см}^{-1}$ . Валентные колебания группы  $\text{C—O}$  ожидаются

в области  $1314 \div 1384 \text{ см}^{-1}$ , а пики в области  $1552 \div 1608 \text{ см}^{-1}$  относятся к колебаниям связи  $\text{C=N}$ . Кроме того, колебания связи  $\text{N—O}$  проявляются в области  $1072 \div 1224 \text{ см}^{-1}$ , а пики в области  $500 \div 1000 \text{ см}^{-1}$  связаны в основном с деформационными и внеплоскостными колебаниями оксадиазольного цикла. Для соединений 1 и 3 пики на  $3591$  и  $3582 \text{ см}^{-1}$  принадлежат валентным колебаниям связи  $\text{N—H}$ , а пики на  $1728$  и  $1719 \text{ см}^{-1}$  относятся к колебаниям группы  $\text{—NHNO}_2$ .

## 2.3. Физико-химические и энергетические характеристики

Для практического использования исследуемых соединений важно знать их физико-химические и энергетические свойства. Как видно из табл. 1, эти соединения имеют хороший кислородный баланс и благоприятную теплоту образования, которые несколько выше, чем у RDX и HMX. Плотность всех исследуемых соединений относительно высокая. При этом у соединений 1 и 4 она выше, чем у HMX, что делает эти соединения особенно привлекательными для последующего экспериментального исследования. Отметим, что плотности, полученные методом Монте-Карло, несколько выше рассчитанных по уравнениям [15]. Вычисленная теплота детонации лежит в диапазоне  $Q = 5756 \div 6095 \text{ Дж/г}$ , причем

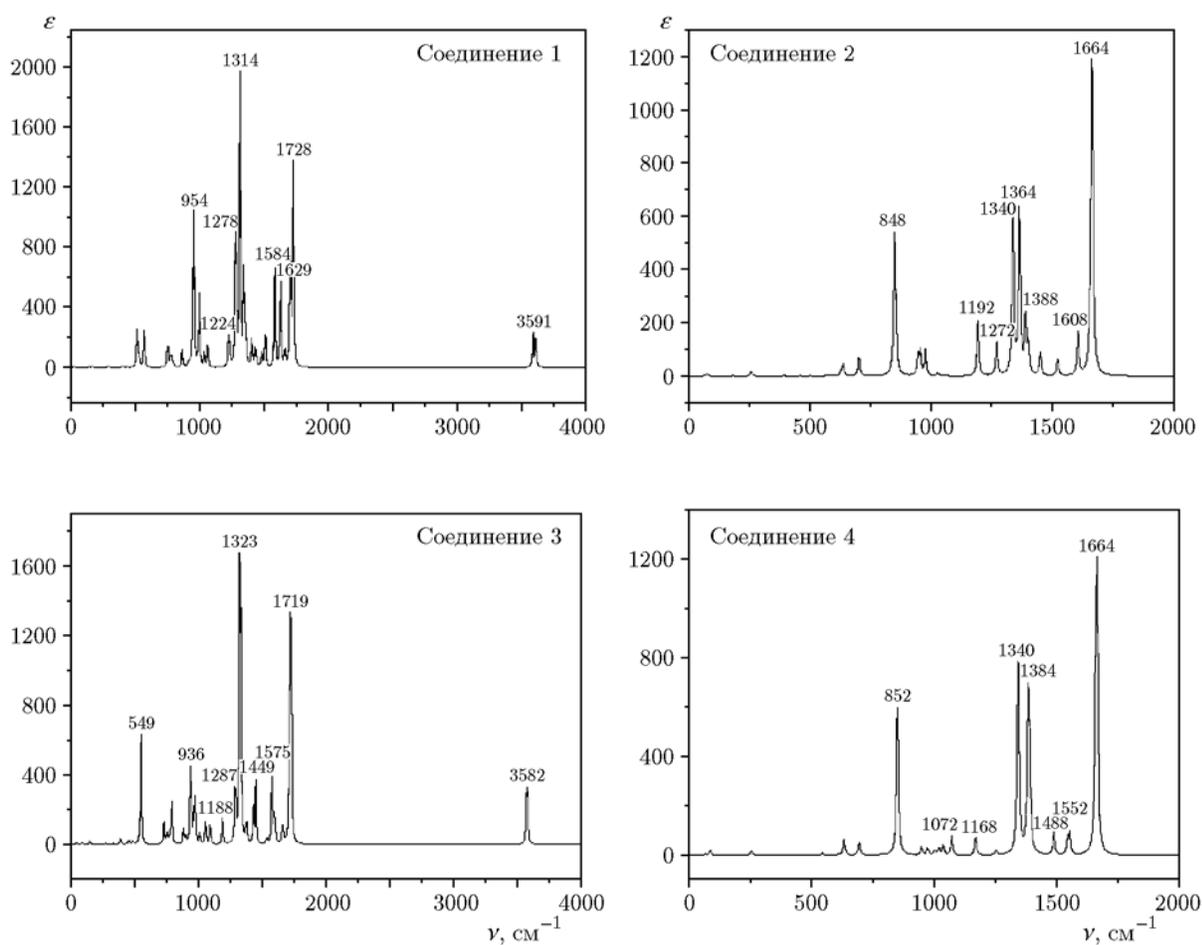


Рис. 5. Вычисленные ИК-спектры исследуемых соединений

Таблица 1

Физико-химические и энергетические свойства исследуемых соединений и модельных взрывчатых веществ

Соединение	Кислородный баланс, %	$\Delta_f H_{298\text{K}}(\text{s})$ , кДж/моль	$\rho_1$ , г/см <sup>3</sup>	$\rho_2$ , г/см <sup>3</sup>	$Q$ , Дж/г	$v_{d1}$ , км/с	$p_{d1}$ , ГПа	$v_{d2}$ , км/с	$p_{d2}$ , ГПа
1	-18.60	293.44	1.94	1.85	5 885	8.84	36.23	8.53	32.73
2	-14.03	209.58	1.91	1.86	6 095	8.64	34.34	8.46	32.31
3	-18.60	260.02	1.87	1.84	5 756	8.71	34.43	8.46	32.21
4	-14.03	190.65	1.97	1.84	6 012	8.79	36.14	8.39	31.65
RDX	-21.62	79.00 [21] 66.2	1.80 [21] 1.81	—	6 274 6 224	8.75 [21] 8.83	34.70 [21] 34.69	—	—
HMX	-21.62	102.41 [21] 77.3	1.90 [21] 1.91	—	6 261 6 187	9.10 [21] 9.16	39.30 [21] 38.51	—	—

Примечания. Кислородный баланс для  $C_aH_bO_c$ :  $1600(c - 2a - b/2)/MW$  ( $MW$  — молекулярная масса),  $\Delta_f H_{298\text{K}}(\text{s})$  — теплота образования,  $\rho_1, \rho_2$  — плотности, вычисленные соответственно методом Монте-Карло и при использовании уравнений [15],  $Q$  — теплота детонации,  $v_{d1}, v_{d2}$  — скорости детонации, предсказанные с использованием значений  $\rho_1, \rho_2$  соответственно,  $p_{d1}, p_{d2}$  — давления детонации, предсказанные с использованием значений  $\rho_1, \rho_2$  соответственно.

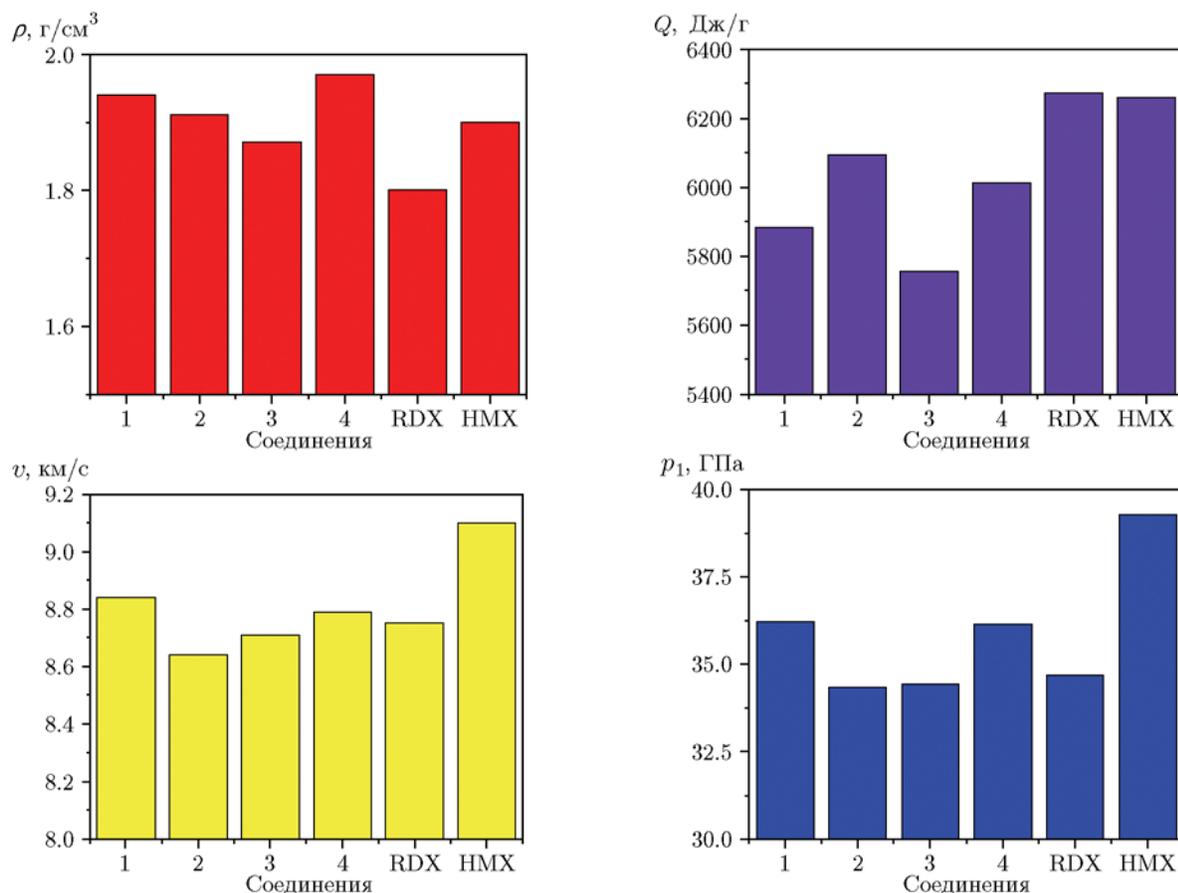


Рис. 6. Общие характеристики исследуемых соединений 1–4 (см. табл. 1) по сравнению с RDX и HMX

наибольшее ее значение имеет соединение 2. В результате исследуемые соединения характеризуются заметными скоростями детонации (8.39 ÷ 8.84 км/с) и высокими давлениями детонации (31.65 ÷ 36.23 ГПа).

Для того чтобы выявить среди исследуемых соединений потенциальных кандидатов в HEDM, мы сравнили их детонационные характеристики с характеристиками RDX и HMX. Как показано на рис. 6, соединения 1 и 4 имеют отличные детонационные характеристики (за исключением теплоты детонации), лучше, чем у RDX. Более того, скорость и давление детонации соединения 1 (соответственно 8.84 км/с и 36.23 ГПа) очень близки к характеристикам соединения HMX, так что соединение 1 является перспективным кандидатом в HEDM нового поколения.

## 2.4. Чувствительность к удару

Чувствительность HEDM к удару играет решающую роль в оценке возможности случайного взрыва от внешнего воздействия, что имеет прямое отношение к безопасности соединений и к возможности их практического применения. Чувствительность к удару ( $H_{50}$ ) определялась в испытаниях с падающим грузом массой 2.5 кг как высота, на которой вероятность взрыва составляет 50 %. Чем больше значение высоты, тем ниже чувствительность к удару. Предыдущие исследования показали, что чувствительность к удару тесно связана с физико-химическими свойствами. В настоящей работе величину  $H_{50}$  определяли по эмпирическим моделям 1–4, в терминах ESP и теплоты детонации, предложенных в работах [17, 18].

Чувствительность исследуемых соедине-

Таблица 2  
Чувствительность к удару исследуемых соединений и модельных взрывчатых веществ

Соединение	$H_{50}$ , см				
	модель 1	модель 2	модель 3	модель 4	эксперимент [18]
1	31	53	35	30	—
2	24	44	30	29	—
3	31	66	35	30	—
4	18	28	30	29	—
RDX	25	35	30	28	24
HMX	27	20	31	28	26

ний к удару представлена в табл. 2. Для сравнения приведены также ее значения для RDX и HMX. Видно, что методы 1, 3 и 4 дают приблизительно сопоставимые результаты, в то время как метод 2 занижает чувствительность к удару. В целом исследуемые соединения имеют приемлемую чувствительность к удару в диапазоне  $H_{50} = 18 \div 66$  см. Для соединений 1 и 3 значения  $H_{50}$  несколько выше, чем для соединений 2 и 4. Это означает, что соединения 2 и 4 более подвержены внешнему ударному воздействию, чем соединения 1 и 3, что хорошо согласуется с данными ESP-анализа. Кроме того, соединение 1 характеризуется самым большим значением  $H_{50}$ , т. е. самой низкой чувствительностью к удару среди исследуемых соединений, а также по сравнению с RDX и HMX. Однако эти результаты следует рассматривать как рекомендательные из-за сложности оценки чувствительности к удару.

## ВЫВОДЫ

Итак, были исследованы соотношения между структурами и свойствами четырех спшитых производных 1,2,4-оксадиазол/1,2,4-оксадиазол и 1,2,4-оксадиазол/1,3,4-оксадиазол при помощи вычислений методом теории функционала плотности. Были исследованы молекулярные структуры, высшие занятые и нижние вакантные орбитали, электростатические потенциалы, ИК-спектры, физико-химические свойства, детонационные характеристики и чувствительность к удару. Полученные результаты показали, что исследованные соединения имеют хороший кислородный баланс ( $-14.03 \div -18.60$  %), высокую теплоту образования ( $190.65 \div 293.44$  кДж/моль)

и высокую кристаллическую плотность ( $1.84 \div 1.94$  г/см<sup>3</sup>). Однако скорость и давление детонации этих соединений несколько ниже, чем у HMX, что может быть следствием низкой теплоты детонации исследуемых соединений. С применением четырех эмпирических методов обнаружено, что все исследованные соединения имеют приемлемые значения чувствительности к удару ( $H_{50} = 18 \div 66$  см). В частности, соединение 1 характеризуется наилучшим соотношением между детонационными характеристиками и чувствительностью, причем энергетические характеристики этого соединения лучше, чем у RDX, а чувствительность к удару меньше, чем у HMX. Можно ожидать, что все исследованные соединения являются кандидатами в HEDM с низкой чувствительностью. Мы надеемся, что наши данные помогут провести более подробные экспериментальные и теоретические исследования HEDM с низкой чувствительностью на основе циклов 1,2,4-оксадиазола и 1,3,4-оксадиазола.

Авторы благодарят за финансовую поддержку университет Лудонг (грант № LB2016030), Фонд естественных наук провинции Шандонг (гранты № ZR2019BA033 и ZR2017PA002) и Национальный фонд естественных наук Китая (гранты № 11772308 и 11647159).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Lin H., Chen J. F., Zhu S. G., et al. Synthesis, characterization, detonation performance, and DFT calculation of HMX/PNO cocrystal explosive // J. Energetic Mater. — 2017. — V. 35, N 1. — P. 95–108.
2. Ма П., Цзинь Я.-Т., У П.-Х., Ху В., Пань Ю., Цзан С.-В., Чжу Ш.-Г. Син-

- тез, молекулярно-динамическое и квантово-химическое моделирование сокристаллической формы тринитротолуол/тринитробензол // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 5. — С. 115–124.
3. **Sun Q., Shen C., Li X., Lin Q. H., et al.** Combination of four oxadiazole rings for the generation of energetic materials with high detonation performance, low sensitivity and excellent thermal stability // *J. Mater. Chem. A.* — 2017. — N 5. — P. 11063–11070.
  4. **Pan Y., Zhu W. H., Xiao H. M.** Theoretical studies of a series of azaoxaisowurtzitane cage compounds with high explosive performance and low sensitivity // *Comput. Theor. Chem.* — 2017. — V. 1114, N 15. — P. 77–86.
  5. **Lin H., Yang D. D., Lou N., et al.** Computational design of high energy density materials with zero oxygen balance: A combination of furazan and piperazine rings // *Comput. Theor. Chem.* — 2018. — V. 1139, N 1. — P. 44–49.
  6. **Lin H., Chen J. F., Cui Y. M., et al.** A DFT-D study on structural, electronic, thermodynamic, and mechanical properties of HMX/MPNO cocrystal under high pressure // *J. Energ. Mater.* — 2017. — V. 35, N 2. — P. 157–171.
  7. **Tamuliene J., Sarlauskas J., Bekesiene S.** Modeling and investigation of new explosive materials based on *N*-(3,5-dimethyl-2,4,6-trinitrophenyl)-1*H*-1,2,4-triazol-3-amine // *J. Mol. Model.* — 2017. — V. 23. — P. 228.
  8. **Olofson R. A., Michelman J. S.** Furazan // *J. Org. Chem.* — 1965. — V. 30. — P. 1854–1859.
  9. **Fu Z. D., Su R., Wang Y., et al.** Synthesis and characterization of energetic 3-nitro-1,2,4-oxadiazoles // *Chem. Eur. J.* — 2012. — V. 18. — P. 1886–1889.
  10. **Tang Y. X., He C. L., Mitchell L. A.** Energetic compounds consisting of 1,2,5- and 1,3,4-oxadiazole ring // *J. Mater. Chem.* — 2015. — V. 3. — P. 23143–23148.
  11. **Wei H., He C. L., Zhang J. H., et al.** Combination of 1,2,4-oxadiazole and 1,2,5-oxadiazole moieties for the generation of high-performance energetic materials // *Angew. Chem. Int. Ed.* — 2015. — V. 127. — P. 9499–9503.
  12. **Hermann T. S., Karaghiosoff K., Klapötke T. M., et al.** Synthesis and characterization of 2,2'-dinitramino-5,5'-bi(1-oxa-3,4-diazole) and derivatives as economic and highly dense energetic materials // *Chem. Eur. J.* — 2017. — V. 23. — P. 12087–12091.
  13. **Yan C., Wang K. C., Liu T. L., et al.** Exploiting the energetic potential of 1,2,4-oxadiazole derivatives: combining the benefits of 1,2,4-oxadiazole framework with various energetic functionalities // *Dalton Trans.* — 2017. — V. 46. — P. 14210–14218.
  14. **Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al.** GAUSSIAN 9 (Revision A.01). — Wallingford CT.: Gaussian, Inc, 2009.
  15. **Politzer P., Martinez J., Murray J. S., et al.** An electrostatic interaction correction for improved crystal density prediction // *Mol. Phys.* — 2009. — V. 107, N 19. — P. 2095–2101.
  16. **Kamlet M. J., Jacobs S. J.** Chemistry of detonation. I. a simple method for calculation detonation properties of C—H—N—O explosives // *J. Chem. Phys.* — 1968. — V. 48. — P. 23–35.
  17. **Pospíšil M., Vávra P., Concha M. C., et al.** A possible crystal volume factor in the impact sensitivities of some energetic compounds // *J. Mol. Model.* — 2010. — V. 16, N 5. — P. 895–901.
  18. **Rice B. M., Hare J. J.** A quantum mechanical investigation of the relation between impact sensitivity and the charge distribution in energetic molecules // *J. Phys. Chem. A.* — 2002. — V. 106, N 9. — P. 1770–1783.
  19. **Kosar B., Albayrak C.** Spectroscopic investigations and quantum chemical computational study of (E)-4-methoxy-2-[(p-tolylimino)methyl]phenol // *Spectrochim. Acta, Part A.* — 2011. — V. 78, N 1. — P. 160–167.
  20. **Murray J. S., Politzer P.** The electrostatic potential: an overview // *Comp. Mol. Sci.* — 2011. — V. 1, N 2. — P. 153–163.
  21. **Politzer P., Politzer J. S.** Some perspectives on estimating detonation properties of C, H, N, O compounds // *Cent. Eur. J. Energy Mater.* — 2011. — V. 8, N 3. — P. 209–220.

Поступила в редакцию 29.03.2018.

После доработки 28.06.2018.

Принята к публикации 11.07.2018.