

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЗАВИСИМОСТИ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ СОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИАЗОТИСТЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ ОТ ИХ СТРОЕНИЯ

© Д. Б. Лемперт¹, В. М. Волохов^{1,*}, И. Н. Зюзин¹, А. И. Казаков¹,
А. В. Волохов¹, Е. С. Амосова¹, Т. С. Зюбина¹, Л. С. Яновский^{1,2,3}

¹ Институт проблем химической физики РАН,
142432, Московская обл., г. Черноголовка, пр. Академика Семенова, д. 1
² Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова,
111116, г. Москва, ул. Авиамоторная, д. 2

³ Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4

* E-mail: vvm@icp.ac.ru

Поступила в Редакцию 29 мая 2020 г.
После доработки 14 августа 2020 г.
Принята к публикации 31 августа 2020 г.

В последние десятилетия химия ракетных топлив активно развивается в направлении поиска новых высокоэнтальпийных полиазотистых соединений, поскольку их использование может обеспечить более высокие энергетические характеристики порохов, взрывчатых составов, ракетных топлив, чем применение традиционных низкоэнтальпийных окислителей с высоким содержанием кислорода, например, перхлората аммония. Прежде чем начинать поиск методов синтеза новых энергоемких соединений, следует заранее представлять себе уровень энергетических характеристик, который можно будет обеспечить при использовании этих соединений. Поскольку энтальпия образования является одним из основных параметров, определяющих энергетический потенциал компонента, разработано много методов теоретической оценки энтальпии образования. В работе представлено исследование закономерностей зависимости величин энтальпии образования девяти сопряженных N-гетероциклов от их строения и показаны принципы создания твердых ракетных топлив с максимальной баллистической эффективностью на базе каждого из изученных соединений. Расчеты величин энтальпии образования в газовой фазе исследуемых веществ выполнены с использованием программы Gaussian 09.

Ключевые слова: сопряженные N-гетероциклы; энтальпия образования; твердое ракетное топливо; прямоточные воздушно-реактивные двигатели

DOI: 10.31857/S0044461820120075

Синтезу и исследованию свойств высокоэнтальпийных полиазотистых гетероциклов посвящено множество современных публикаций по энергоемким соединениям. Среди таких гетероциклов особое место занимают сопряженные гетероциклы [1–21]. Одним

из важнейших критериев энергетической эффективности химического соединения служит стандартная энтальпия образования (ΔH_f°). Поэтому определение этого параметра, как экспериментальное, так и расчетное, становится ключевой задачей для дальнейшей

оценки эффективности применения того или иного вещества как компонента энергетических материалов (взрывчатые вещества, ракетные топлива, пороха, пиротехнические композиции и пр.).

Настоящая работа посвящена анализу эффективности исследованных соединений как компонентов твердых топлив. Энтальпии образования в твердом состоянии $[\Delta H_f^\circ(s)]$ ряда высокоэнтальпийных сопряженных гетероциклов, содержащих в молекуле фрагменты тетразина, фуразана, фуроксана, триазола, получены путем пересчета энтальпий образования в газовой фазе, вычисленных с применением квантово-химических расчетов высокого уровня G4 и G4(MP2). Метод G4(MP2) дает величины ΔH_f° , отличающиеся от G4 на 12–25 кДж·моль⁻¹ (что для соединений с ΔH_f° на уровне 500–1000 кДж·моль⁻¹ составляет 1–3%), но метод G4(MP2) в несколько раз быстрее, чем G4.

Цель работы — установление зависимости величины энтальпии образования ряда высокоэнтальпийных N-гетероциклов от их строения (тип гетероцикла, наличие боковых заместителей, тип заместителей) для понимания, в каком направлении следует вести дальнейший поиск и синтез новых энергетических компонентов для создания ракетных топлив с повышенными баллистическими характеристиками.

Методическая часть

Постановка задачи

Во многих задачах термодинамики важно знать, как меняется ΔH_f° вещества при небольших изменениях структуры. Замещение определенного фрагмента в молекуле на другой фрагмент, как правило, сопровождается изменением мольной ΔH_f° на практически постоянную величину. Например, замещение атома водорода в молекуле алкана $R'(R'')(R''')C-H$ на нитрогруппу или на атом фтора с образованием $R'(R'')(R''')C-NO_2$ или $R'(R'')(R''')C-F$ ведет к снижению ΔH_f° в жидком состоянии $[\Delta H_f^\circ(l)]$ на ~62.8 и 200.8 кДж·моль⁻¹ соответственно. Аналогичное замещение на группу N_3 с образованием $R'(R'')(R''')C-N_3$ приводит к росту на 338.9 кДж·моль⁻¹ [22]. Такие изменения называют аддитивными величинами, вкладом или $\Delta\Delta H_f^\circ$. Системы оценки $\Delta\Delta H_f^\circ$ для разнообразных групп разработаны как для жидкостей [22], так и для твердых соединений [23, 24].

На величины $\Delta\Delta H_f^\circ$ может существенно влиять окружение атома углерода, поэтому для разного окружения (первичный, вторичный или третичный углерод в алканах, в бензоле, некоторых гетероциклах и т. д.) величины $\Delta\Delta H_f^\circ$ разнятся. Применение широко

известных $\Delta\Delta H_f^\circ$ различных фрагментов для оценки $\Delta H_f^\circ(s)$ конкретного соединения часто ненадежно, а для представителей некоторых классов соединений просто невозможно. В частности, для большинства сопряженных гетероциклов $\Delta\Delta H_f^\circ$ отсутствуют, поскольку отсутствуют экспериментальные $\Delta H_f^\circ(s)$ для таких гетероциклов. Грубые же допущения о замене неизвестных $\Delta\Delta H_f^\circ$ известными $\Delta\Delta H_f^\circ$ отдаленно похожих фрагментов могут привести к неприемлемым ошибкам при оценке $\Delta H_f^\circ(s)$ конкретного соединения.

Поэтому величины $\Delta H_f^\circ(s)$ соединений (I)–(IX) (табл. 1), в которых основными структурообразующими фрагментами являются кольца фуразана, фуроксана, тетразина и триазола, становятся исходным материалом для получения информации о том, как изменяется $\Delta H_f^\circ(g)$ таких структур при замене тех или иных фрагментов молекулы на другие.

Для исследования энергетических возможностей высокоэнтальпийных полиазотистых соединений как компонентов твердых ракетных топлив необходимо знать $\Delta\Delta H_f^\circ(s)$ соединения в том фазовом состоянии, в каком оно находится в композиции, т. е. в данном случае в твердой фазе.

Для оценки $\Delta H_f^\circ(s)$ энергоемких соединений используют:

1. Экспериментальные величины теплоты сгорания в кислороде [25]. Это классический метод, но даже небольшие примеси в сжигаемом образце (если неизвестна их природа и содержание) существенно влияют на достоверность результата, так как исследователь предполагает *a priori*, что перед ним образец 100%-ной чистоты и его элементный состав соответствует предполагаемой формуле, и ведет расчет $\Delta H_f^\circ(s)$ из предполагаемого элементного состава и полученной величины тепловыделения при сжигании образца. И даже если тепловыделение при сжигании измерено с идеальной точностью, то использование в расчете неверного элементного состава ведет к большим ошибкам в полученном результате.

2. Расчетные полуэмпирические методы с использованием так называемых аддитивных величин $\Delta\Delta H_f^\circ(s)$ молекулярных фрагментов, которые ранее были получены на базе анализа множества экспериментальных данных [23, 24]. Этот метод использует усредненные величины аддитивных вкладов $\Delta\Delta H_f^\circ$ фрагментов и поэтому уже недостаточно точен. Для многих фрагментов величин $\Delta\Delta H_f^\circ$ нет вообще из-за отсутствия экспериментальной базы.

3. Квантово-химические *ab initio* методы расчета стандартной энтальпии образования соединения в газовой фазе $\Delta H_f^\circ(g)$. Важными достоинствами квантово-химических методов являются высокая точ-

ность (менее 4 кДж·моль⁻¹ для метода G4) [26] и возможность оценивать энтальпию образования еще не синтезированных веществ. Расчет стандартной энтальпии образования соединения в твердой фазе производится по формуле

$$\Delta H_f^\circ(s) = \Delta H_f^\circ(g) - \Delta H_{\text{sub}}^\circ,$$

где $\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ — энтальпия сублимации.

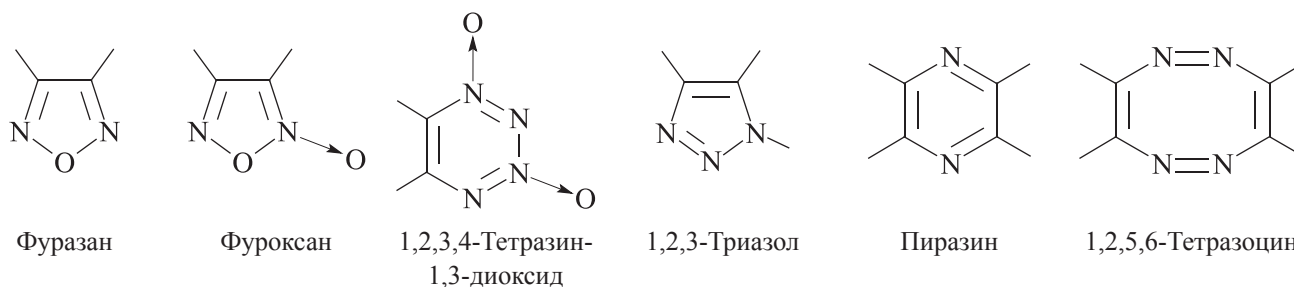
Величина $\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ может быть определена экспериментально из температурной зависимости давления насыщенных паров синтезированного соединения $\ln P = A - \Delta H_{\text{sub}}^\circ/RT$. Для этого соединение должно быть реально синтезировано и иметь измеримые величины давления паров при температурах, где еще не наблюдается его заметного разложения. Для синтезированных соединений исследователями для оценки величины $\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ также широко применяется метод Трутона (например, [27]), связывающий величину $\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ соединения с его температурой плавления T_m (К) по формуле $\Delta H_{\text{sub}}^\circ = 0.188T_m$, кДж·моль⁻¹. Если соединение начинает разлагаться до достижения плавления, то в формулу подставляется температура начала разложения.

Для оценки $\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ несинтезированных соединений есть полуэмпирический метод, в котором используют аддитивные величины $\Delta\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ фрагментов [28,

29]. Данный метод подобен методу оценки $\Delta H_f^\circ(s)$ суммированием энергетических инкрементов фрагментов, входящих в состав молекулы, и ему присущи те же недостатки: использование усредненных величин аддитивных вкладов $\Delta\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ фрагментов, отсутствие в литературе величин $\Delta\Delta H_{\text{sub}}^\circ$ для ряда фрагментов. Для несинтезированных соединений также широко используется подход Политцера [30], модифицированный в дальнейшем в работах Дорофеевой [31], когда различные макроскопические свойства (в частности, энтальпия сублимации), зависящие от межмолекулярных взаимодействий, предсказываются на основе их корреляции с параметрами электростатического потенциала на молекулярной поверхности.

Объекты исследования

Для исследования выбрано девять высокоэнтальпийных N-гетероциклов (табл. 1), молекулы которых образованы конденсацией двух ядер фуразана с пирaziном (I)–(III) и 1,2,5,6-тетразоцином (IV), а также конденсацией ядра 1,2,3,4-тетразин-1,3-диооксида с ядрами фуразана (1,2,5-оксадиазола), фуроксана (1,2,5-оксадиазол-2-оксида), 1,2,3-триазола и с самим собой (V)–(VIII).



Многие из представленных в табл. 1 соединений к моменту написания статьи уже были известны. Для [1,2,5]оксадиазола[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-1,5,7-триоксида (X) [это структурный изомер соединения (VI)] был разработан многостадийный метод синтеза. Однако при попытке его реализации на послед-

ней стадии из реакционной смеси удалось выделить только соединение (V) и смесь азофуроксанов [14]. Согласно квантово-химическим расчетам, разница в $\Delta H_f^\circ(g)$ между изомерами (VI) и (X) ничтожная (0.17 кДж·моль⁻¹), а барьер взаимопревращений между ними довольно низок (69.9 кДж·моль⁻¹) [5].

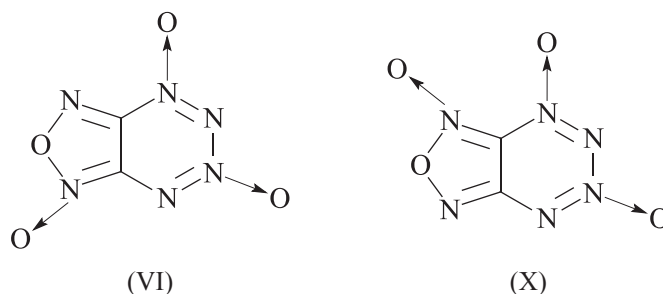


Таблица 1

Соединения, выбранные для расчетов, и их характеристики (коэффициент обеспечения молекулы кислородом α , содержание водорода и азота, некоторые физические свойства)

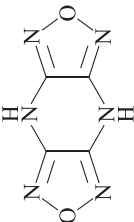
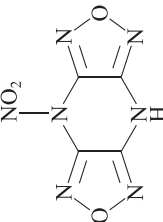
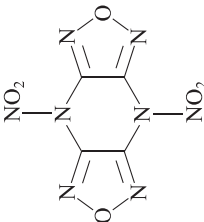
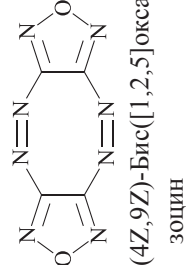
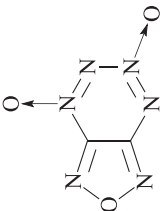
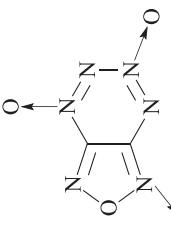
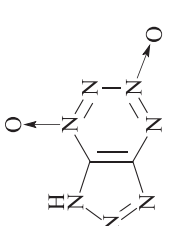
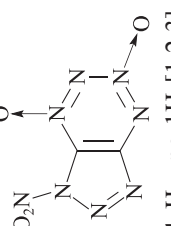
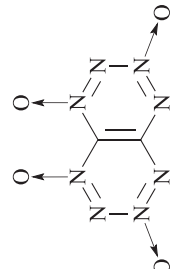
Соединение	Формула и название	Брутто-формула	α^*	Содержание, %		Характеристика
				H	N	
(I)**	 4H,8H-Бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пирозин	$C_4H_2N_6O_2$	0.22	1.21	50.69	т. пл. 294°C с разл. [6], 294–296°C с разл. [7], $\rho = 1.963 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ [13]
(II)**	 4-Нитро-4H,8H-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пирозин	$C_4HN_7O_4$	0.47	0.48	46.45	т. пл. 180°C с разл. [10]
(III)**	 4,8-Динитро-4H,8H-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пирозин	$C_4N_8O_6$	0.75	0	43.76	т. пл. 245–255°C с разл. [10] [смесь продуктов, содержащая соединение (III), по данным масс-спектрометрии]
(IV)**	 (4Z,9Z)-Бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-с:3',4'-g][1,2,5,6]тетра-золин	$C_4N_8O_2$	0.25	0	58.33	т. пл. 53.6–54.5°C [12], $\rho = 1.758 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ [12]
(V)**	 [1,2,5]Оксадиазоло[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксид (ФТДО)	$C_2N_6O_3$	0.75	0	53.85	т. пл. 110–112°C с разл. [4], $\rho = 1.84 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ [15]

Таблица 1 (продолжение)

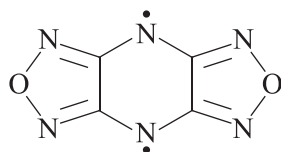
Соединение	Формула и название	Брутто-формула	α^*	Содержание, %		Характеристика
				H	N	
(VI)	 [1,2,5]Оксидазол[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксид	$C_2N_6O_4$	1.0	0	48.84	Безупешная попытка синтеза и квантово-химические расчеты [5, 14], $\rho = 1.88 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ [5] (расчетная величина)
(VIIa)**	 1H-[1,2,3]Триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид	$C_2HN_7O_2$	0.44	0.65	63.23	
(VIII)	 1-Нитро-1H-[1,2,3]Триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид	$C_2N_8O_4$	1	0	56.01	
(IX)**	 1,2,3,4-Тетразино[5,6-е][1,2,3,4]тетразин-1,3,6,8-тетраоксид (ТТТО)	$C_2N_8O_4$	1	0	56.01	т. пл. 183–186°C с разл. [2 (sup. inf.)]

* Для соединений с брутто-формулой $C_xH_yN_zO_w$ $\alpha = 2w/(4x + y)$.

** Соединение синтезировано.

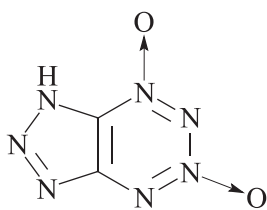
Динитропроизводное (III) можно отнести к реально синтезированным соединениям лишь с большой долей условности, поскольку в чистом виде оно выделено не было. Идентификация соединения (III) была сделана только по иону с m/z 256 в масс-спектре смеси продуктов нитрования дикалиевой соли соеди-

нения (I) [10]. При нитровании же самого соединения (I) динитропроизводное (III) получить не удалось. При действии любых нитрующих агентов и некоторых других окислителей с почти количественным выходом образуется нетривиальный бирадикал (XI) [8–10] — черный порошок с т. пл. 145°C (с разл.) [10].

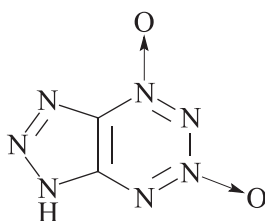


(XI)

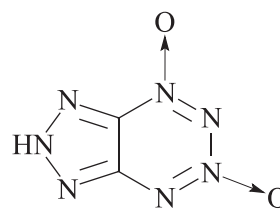
Соединение (VII) может существовать в виде трех таутомеров (VIIa–с).



(VIIa)



(VIIb)



(VIIc)

С помощью квантово-химических методов расчета было показано, что таутомер (VIIa) превосходит таутомеры (VIIb) и (VIIc) по $\Delta H_f^\circ(g)$ на 20.5 и 15.9 кДж·моль⁻¹ соответственно [3].

Из соединений (I)–(IX) $\Delta H_f^\circ(s)$ экспериментально измерена только для соединений (I) (424.2 ± 4.0 кДж·моль⁻¹ [15]) и (V) (673.2 ± 9.6 кДж·моль⁻¹ [16]). Экспериментальные величины $\Delta H_f^\circ(s)$ соединений (I) и (V) могут служить референтными величинами для оценки расчетных методов определения $\Delta H_f^\circ(s)$ сопряженных гетероциклов.

Методы квантово-химического расчета $\Delta H_f^\circ(g)$

Расчет величины $\Delta H_f^\circ(g)$ проведен методом атомизации исследуемых молекул с применением квантово-химической теории высокого уровня, а именно G4 и G4(MP2) [32, 33] с помощью программы Gaussian 09. В настоящей работе мы использовали энтальпии образования газообразных атомов и термические поправки из термодинамических таблиц NIST-JANAF.*

Расчет оптимизированной геометрии молекул в данной работе проводился в рамках теории функционала плотности методом B3LYP/6-311+G(2d,p).

* NIST-JANAF Thermochemical tables. <https://janaf.nist.gov>

Оптимизированные геометрии каждой молекулы в графическом виде представлены на рис. 1.

Самые низкие и наиболее близкие к экспериментальным значениям (за редкими исключениями), если таковые имеются, значения $\Delta H_f^\circ(g)$ получены методом G4 (табл. 2). Это связано с тем, что в ряду методов B3LYP/6-311+G(2d,p), G4(MP2) и G4 точность учета корреляционного взаимодействия электронов возрастает. С этим же связано возрастание времени счета.

При анализе эффективности исследованных соединений как компонентов ракетных топлив для оценки величин $\Delta H_f^\circ(s)$ за базу принимали именно величины $\Delta H_f^\circ(g)$, рассчитанные методом G4.

Методология оценки эффективности исследуемых высокоэнергетических соединений

Энергетические возможности соединений (I)–(IX) как компонентов ракетных топлив оценивали двумя разными методами в зависимости от величины коэффициента насыщенности компонента кислородом α .

Оценка эффективности исследуемых соединений как компонентов смесевых твердых ракетных топлив. Для соединений (II), (III), (V), (VI), (VIII) и (IX) с величиной $\alpha > 0.4$ проводили оценку их эффективности в качестве компонентов смесевых твердых ра-

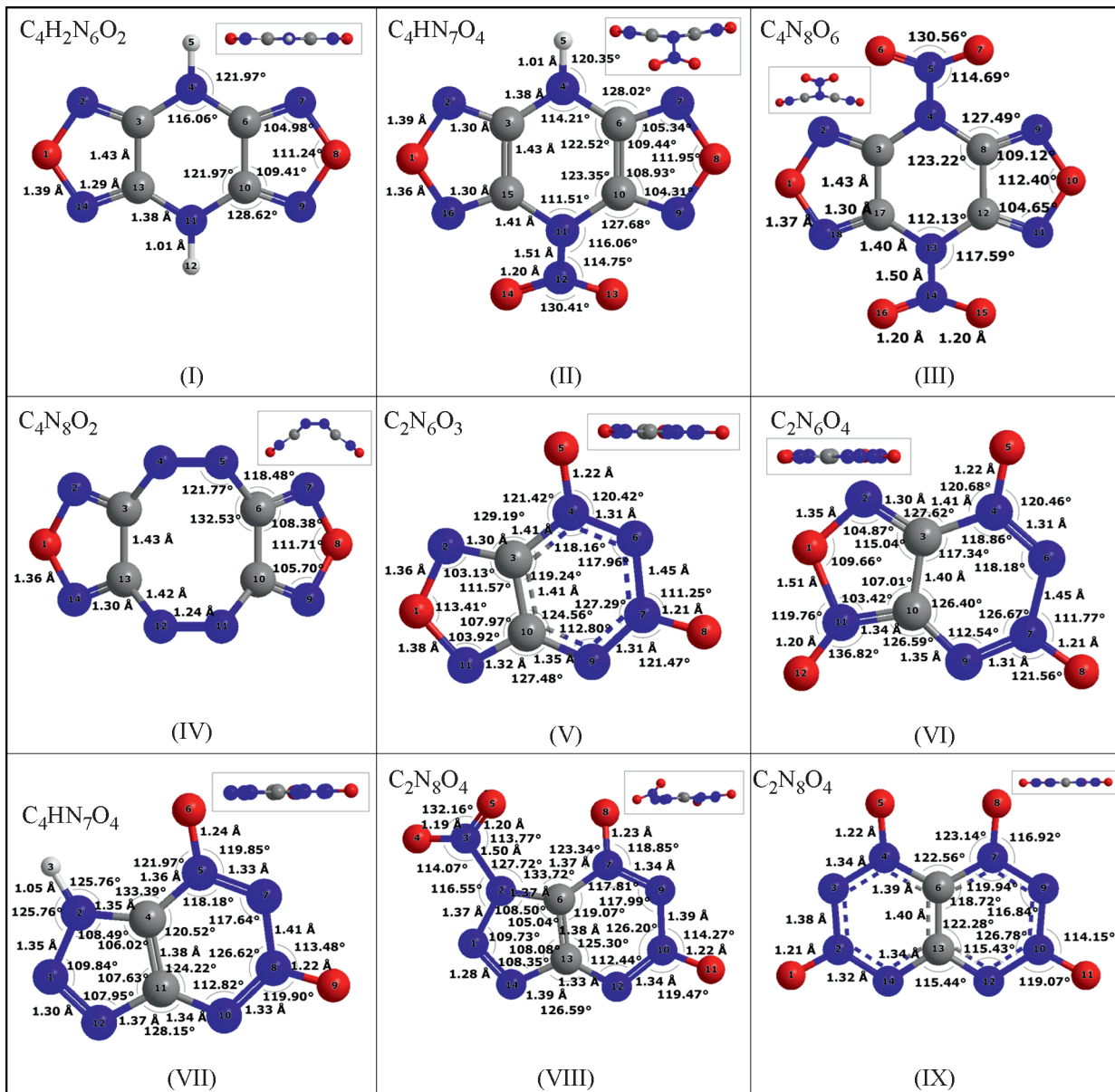


Рис. 1. Геометрические параметры рассчитанных структур.

кетных топлив. Рассматривали композиции смесевых твердых ракетных топлив без металла (при применении столь высокоэнтальпийных компонентов, как рассматриваемые, нет необходимости включать в рецептуру алюминий [34]); соблюдали условие, что содержание связующего должно быть не ниже 18 об%.

При α основного компонента < 0.8 необходимо применять активное связующее, например, на базе нитроэфирного пластификатора ($C_{18.96}H_{34.64}N_{19.16}O_{29.32}$; $\Delta H_f^\circ = -757$ кДж·кг $^{-1}$; $\rho = 1.49$ г·см $^{-3}$) [35]. Если $\alpha > 1.2$, то больше подходит углеводородное связующее, например $C_{72.15}H_{119.21}O_{0.68}$ ($\Delta H_f^\circ = -393$ кДж·кг $^{-1}$; $\rho = 0.92$ г·см $^{-3}$) [35]). В случае компонентов с промежуточными значениями α

($0.8 < \alpha < 1.2$) наиболее оптимальный подход — подбор смеси активного и углеводородного связующих, которая обеспечивает максимальное значение I_{sp} при общем объемном содержании связующего примерно 18% [36].

Компоненты с $\alpha < 0.3$ даже при очень высоких величинах ΔH_f° (вплоть до 4000 кДж·кг $^{-1}$) неэффективны как основные наполнители топлива, но могут применяться как эффективная высокоэнтальпийная добавка к низкоэнтальпийным окислителям с $\alpha > 1.5$ (например, перхлорат аммония) [37]. Во всех композициях смесевых твердых ракетных топлив содержание связующего должно быть не ниже 18 об%, что соответствует ~ 15 мас% для активного

Таблица 2
Расчетные величины $\Delta H_f^\circ(g)$ исследуемых соединений, кДж·моль⁻¹

Метод	Соединение*								
	(I)	(II)	(III)	(IV)	(V)	(VI)	(VII)	(VIII)	(IX)
V3LYP/6-311+G(2d,p)	570.3	697.9	835.5	1141.3	754.4	756.0	764.4	915.5	967.8
G4(MP2)	530.5	639.7	756.9	1088.3	737.6	747.7	758.1	897.5	969.9
G4	515.5	618.8	730.5	1077.0	724.7	731.4	746.4	879.1	951.4

* (I) — 4Н,8Н-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-е]пиразин;
 (II) — 4-нитро-4Н,8Н-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-е]пиразин;
 (III) — 4,8-динитро-4Н,8Н-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-е]пиразин;
 (IV) — (4Z,9Z)-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-с:3',4'-g][1,2,5,6]тетразоцин;
 (V) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксид;
 (VI) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксид;
 (VII) — 1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид;
 (VIII) — 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид;
 (IX) — [1,2,3,4]тетразино[5,6-е][1,2,3,4]тетразин 1,3,6,8-тетраоксид.

и ~10 мас% для углеводородного связующего соответственно.

Эффективность соединений как компонентов смесевых твердых ракетных топлив оценивали по величине I_{sp} бинарных рецептур основной компонент + связующее. Расчеты величин I_{sp} и температуры в камере сгорания T_c проводили с помощью стандартной программы расчета термодинамических равновесий ТЕРРА [38] при условии, что давления в камере сгорания и на срезе сопла равны 4.0 и 0.1 МПа соответственно.

Оценка эффективности исследуемых соединений как компонентов-диспергаторов топлив для прямо-

точных воздушно-реактивных двигателей. Показано [39], что высокоэнтальпийные полиазотистые компоненты с низкой величиной α (0.2–0.3) могут быть успешно применены в качестве диспергатора твердых топлив для прямоточных воздушно-реактивных двигателей, а компонент (I) был оценен как один из наиболее эффективных из множества других [15]. В настоящей работе эффективность компонента (IV) [$\alpha = 0.25$ при очень высокой $\Delta H_f^\circ(s)$, равной 4445.5 кДж·кг⁻¹] как диспергатора топлив прямоточных воздушно-реактивных двигателей оценивали с помощью эмпирической формулы [40]

$$L_{rel} = 1.185 - 0.2847C_N - 0.3537C_C - 0.3543C_O + 0.1384\rho + 1.1788 \cdot 10^{-5} \Delta H_f^\circ(s), \quad (1)$$

где L_{rel} — относительная дальность полета летательного аппарата типа Метеор, снаряженного оптимизированным модельным составом бор + каучук + диспергатор (при условии, что массовая доля каучука не ниже 30% и адиабатическая температура превращения топлива в отсутствие внешнего окислителя не ниже 2000 К) сравнительно с таким же оптимизированным топливом, но на базе перхлората аммония как диспергатора; C_N , C_C , C_O — массовые доли N, C, O в соединении; ρ (г·см⁻³) и $\Delta H_f^\circ(s)$ (кДж·кг⁻¹) — плотность и энтальпия образования диспергатора соответственно.

Обсуждение результатов

Анализ зависимостей энтальпии образования исследуемых соединений от замены одного фрагмента

другим. Анализируя полученные величины $\Delta H_f^\circ(g)$ и $\Delta H_f^\circ(s)$ (табл. 3), можно отметить ряд закономерностей.

— Замещение одного из двух атомов водорода в молекуле (I) на нитрогруппу [переход (I) → (II)] повышает $\Delta H_f^\circ(s)$ соединения (II) по сравнению с (I) на 109.6 кДж·моль⁻¹. Замещение второго атома водорода повышает $\Delta H_f^\circ(s)$ соединения (III) по сравнению с (II) на 98.3 кДж·моль⁻¹. Различие между последовательными изменениями в $\Delta H_f^\circ(s)$ невелико (11.3 кДж·моль⁻¹) и отражает тот факт, что при введении очередной нитрогруппы в молекулу, когда эти группы расположены относительно далеко друг от друга, их дестабилизирующее взаимодействие несущественно [22].

— Введение N-оксидной связи в фуразановое кольцо, аннелированное с тетразин-1,3-диоксидным

Таблица 3

Величины рассчитанных энтальпий образования в газовой фазе, литературные данные по энтальпиям образования в твердой и газовой фазах, рассчитанные энтальпии сублимации и рекомендованные энтальпии образования в твердой фазе

Соединение*	Энтальпия образования в газовой фазе $\Delta H_f^{\circ}(g)$, кДж·моль ⁻¹		Энтальпия сублимации $\Delta H_{\text{sub}}^{\circ}$, кДж·моль ⁻¹		Энтальпия образования в твердой фазе $\Delta H_f^{\circ}(s)$, кДж·моль ⁻¹ , литературные данные	Рекомендованная энтальпия образования в твердой фазе $\Delta H_f^{\circ}(s)$, кДж·моль ⁻¹ /кДж·кг ⁻¹
	данные настоящей работы	литературные данные	по формуле $\Delta H_{\text{sub}}^{\circ} = \Delta H_f^{\circ}(g) - \Delta H_f^{\circ}(s)$ или по [30]	по формуле $\Delta H_{\text{sub}}^{\circ} = 0.188T_m$		
(I)	515.5		515.5 – 423.8 = 91.6	106.7	390.8 [41] 423.8 [15]	423.8/2551.5
(II)	618.8			85.4		533.4/2526.8
(III)	730.5		730.5 – 631.8 = 98.7	99.2	631.8 [41]	631.8/2467.0
(IV)	1077.0		1077.0 – 853.5 = 223.5 1077.0 – 878.6 = 198.4	257.7	853.5 [12] 878.6 [46]	853.5/4443.0
(V)	724.7	725.1 [42] 722.2 [44]	75.3 [42] 63.2 [44] 724.7 – 659.0 = 65.7	72.4	649.8 [42] 673.2 [16] 674.5 [43] 659.0 [44]	659.0/4423.0
(VI)	731.4			72.4		659.0/3830.3
(VII)	746.4			79.9		666.5/4297.2
(VIII)	879.1			79.9		799.1/3993.5
(IX)	951.4	951.0 [42] 937.2 [45]	86.2 [42] 74.5 [45]	86.2	865.3 [42] 862.7 [45]	865.3/4325.0

* (I) — 4Н,8Н-бис(1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пипразин;
 (II) — 4-нитро-4Н,8Н-бис(1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пипразин;
 (III) — 4,8-динитро-4Н,8Н-бис(1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-e]пипразин;
 (IV) — (4Z,9Z)-бис(1,2,5]оксадиазоло)[3,4-с:3',4'-g][1,2,5,6]тетразолин;
 (V) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксид;
 (VI) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-е][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксид;
 (VII) — 1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид;
 (VIII) — 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-е][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид;
 (IX) — [1,2,3,4]тетразино[5,6-е][1,2,3,4]тетразин 1,3,6,8-тетраоксид.

кольцом [переход (V) → (VI)], понижает $\Delta H_f^\circ(s)$ на 14.2 кДж·моль⁻¹. Это наблюдение находится в согласии с тем, что энтальпия образования фуразановых производных примерно на 14.6 кДж·моль⁻¹ больше соответствующей величины для фуроксановых производных [47].

— Замена фуразанового кольца в молекуле (V) на 1,2,3-триазольный цикл [переход (V) → (VII)] повышает $\Delta H_f^\circ(s)$ на 7.5 кДж·моль⁻¹. Замещение атома водорода в 1,2,3-триазольном цикле молекулы (VII) на нитрогруппу [переход (VII) → (VIII)] повышает $\Delta H_f^\circ(s)$ на 132.6 кДж·моль⁻¹. Замещение одного из двух тетразин-1,3-диоксидных циклов в молекуле (IX) на 1,2,3-триазольный цикл [переход (IX) → (VII)] снижает $\Delta H_f^\circ(s)$ на 198.7 кДж·моль⁻¹.

— Замена двух мостиков $>NH$ между фуразановыми циклами на диазеновые мостики $=N=N-$ [переход (I) → (IV)] повышает $\Delta H_f^\circ(s)$ на 429.7 кДж·моль⁻¹, т. е. на 214.9 кДж·моль⁻¹ при замене каждого из мостиков $>NH$.

Эти закономерности можно использовать для предварительной оценки $\Delta H_f^\circ(s)$ модельных соединений.

Мы провели сравнение полученных нами величин $\Delta H_f^\circ(g)$ в газовой фазе для соединений из табл. 1 с известными в литературе величинами $\Delta H_f^\circ(g)$ и $\Delta H_f^\circ(s)$ как экспериментальными, так и расчетными (табл. 3). Установлено, что величины $\Delta H_f^\circ(g)$ соединений (V) и (IX), рассчитанные в настоящей работе и авторами работ [4, 7, 8] одинаковым методом по базе G4, совпадают, что позволяет считать достоверными рассчитанные в настоящей работе величины $\Delta H_f^\circ(g)$ для оставшихся семи соединений. Рассчитанные величины $\Delta H_f^\circ(g)$ для соединений (II) и (VII) были использованы для оценки их $\Delta H_f^\circ(s)$ при предварительном расчете ΔH_{sub}° по формуле Трутона. В качестве оценки ΔH_{sub}° еще не синтезированных соединений (VI) и (VIII) взяты ΔH_{sub}° соединений (V) и (VII) соответственно, так как строение этих соединений попарно достаточно близко. Следует особо отметить, что даже если допущена ошибка в ΔH_{sub}° в пределах ± 21 кДж·моль⁻¹ при величине молекулярной массы от ~150 до 250 Да [соединения (I)–(IX)], то ошибка в оценке $\Delta H_f^\circ(s)$ составит от 84 до ~126 кДж·кг⁻¹. Такая ошибка в $\Delta H_f^\circ(s)$ компонента, входящего в рецептуру даже в количестве 85%, приводит к отклонению в величине удельного импульса I_{sp} не более 0.006–0.009%. Величины ΔH_{sub}° , рассчитанные по формуле Трутона и найденные по разности рассчитанной $\Delta H_f^\circ(g)$ и экспериментальной $\Delta H_f^\circ(s)$, хорошо согласуются между собой (табл. 3). Это свидетельствует о правомочности расчета ΔH_{sub}° по формуле Трутона и последующей оценки $\Delta H_f^\circ(s)$.

Полученные таким путем величины $\Delta H_f^\circ(s)$ могут быть использованы при расчете энергетических возможностей соединений (II), (VI), (VII) и (VIII). При аналогичном расчете энергетических возможностей соединений (I), (III), (IV), (V) и (IX) следует использовать наиболее достоверные литературные значения их $\Delta H_f^\circ(s)$ (табл. 3).

Соединения (I)–(IX), несмотря на многое подобное в структуре, существенно отличаются друг от друга по величинам α (от 0.22 до 1.0), по величинам $\Delta H_f^\circ(s)$ (от ~2500 до 4450 кДж·кг⁻¹) и содержанию водорода (от 0 до 1.62%). И рост каждой из этих величин при прочих равных условиях повышает энергетические возможности компонента. Поэтому беглый взгляд на характеристики исследуемых соединений не дает представления об их потенциале, требуется более глубокий анализ.

Соединения (VI), (VIII) и (IX) характеризуются величинами α , равными 1.0, следовательно, как было отмечено выше, оптимальным связующим является смесь активного и углеводородного связующих в соотношении, зависящем от характеристик исследуемых соединений [$\Delta H_f^\circ(s)$, доля водорода, α , доля азота]. В табл. 4 и на рис. 2 представлены расчетные данные по величинам удельного импульса I_{sp} , достигаемым составами исследуемый компонент +

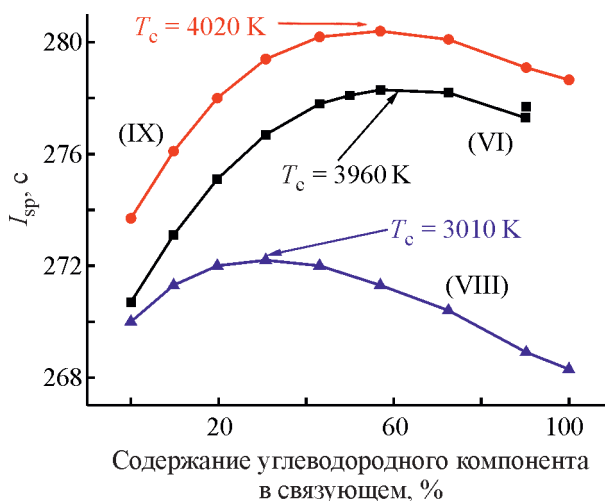


Рис. 2. Зависимость I_{sp} системы высокоэнтальпийный компонент (VI), (VIII) или (IX) с 18 об% связующего от массовой доли углеводородного компонента во всем связующем.

(VI) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*e*][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксид; (VIII) — 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]-тетразин-5,7-диоксид; (IX) — [1,2,3,4]тетразино[5,6-*e*]-[1,2,3,4]тетразин-1,3,6,8-тетраоксид.

Стрелками на графике указан оптимальный состав связующего и достигаемая температура в камере сгорания T_c .

Таблица 4

Величины I_{sp} и T_c составов на базе смесового связующего (активное с углеводородным) с одним из соединений (VI), (VIII) или (IX)

Активное связующее, %	Углеводородное связующее, %	% углеводородного компонента в связующем	Исследуемое соединение,* %	Плотность топлива ρ , г·см ⁻³	Объемная доля связующего, %	Температура в камере сгорания T_c , К	Удельный импульс I_{sp} , с
Соединение (VI) (C ₂ N ₆ O ₄)							
15	0	0.0	85	1.785	18.0	3940	271.2
11	2.7	19.7	86.3	1.755	18.1	3975	275.6
7	5.3	43.1	87.7	1.728	18.1	3986	278.3
5	6.6	56.9	88.4	1.715	18.1	3980	278.8
3	7.9	72.5	89.1	1.702	18.0	3965	278.7
0	9.9	90.1	90.1	1.682	18.1	3925	277.8
6	6	50.0	88	1.720	18.1	3983	278.6
8	8	50.0	84	1.681	23.7	3880	276.4
9	9	50.0	82	1.662	26.3	3810	274.3
10	10	50.0	80	1.644	28.9	3716	271.8
Соединение (IX) (C ₂ N ₈ O ₄)							
15	0	0.0	85	1.785	18.0	3977	273.5
11	2.7	19.7	86.3	1.755	18.1	4014	277.8
7	5.3	43.1	87.7	1.728	18.1	4023	280.0
5	6.6	56.9	88.4	1.715	18.1	4017	280.2
3	7.9	72.5	89.1	1.702	18.0	3997	279.9
0	9.9	100.0	90.1	1.682	18.1	3942	278.4
6	7	53.8	87	1.705	19.8	3981	279.6
8	9	52.9	83	1.666	25.2	3831	275.8
9	10	52.6	81	1.648	27.9	3732	272.8
8.5	9.5	52.8	82	1.657	26.5	3785	274.2
9.2	10.2	52.6	80.6	1.644	28.4	3715	272.2
Соединение (VIII) (C ₂ N ₈ O ₄)							
15	0	0.0	85	1.785	18.0	3912	270.1
11	2.7	19.7	86.3	1.755	18.1	3837	272.1
9	4	30.8	87	1.742	18.1	3834	272.3
5	6.6	56.9	88.4	1.715	18.1	3799	271.4
3	7.9	72.5	89.1	1.702	18.0	3767	270.5
1	9.3	90.3	89.7	1.687	18.2	3717	269.0
0	9.9	100.0	90.1	1.682	18.1	3692	268.4

* (VI) — [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*e*][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксид;

(VIII) — 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид;

(IX) — [1,2,3,4]тетразино[5,6-*e*][1,2,3,4]тетразин-1,3,6,8-тетраоксид.

+ активное связующее + углеводородное связующее, при объемной доле связующего не ниже 18 об% и оптимальном отношении активного связующего к углеводородному.

Соединения (VI) и (IX) могут стать мощнейшей основой смесевых твердых ракетных топлив с I_{sp} ~278 и 280 с соответственно, что существенно выше всех применяемых сегодня композиций (кроме

топлив на базе бериллия, применение которого запрещено). Но поскольку в этих трех компонентах нет водорода, температуры в камере сгорания T_c недопустимо велики (табл. 4) — вплоть до 4000 К, тогда как допустимый верхний предел — 3700 К, иногда 3800 К (нет конструкционных материалов, выдерживающих такие температуры при повышенных давлениях), поэтому нужно несколько изменить рецептуру для снижения T_c . Одним из известных способов снижения T_c подобных составов является увеличение объемной доли связующего и (или) повышение доли углеводородной компоненты в связующем. Как правило, снижение T_c таким способом снижает и I_{sp} , т. е. надо искать компромисс между T_c и I_{sp} .

Сочетание этих двух приемов позволяет в составах с соединением (VI) снизить T_c до ~3800 К при достижении I_{sp} ~274 с или до 3700 К при достижении I_{sp} ~271.5 с (табл. 4). При этом надо отметить, что в таких составах объемная доля связующего (~26%) существенно выше минимально допустимой (18%), что улучшает реологические свойства неотвержденной массы и, следовательно, повышает безопасность производства изделия. Такой же эффект был ранее обнаружен для составов на базе соединения (IX) [48].

В составах с соединением (VIII) T_c ~3800 и 3700 К достигаются без увеличения объемной доли связующего (табл. 4), но для достижения T_c 3700 К следует вводить в состав связующего больше углеводородной составляющей, немного потеряв в величине I_{sp} (268.4 с при 90% углеводородной составляющей в связующем), тогда как при $T_c = 3800$ К можно обеспечить достижение $I_{sp} = 271.4$ с при применении связующего с 43% углеводородной составляющей.

Соединения (III) и (V) характеризуются величиной $\alpha = 0.75$, и их оптимально использовать с активным связующим. При 18 об% активного связующего бинарные составы (III) + активное связующее имеют $I_{sp} = 253.2$ с при $T_c = 3600$ К.

При 18 об% активного связующего бинарные составы (V) + активное связующее показывают практически рекордный результат $I_{sp} = 275.2$ с при T_c около 4030 К. Чтобы снизить T_c до 3800 К, нужно ввести 36.9 об% активного связующего (при этом I_{sp} снизится до 271 с), а для снижения T_c до 3700 К — ввести 44.2 об% активного связующего, при этом I_{sp} понизится до 268.2 с, что, надо специально отметить, тоже очень хороший результат.

Соединение (II) имеет невысокую величину α (0.47) при высокой величине $\Delta H_f^\circ(s)$ (2528.3 кДж·кг⁻¹). Величина I_{sp} , которую может обеспечить бинарный состав 15% активного связующего + 85% (II), составляет только 246.1 с. Введение

перхлората аммония с высокой α (2.25) даже при очень низкой $\Delta H_f^\circ(s)$ этого окислителя (-2500 кДж·кг⁻¹) позволяет повысить I_{sp} до 249.9 с при содержании перхлората аммония на уровне 30% (рис. 3).

Соединение (VII) тоже имеет невысокую величину α (0.44) при весьма высокой $\Delta H_f^\circ(s)$ (4299 кДж·кг⁻¹). Помимо высокой $\Delta H_f^\circ(s)$ наличие водорода в элементном составе даже в количестве 0.65% является определенным преимуществом (VII) перед близкими к нему структурами без водорода. И действительно, простая бинарная система (VII) + активное связующее показывает $I_{sp} = 265.5$ с при $T_c = 3740$ К, что для безметалловых составов считается блестящим достижением. Введение перхлората аммония в композицию снижает I_{sp} , поскольку при столь высокой величине $\Delta H_f^\circ(s)$, как у (VII), даже при величине α всей композиции, равной ~0.48 (в обычных составах оптимальная величина α лежит в интервале 0.65–0.8), резкое снижение $\Delta H_f^\circ(s)$ состава за счет введения перхлората аммония не компенсируется повышенной величиной α .

Соединение (I) с величиной $\alpha = 0.22$ и с не очень высокой $\Delta H_f^\circ(s)$ (2553 кДж·кг⁻¹) недостаточно эффективно для применения в смесевых твердых ракетных топливах, что было уже отмечено ранее [15]. Соединение (IV) хоть и имеет весьма низкую величину α (0.25), но за счет очень высокой величины $\Delta H_f^\circ(s)$ (4445.5 кДж·кг⁻¹) состав 15% активно-

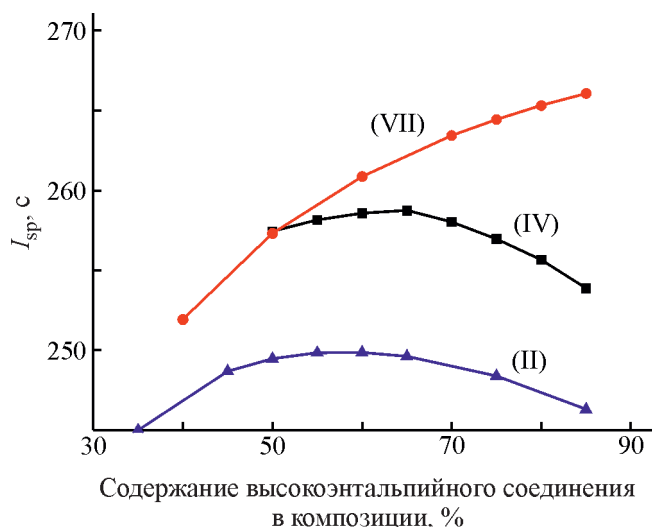


Рис. 3. Величины I_{sp} композиций 15% активного связующего + высокоэнтальпийное соединение [(II), (VII) или (IV)] + перхлорат аммония, остальное — до 85%. (II) — 4-нитро-4Н,8Н-бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-б:3',4'-е]-пиазин; (IV) — бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-с:3',4'-g]-[1,2,5,6]тетразолин; (VII) — 1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-е]-[1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид.

го связующего + 85% (IV) обеспечивает величину $I_{sp} = 243.3$ с, что не является очень хорошим показателем для составов без металла, эта величина I_{sp} близка к величине простой бинарной композиции углеводородное связующее + перхлорат аммония. При такой низкой величине α и одновременно высокой величине $\Delta H_f^\circ(s)$ соединение (IV) оптимально применять в качестве дополнительного компонента в системе активное связующее + перхлорат аммония. Такой прием описан в работах [49, 50] для создания композиций смесевых твердых ракетных топлив с низким содержанием высокоэнтальпийных полиазотистых соединений. Показано, что в системе 15% активного связующего + (IV) + перхлорат аммония при соотношении перхлорат аммония/(IV) = 40/45 достигается максимальное значение $I_{sp} = 251.0$ с, но на сегодняшнем этапе развития смесевых твердых ракетных топлив эта величина не считается высокой, поэтому для применения (IV) или (I) в составе таких топлив нет перспектив.

Потенциальные возможности соединений (I) и (IV) как диспергаторов топлив прямоточных воздушно-реактивных двигателей. Несмотря на то что (I) и (IV) оказались малоэффективны как компоненты смесевых твердых ракетных топлив, они могут стать весьма полезными компонентами в другом виде твердых топлив — для прямоточных воздушно-реактивных двигателей, предназначенных для атмосферного полета. Поскольку в таких двигателях основным окислителем служит заборный воздух, нет нужды в компонентах с высокой величиной α . Для топлив прямоточных воздушно-реактивных двигателей, размещенных в газогенераторе, требуется диспергатор, который за счет собственного адиабатического превращения в отсутствие воздуха сможет создать высокую температуру и газовыделение в газогенераторе, что приводит к частичной газификации основного горючего (обычно углеводородный полимер) и частичному его диспергированию с последующей подачей в воздушную камеру сгорания [51, 52]. Недавно [39] было описано, что высокоэнтальпийные полиазотистые соединения с низкими величинами α , используемые в качестве диспергатора вместо применяемого ранее перхлората аммония, повышают дальность полета на 10–16%. Было показано, что соединение (I) может случить хорошим диспергатором для таких топлив и повышает дальность полета на 16.8% по сравнению с перхлоратом аммония [15].

Соединение (IV) имеет почти ту же величину α , что и у (I), но существенно более высокую $\Delta H_f^\circ(s)$. Расчет эффективности (IV) относительно перхлората аммония, выполненный по уравнению (1), показы-

вает, что применение (IV) вместо перхлората аммония позволяет на 18% повысить дальность полета, что более чем на 2 абс% превышает достижения с применением всех полиазотистых диспергаторов, описанных в [39], и на 0.2 абс% превышает результат, достигаемый при применении (I).

Выводы

Для квантово-химических расчетов величин энтальпии образования в газовой фазе для полиазотистых гетероциклов, характеризующихся величинами энтальпии образования выше примерно $2500 \text{ кДж} \cdot \text{кг}^{-1}$, предпочтительно использование комбинированного метода G4, дающего результаты, более близкие к экспериментальным, чем метод G4(MP2) или V3LYP/6-311+G(2d,p). Отклонения от экспериментальных значений для [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*e*][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксида и [1,2,3,4]-тетразино[5,6-*e*][1,2,3,4]тетразин-1,3,6,8-тетраоксида составляют от 0.04 до 1.5% в зависимости от использованного литературного источника. Результаты расчетов, полученные методом G4(MP2), отличаются от результатов, полученных методом G4, на 2–4%, а результаты расчетов методом V3LYP/6-311 + G(2d,p) отличаются на 2–14%. При этом процессорное время при расчетах методом G4 увеличивается в 3–6 раз по сравнению с использованием метода G4(MP2) и в десятки раз по сравнению с использованием метода V3LYP/6-311 + G(2d,p).

На основе рассчитанных энтальпий образования в газовой фазе и рассчитанных по формуле Трутона энтальпий сублимации оценены энтальпии образования в твердой фазе соединений 4-нитро-4Н,8Н-бис([1,2,5]-оксадиазоло)[3,4-*b*:3',4'-*e*]-пиразина; [1,2,5]-оксадиазоло[3,4-*e*][1,2,3,4]тетразин-1,4,6-триоксида; 1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксида и 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксида, а именно 533.4, 659.0, 666.5 и 799.1 $\text{кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ соответственно.

Показано, что [1,2,5]оксадиазоло[3,4-*e*][1,2,3,4]-тетразин-1,4,6-триоксид, в настоящее время еще не синтезированный, может стать базой для составов, не содержащих ни металлов, ни галогенов, с обеспечением требования к величине температуры горения не выше 3700–3800 К при содержании связующего существенно выше минимально допустимого. При этом достигаются очень высокие значения удельного импульса (выше 272 с).

Показано, что 1-нитро-1Н-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]тетразин-5,7-диоксид, в настоящее время еще не синтезированный, может стать базой для составов,

не содержащих ни металлов, ни галогенов, с обеспечением требования к величине температуры горения не выше 3700–3800 К при допустимом содержании связующего. При этом достигаются очень высокие значения удельного импульса (272 с при температуре не выше 3800 К и 268 с при температуре не выше 3700 К).

(4Z,9Z)-Бис([1,2,5]оксадиазоло)[3,4-с:3',4'-g]-[1,2,5,6]тетразоцин может стать высокоэффективным компонентом-диспергатором топлив для прямоточных воздушно-реактивных двигателей. Использование его в этом качестве приводит к небольшому повышению дальности полета по сравнению с топливами, содержащими наиболее эффективные диспергаторы из ряда высокоэнтальпийных N-гетероциклов.

Благодарности

Авторы благодарны руководству и коллективам Центра коллективного пользования высокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М. В. Ломоносова (проект Enthalpy-2065) [53, 54] и Вычислительного центра ИПХФ РАН за предоставленное оборудование для проведения квантово-химических расчетов величин энтальпий образования высокоэнергетических соединений в газовой фазе.

Финансирование работы

Работа выполнена на средства Института проблем химической физики РАН по теме 0089-2019-0005 (№ госрегистрации АААА-А19-119101690058-9) «Фундаментальные и проблемно-ориентированные исследования в области создания энергетических конденсированных систем различного назначения». В. М. Волохов, А. В. Волохов, Е. С. Амосова и Т. С. Зюбина выполняли работы по квантово-химическим расчетам молекул в рамках выполнения задания по гранту Российского фонда фундаментальных исследований (№ 20-07-00319 А «Предсказательное моделирование термодимических свойств высокоэнтальпийных веществ»).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

Информация о вкладе авторов

Д. Б. Лемперт провел выбор химических соединений для исследования, выполнил исследования эффективности исследованных объектов в качестве компонентов ракетных топлив, написал раздел

«Анализ энергетических возможностей исследуемых соединений»; И. Н. Зюзин выполнил большую часть литературного поиска, написал раздел «Объекты исследования»; А. И. Казаков провел расчеты по оценке энтальпий сублимации исследуемых соединений, написал раздел «Оценка величин $\Delta H_f^\circ(s)$ исследуемых соединений»; Л. С. Яновский участвовал в постановке задач исследования, проводил оценку эффективности ряда изучаемых соединений в качестве компонентов топлив для прямоточных воздушно-реактивных двигателей, участвовал в написании статьи; В. М. Волохов выполнял постановку задачи и анализ результатов квантово-химических расчетов и участвовал в написании статьи; А. В. Волохов, Е. С. Амосова и Т. С. Зюбина проводили квантово-химические расчеты, обработку и анализ полученных результатов. Все соавторы принимали активное участие в обсуждении полученных результатов и формулировке выводов по работе.

Информация об авторах

Лемперт Давид Борисович, к.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0219-1571>
Волохов Вадим Маркович, д.ф.-м.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5586-9374>
Зюзин Игорь Николаевич, к.х.н.,
ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-2078-890X>
Казаков Анатолий Иванович, д.ф.-м.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3760-7514>
Волохов Александр Вадимович,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8415-4194>
Амосова Елена Сергеевна,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1790-9769>
Зюбина Татьяна Сергеевна, д.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2556-0074>
Яновский Леонид Самойлович, д.т.н.,
ORCID <https://orcid.org/0000-0002-2603-6795>

Список литературы

- [1] *Haixiang Gao, Qinghua Zhang, Shreeve J. M.* Fused heterocycle-based energetic materials (2012–2019) // *J. Mater. Chem. A*. 2020. V. 8. N 8. P. 4193–4216. <https://doi.org/10.1039/C9TA12704F>
- [2] *Klenov M. S., Guskov A. A., Anikin O. V., Churakov A. M., Strelenko Yu. A., Fedyanin I. V., Lyssenko K. A., Tartakovsky V. A.* Synthesis of tetrazino-tetrazine 1,3,6,8-tetraoxide (TTTO) // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016. V. 55. N 38. P. 11472–11475. <http://doi.org/10.1002/anie.201605611>
- [3] *Воронин А. А., Зеленев В. П., Чураков А. М., Стреленко Ю. А., Тартаковский В. А.* Синтез

- 1H-[1,2,3]триазоло[4,5-*e*][1,2,3,4]тетразин-4,6-диоксида и его метильных производных // Изв. РАН. Сер. хим. 2015. № 3. С. 699–703 [Voronin A. A., Zelenov V. P., Churakov A. M., Strelenko Yu. A., Tartakovskiy V. A. Synthesis of 1H-[1,2,3]-triazolo[4,5-*e*][1,2,3,4]tetrazine 4,6-dioxide and its methyl derivatives // Russ. Chem. Bull. 2015. V. 64. N 3. P. 699–703. <https://doi.org/10.1007/s11172-015-0922-6>].
- [4] Churakov A. M., Ioffe S. L., Tartakovskiy V. A. Synthesis of [1,2,5]oxadiazolo[3,4-*e*][1,2,3,4]-tetrazine 4,6-di-N-oxide // Mendeleev Commun. 1995. V. 5. N 6. P. 227–228. <https://doi.org/10.1070/MC1995v005n06ABEH000539>
- [5] Khakimov D., Zelenov V., Baraboshkin N., Pivina T. The unusual combination of beauty and power of furoxano-1,2,3,4-tetrazine 1,3-dioxides: A theoretical study of crystal structures // J. Molecular Modeling. 2019. V. 25. N 4. Art. 107. <https://doi.org/10.1007/s00894-019-3986-7>
- [6] Старченков И. Б., Андрианов В. Г. 4H,8H-бис(1,2,5-оксадиазоло)[3,4-*b*:3',4'-*e*]пиразин // Химия гетероцикл. соединений. 1996. Т. 32. № 5. С. 717 [Starchenkov I. B., Andrianov V. G. 4H,8H-bis(1,2,5-oxadiazolo)[3,4-*b*:3',4'-*e*]pyrazine // Chem. Heterocycl. Compd. 1996. V. 32. N 5. P. 618. <https://doi.org/10.1007/BF01164797>].
- [7] Sheremetev A. B., Yudin I. L. Synthesis of unsubstituted 4H,8H-bisfurazano[3,4-*b*:3',4'-*e*]pyrazine // Mendeleev Commun. 1996. N 6. P. 247–248.
- [8] Старченков И. Б., Старченков И. Б., Андрианов В. Г., Мишнев А. Ф. Химия фуразано[3,4-*b*]пиразинов. 2. Нуклеофильное замещение азидо-группы в фуразано[3,4-*b*]пиразинах // Химия гетероцикл. соединений. 1997. Т. 33. № 2. С. 250–264 [Starchenkov I. B., Andrianov V. G., Mishnev A. F. Chemistry of furazano[3,4-*b*]pyrazine. 1. Synthesis and thermodynamic appraisal of 4,8-dihydrodifurazano[3,4-*b*,*e*]pyrazine and its derivatives // Chem. Heterocycl. Compd. 1997. V. 33. N 2. P. 216–228. <https://doi.org/10.1007/BF02256764>].
- [9] Sheremetev A. B., Yudin I. L. Unusual oxidation of 4-amino-4H,8H-bisfurazano[3,4-*b*:3',4'-*e*]pyrazines // Mendeleev Commun. 2002. V. 12. N 2. P. 66–68. <https://doi.org/10.1070/MC2002v012n02ABEH001528>
- [10] Целинский И. В., Мельникова С. Ф., Романова Т. В., Пирогов С. В., Хисамутдинов Г. Х., Мратхузина Т. А., Королев В. Л., Кондюков И. З., Абдрахманов И. Ш., Смирнов С. П. 4H,8H-бис(1,2,5-оксадиазоло)[3,4-*b*:3',4'-*e*]пиразин и некоторые его производные // Журн. орг. химии. 1997. Т. 33. № 11. С. 1739–1748.
- [11] Шереметев А. Б., Юдин И. Л. Прогресс в химии фуразано[3,4-*b*]пиразинов и их аналогов // Успехи химии. 2003. Т. 72. № 1 С. 93–107. <https://doi.org/10.1070/RC2003v072n01ABEH000776> [Sheremetev A. B., Yudin I. L. Advances in the chemistry of furazano[3,4-*b*]pyrazines and their analogues // Russ. Chem. Rev. 2003. V. 72. N 1. P. 87–100. <https://doi.org/10.1070/RC2003v072n01ABEH000776>].
- [12] Chavez D., Hill L., Hiskey M., Kinkead S. Preparation and explosive properties of azo- and azoxy-furazans // J. Energetic Mater. 2000. V. 18. N 2–3. P. 219–236. <http://doi.org/10.1080/07370650008216121>
- [13] Averkiev B. B., Korlyukov A. A., Antipin M. Yu., Sheremetev A. B., Timofeeva T. V. Experimental X-ray diffraction study of stacking interaction in crystals of two furazan[3,4-*b*]pyrazines // Crystal Growth & Design. 2014. V. 14. N 11. P. 5418–5427. <https://doi.org/10.1021/cg500589f>
- [14] Зеленов В. П., Федянин И. В., Хакимов Д. В., Пивина Т. С. Превращения 3(4)-амино-4(3)-(трет-бутил-NNO-азокси)фуроксанов в реакциях аннелирования в 1,2,3,4-тетразин-1,3-диоксиды // Изв. РАН. Сер. хим. 2017. № 7. С. 1240–1249 [Zelenov V. P., Fedyanin I. V., Khakimov D. V., Pivina T. S. Transformations of 3(4)-amino-4(3)-(tert-butyl-NNO-azoxy)furoxans in the annulation reactions into 1,2,3,4-tetrazine 1,3-dioxides // Russ. Chem. Bull. 2017. V. 66 N 7. P. 1240–1249. <https://doi.org/10.1007/s11172-017-1879-4>].
- [15] Лемперт Д. Б., Казаков А. И., Шереметев А. Б., Гладышкин А. Г., Набатова А. В., Яновский Л. С. Экспериментальное определение стандартной энтальпии образования 4H,8H-бис(фуразано)-[3,4-*b*:3',4'-*e*]пиразиона и оценка его эффективности как диспергатора твердых топлив // Изв. РАН. Сер. хим. 2019. № 10. С. 1856–1859 [Lempert D. B., Kazakov A. I., Sheremetev A. B., Gladyshevskiy A. G., Nabatova A. V., Yanovskii L. S. Experimental determination of the standard enthalpy of formation of 4H,8H-bis(furazano)[3,4-*b*:3',4'-*e*]pyrazine and evaluation of its performance as a dispersant of solid fuels // Russ. Chem. Bull. V. 68. N 10. P. 1856–1859. <https://doi.org/10.1007/s11172-019-2635-8>].
- [16] Пепекин В. И., Матюшин Ю. Н., Губина Т. В. Энтальпия образования и взрывчатые свойства фуразантетразиндиоксида // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 2. С. 42–45 [Pepekin V. I., Matyushin Yu. N., Gubina T. S. Enthalpy of formation and explosive properties of 5,6-(3,4-furazano)-1,2,3,4-tetrazine-1,3-dioxide // Russ. J. Phys. Chem. B 2011. V. 5. N 1. P. 97–100. <https://doi.org/10.1134/S1990793111020102>].
- [17] Зюзин И. Н., Казаков А. И., Лемперт Д. Б., Вацадзе И. А., Курочкина Л. С., Набатова А. В. Термохимические и энергетические характеристики алкокси-NNO-азоксипроизводных пиразола и нитропиразолов // Физика горения и взрыва. 2019. Т. 55. № 3. С. 92–99. <https://doi.org/10.15372/FGV20190310>

- [Zyuzin I. N., Kazakov A. I., Lempert D. B., Vatsadze I. A., Kurochkina L. S., Nabatova A. V. Thermochemical and energy characteristics of alkoxy-NNO-azoxy derivatives of pyrazole and nitropyrazoles // *Combust. Explos. Shock Waves*. 2019. V. 55. N 2. P. 327–334. <https://doi.org/10.1134/S0010508219030109>].
- [18] Chavez D. E., Parrish D. A., Mitchell L., Imler G. H. Azido and tetrazolo 1,2,4,5-tetrazine N-oxides // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017. V. 56. N 12. P. 3575–3578. <https://doi.org/10.1002/anie.201612496>
- [19] Hao Wei, Jiaheng Zhang, Shreeve J. M. Synthesis, characterization, and energetic properties of 6-amino-tetrazolo[1,5-b]-1,2,4,5-tetrazine-7-N-oxide: A nitrogen-rich material with high density // *Chem. Asian J.* 2015. V. 10. N 5. P. 1130–1132. <https://doi.org/10.1002/asia.201500086>
- [20] Lu Hu, Ping Yin, Imler G. H., Parrish D. A., Haixiang Gao, Shreeve J. M. Fused rings with N-oxide and —NH₂: Good combination for high density and low sensitivity energetic materials // *Chem. Commun.* 2019. V. 55. N 61. P. 8979–8982. <https://doi.org/10.1039/C9CC04496E>
- [21] Chunlin He, Haixiang Gao, Imler G. H., Parrish D. A., Shreeve J. M. Boosting energetic performance by trimerizing furoxan // *J. Mater. Chem. A*. 2018. V. 6. N 20. P. 9391–9396. <https://doi.org/10.1039/C8TA02274G>
- [22] Кизин А. Н., Дворкин П. Л., Рыжова Г. Л., Лебедев Ю. А. Параметры для расчета мольного объема и плотности жидких органических веществ // *Изв. АН СССР. Сер. хим.* 1986. № 2. С. 372–375.
- [23] Salmon A., Dalmazzone D. Prediction of enthalpy of formation in the solid state (at 298.15 K) using second-order group contributions. Part 1. Carbon-hydrogen and carbon-hydrogen-oxygen compounds // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2006. V. 35. N 3. P. 1443–1458. <https://doi.org/10.1063/1.2203111>
- [24] 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. 19–58. <https://doi.org/10.1063/1.2435401>
- [25] Kon'kova T. S., Matyushin Yu. N., Miroshnichenko E. A., Prokhorova S. V., Inozemtsev J. O., Inozemtsev A. V., Sheremetev A. B., Kozeev A. M. Thermochemical properties of 3-alkyl-4-nitrofurazans // *Int. Annual Conf. of ICT (2012)*. 43rd (Energetic Materials). 76/1–76/12.
- [26] Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. Gaussian-4 theory // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 126. ID 084108. <https://doi.org/10.1063/1.2436888>
- [27] Goebel M., Klapötke T. M. Development and testing of energetic materials: The concept of high densities based on the trinitroethyl functionality // *Adv. Funct. Mater.* 2009. V. 19. N 3. P. 347–365. <https://doi.org/10.1002/adfm.200801389>
- [28] Chickos J. S., Acree W. E. Jr. Enthalpies of vaporization of organic and organometallic compounds, 1880–2002 // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2003. V. 32. N 2. P. 519–878. <https://doi.org/10.1063/1.1529214>
- [29] Domalski E. S., Hearing E. D. Estimation of the thermodynamic properties of C-H-N-O-S-halogen compounds at 298.15 K // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1993. V. 22. N 4. P. 805–1159. <https://doi.org/10.1063/1.555927>
- [30] Politzer P., Murray J. S., Grice M. E., Desalvo M., Miller E. Calculation of heats of sublimation and solid phase heats of formation // *Mol. Phys.* 1997. V. 91. N 5. P. 923–928. <https://doi.org/10.1080/002689797171030>
- [31] Сунцова М. А., Дорофеева О. В. Теоретическая оценка энтальпий сублимации азотсодержащих высокоэнергетических соединений // *Успехи в специальной химии и химической технологии. Тр. Всерос. науч.-техн. конф., посвященной 80-летию основания Инженерного химико-технологического факультета РХТУ им. Д. И. Менделеева*. 18–20 ноября 2015, Москва. Сборник статей. С. 169–173.
- [32] Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. Gn theory // *Comput. Mol. Sci.* 2011. V. 1. P. 810–825. <https://doi.org/10.1002/wcms.59>
- [33] Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C., Pople J. A. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106. N 3. P. 1063. <https://doi.org/10.1063/1.473182>
- [34] Лемперт Д. Б., Нечипоренко Г. Н., Долганова Г. П., Стесик Л. Н. Зависимость удельного импульса оптимизированных составов смесового твердого ракетного топлива (связующее + металл + окислитель) от природы металла и окислителя // *Хим. физика*. 1998. Т. 17. № 7. С. 114–120 [Lempert D. B., Nechiporenko G. N., Dolganova G. P., Stesik L. N. Specific impulse of optimized composite solid propellants (binder + metal + oxidizer) as a function of the metal and oxidizer properties // *Chem. Phys. Reports*. 1999. V. 17. P. 1547–1553].
- [35] Lempert D., Nechiporenko G., Manelis G. Energetic characteristics of solid composite propellants and ways of energy increasing // *Central Eur. J. Energ. Mater.* 2006. V. 3 (4). P. 73–87.
- [36] Дорофеев Е. М., Согласнова С. И., Нечипоренко Г. Н., Лемперт Д. Б. Оптимизация состава связующего для максимального использования энергетического потенциала высокоэнтальпийных полиазотистых окислителей в безметалльных энергетических композициях // *Физика горения и взрыва*. 2018. Т. 54. № 6. С. 78–84. <https://doi.org/10.15372/FGV20180609>

- [Dorofeenko E. M., Soglasnova S. I., Nechiporenko G. N., Lempert D. B. Optimization of the binder formulation to increase the energetic performance of polynitrogen oxidizers in metal-free compositions // *Combust. Explos. Shock Waves*. 2018. V. 54. N 6. P. 698–703. <https://doi.org/10.1134/S0010508218060096>].
- [37] Лемперт Д. Б., Казаков А. И., Санников В. С., Набатова А. В., Дашко Д. В., Степанов А. И. Термохимические и энергетические характеристики DAzFF и AzNTF // *Физика горения и взрыва*. 2019. Т. 55. № 2. С. 29–38. <https://doi.org/10.15372/FGV20190202>
[Lempert D. B., Kazakov A. I., Sannikov V. S., Nabatova A. V., Dashko D. V., Stepnov A. I. Thermochemical and energy characteristics of DAzFF and AzNTF // *Combust. Explos. Shock Waves*. 2019. V. 55. N 2. P. 148–155. <https://doi.org/10.1134/S0010508219020035>].
- [38] Трусов Б. Г. Программная система ТЕРРА для моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // III Междунар. симп. «Горение и плазмохимия». 24–26 августа 2005. Алматы, Казахстан. Алматы: Казак университеті, 2005. С. 52–57.
- [39] Яновский Л. С., Лемперт Д. Б., Разносчиков В. В., Аверьков И. С. Оценка эффективности твердых топлив на основе высокоэнтальпийных диспергаторов для ракетно-прямоточных двигателей // *ЖПХ*. 2019. Т. 92. № 3. С. 322–342. <https://doi.org/10.1134/S0044461819030071>
[Yanovskii L. S., Raznoschikov V. V., Aver'kov I. S., Lempert D. B. Evaluation of effectiveness of solid fuels based on high enthalpy dispersants for rocket ramjet engines // *Russ. J. Appl. Chem.* 2019. V. 92. N 3. P. 367–388. <https://doi.org/10.1134/S1070427219030078>].
- [40] Лемперт Д. Б., Яновский Л. С., Разносчиков В. В. Оценка влияния элементного состава, плотности и энтальпии образования диспергаторов твердых топлив на дальность полета атмосферного летательного аппарата // *ЖПХ*. 2019. Т. 92. № 12. С. 1577–1582. <https://doi.org/10.1134/S0044461819120089>
[Lempert D. B., Raznoschikov V. V., Yanovskii L. S. Influence of the elemental composition, density, and enthalpy of formation of solid fuel dispersants on the range of an atmospheric aircraft // *Russ. J. Appl. Chem.* 2019. V. 92. N 12. P. 1690–1695. <https://doi.org/10.1134/S1070427219120097>].
- [41] Surikova Yu., Pivina T., Sheremetev A., Arnautova E., Yudin I., Shubina N., Korolev V., Ivshin V., Lebedev V., Matyushin Yu. Thermochemical and quantum chemical characteristics of piperazine, furazanopiperazine and difurazanopiperazine derivatives // *Proceed. 33th Int. Annual Conf. of ICT*. 2002. P. 059–065.
- [42] Suntsova M. A., Dorofeeva O. V. Prediction of enthalpies of sublimation of high-nitrogen energetic compounds: Modified Politzer model // *J. Molecular Graphics and Modelling*. 2017. V. 72. P. 220–228. <https://doi.org/10.1016/j.jmkgm.2017.01.013>
- [43] Симоненко В. Н., Калмыков П. И., Кускин А. Б., Глотов О. Г., Зарко В. Е., Сидоров К. А., Певченко Б. В., Никитин Р. Г. Исследование горения модельных композиций на основе фуразанотетразиндиоксида и динитродиазапентана. I. Бинарные системы // *Физика горения и взрыва*. 2014. Т. 50. № 3. С. 68–77 [Simonenko V. N., Kalmykov P. I., Kiskin A. B., Glotov O. G., Zarko V. E., Sidorov K. A., Pevchenko B. V., Nikitin R. G. I. Combustion of model compositions based on furazanotetrazine dioxide and dinitrodiazapentane. I. Binary systems // *Combust. Explos. Shock Waves*. 2014. V. 50. N 3. P. 306–314. <https://doi.org/10.1134/S0010508214030083>].
- [44] Киселёв В. Г., Грицан Н. П., Зарко В. Е., Калмыков П. И., Шандаков В. А. Расчет энтальпии образования [1,2,5]оксадиазола[3,4-е][1,2,3,4]-тетразин-4,6-ди-N-диоксида с использованием современных многоуровневых квантово-химических методик // *Физика горения и взрыва*. 2007. Т. 43. № 5. С. 77–81 [Kiselev V. G., Gritsan N. P., Zarko V. E., Kalmykov P. I., Shandakov V. A. Multilevel quantum chemical calculation of the enthalpy of formation of [1,2,5]oxadiazolo[3,4-e][1,2,3,4]-tetrazine-4,6-di-N-dioxide // *Combust. Explos. Shock Waves*. 2007. V. 43. N 5. P. 562–566. <https://doi.org/10.1007/s10573-007-0074-6>].
- [45] Politzer P., Lana P., Murray J. S. Computational characterization of two di-1,2,3,4-tetrazine tetraoxides, DTTO and iso-DTTO, as potential energetic compounds // *Central Eur. J. Energetic Mater.* 2013. V. 10. N 1. P. 37–52.
- [46] Batog L. V., Konstantinova L. S., Rozhkov V. Yu., Lebedev O. V., Epishina M. A., Makhova N. N., Ovchinnikov I. V., Khmel'nitskii L. I. Novel energetic macrocyclic systems of furazan series // *Proceed. 29th Int. Annual Conf. of ICT*. 1998. P. 55:1–10.
- [47] Алдошин С. М., Лемперт Д. Б., Гончаров Т. К., Казаков А. И., Согласнова С. И., Дорофеев Е. М., Плишкин Н. А. // Энергетические возможности СТРТ на основе бимолекулярных кристаллов, содержащих CL-20 // *Изв. АН. Сер. хим.* 2016. Т. 65. № 8. С. 2018–2024 [Aldoshin S. M., Lempert D. B., Goncharov T. K., Kazakov A. I., Soglasnova S. I., Dorofeenko E. M., Plishkin N. A. Energetic potential of solid composite propellants based on CL-20-containing bimolecular crystals // *Russ. Chem. Bull.* 2016. V. 65. N 8. P. 2018–2024. <https://doi.org/10.1007/s11172-016-1546-1>].
- [48] Лемперт Д. Б., Дорофеев Е. М., Согласнова С. И. Энергетический потенциал некоторых компонентов на базе высокоэнтальпийных N-оксидов в качестве окислителей ракетных топлив // *Омск. науч. вестн. Сер. Авиационно-ракетное и энергетическое машиностроение*. 2018. Т. 2. № 3. С. 58–62.

- <https://doi.org/10.25206/2588-0373-2018-2-3-58-62>
- [49] Казаков А. И., Дашко Д. В., Набатова А. В., Степанов А. И., Лемперт Д. Б. Термохимические и энергетические характеристики DNTF и DNFF // Физика горения и взрыва. 2018. Т. 54. № 2. С. 27–38. <https://doi.org/10.15372/FGV20180203> [Kazakov A. I., Dashko D. V., Nabatova A. V., Stepanov A. I., Lempert D. B. Thermochemical and energy characteristics of DNTF and DNFF // Combust. Explos. Shock Waves. 2018. V. 54. N 2. P. 147–157. <https://doi.org/10.1134/S001050821802003X>].
- [50] Lempert D., Kazakov A., Sannikov V., Nabatova A., Dashko D., Stepanov A., Utenyshev A. Thermochemical energetic properties of a couple of azidoderivatives of terfuranans // Proceedings 21st Int. seminar «New trends in research of energetic materials». Pardubice, Czech Rep. April 2018. V. 2. P. 838–846.
- [51] Александров В. Н., Быцкевич В. М., Верховоломов В. К., Граменицкий М. Д., Дулепов Н. П., Скибин В. А., Суриков Е. В., Хилькевич В. Я., Яновский Л. С. Интегральные прямоточные воздушно-реактивные двигатели на твердых топливах (Основы теории расчета). М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. С. 240–340.
- [52] Сорокин В. А., Яновский Л. С., Козлов В. А., Суриков Е. В., Шаров М. С., Фельдман В. Д., Францевич В. П., Животов Н. П., Абашев В. М., Черваков В. В. Ракетно-прямоточные двигатели на твердых и пастообразных топливах. Основы проектирования и экспериментальной отработки. М.: Физматлит, 2010. С. 104–238.
- [53] Voevodin V., Antonov A., Nikitenko D., Shvets P., Sobolev S., Sidorov I., Stefanov K., Voevodin V., Zhumatiy S. Supercomputer Lomonosov-2: Large scale, deep monitoring and fine analytics for the user community // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2019. V. 6 (2). P. 4–11. <https://doi.org/10.14529/jsfi190201>
- [54] Воеводин В. В., Жуматий С. А., Соколов С. И., Антонов А. С., Брызгалов П. А., Никитенко Д. А., Стефанов К. С., Воеводин В. В. Практика суперкомпьютера «Ломоносов» // Открытые системы. СУБД. 2012. № 7. С. 36–39.