

КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ
ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ, КАТАЛИЗ

УДК 544.16:544.18:544.43:544.45

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ
НА ПРОЧНОСТЬ СВЯЗИ C–NO₂ НИТРОПЕНТАНОВ

© 2022 г. Г. М. Храпковский¹, И. В. Аристов¹, Д. Л. Егоров^{1*},
Я. В. Денисова¹, Е. В. Николаева¹

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

*E-mail: egorovdl2015@yandex.ru

Поступила в редакцию 12.11.2021;

после доработки 17.01.2022;

принята в печать 20.01.2022

С использованием многошаговых (композиционных) квантовохимических методов G3B3 и G4, а также методов функционала плотности B3LYP, CAM-B3LYP, wB97XD рассчитаны энтальпии образования восьми нитропентанов и пентильных радикалов. На основе этих результатов определены энергии диссоциации связи C–NO₂ ($D(C-N)$) соединений. Рассмотрены особенности влияния молекулярной структуры на величину $D(C-N)$ нитропентанов. Проведено сравнение расчетных и термодимических значений энтальпий образования радикалов, которое показало, что наиболее надежные оценки дает метод G4 (среднее абсолютное значение погрешности составляет 2.2 кДж/моль). Энергия диссоциации изученных соединений по данным метода G4 изменяется от 252.8 до 268.2 кДж/моль.

Ключевые слова: нитропентаны, пентильные радикалы, радикальный распад, энтальпии образования, энергии диссоциации.

DOI: 10.31857/S0207401X22070068

ВВЕДЕНИЕ

Изучение кинетики и механизма термического разложения является одним из важных направлений исследований в области химии нитросоединений [1–12]. В настоящее время наиболее подробные сведения по кинетике термического распада имеются для нитроалканов [2, 3, 8]. Нитроалканы в газообразном состоянии распадаются по двум основным механизмам: радикальному – с гомолитическим разрывом связи C–NO₂ и молекулярному, связанному с элиминированием азотистой кислоты [3]. Экспериментальные данные по кинетике термического распада в газообразном состоянии представляют особый интерес для обсуждения влияния строения молекул на изменение в ряду аррениусовских параметров первичного акта реакции. Значительное место при изучении механизмов термодеструкции нитросоединений занимают расчеты квантовохимическими методами [13–15]. Использование этих методов дает возможность существенно расширить число обсуждаемых механизмов термодеструкции различных классов нитросоединений [15–34]. Кроме того, во многих случаях это позволяет уточнить, восполнить, а иногда и принципиально изменить трактовку экспериментальных данных.

Основной массив экспериментальных данных по кинетике газофазного радикального распада

нитроалканов получен для полинитросоединений. Значительно меньше сведений имеется по радикальному механизму газофазного распада моонитроалканов [2, 3]. Моонитроалканы распадаются преимущественно по молекулярному механизму с элиминированием азотистой кислоты, поэтому экспериментальные оценки барьеров реакций радикального распада имеются только для нескольких простейших соединений и не отличаются высокой точностью [2, 3]. Энергия (энтальпия) диссоциации связи C–N ($D(C-N)$) может быть рассчитана из энтальпий образования нитроалканов и продуктов реакции. В работе [35] с использованием различных неэмпирических методов и методов функционала плотности (DFT) были определены значения $D(C-N)$ восьми простейших нитроалканов C₁–C₄, хорошо согласующиеся с наиболее надежными термодимическими оценками.

В данном сообщении приводятся результаты расчета прочности связи C–NO₂ в нитропентанах, для которых экспериментальные значения $D(C-N)$, полученные с использованием термодимических или кинетических методов, отсутствуют. Применение расчетных данных для нитропентанов представляет значительный интерес, поскольку позволяет более подробно рассмотреть некоторые особенности влияния молекуляр-

Таблица 1. Энтальпии образования (в кДж/моль) нитропентанов

Номер соединения	Соединение	B3LYP/ 6-31G(d,p)	SAM-B3LYP/ 6-31+G(2df,p)	wB97XD/TZVP	wB97XD/TZVPP	G3B3	G4
1	1-нитропентан	-174.5	-192.2	-107.3	-161.4	-171.9	-169.9
2	2-нитропентан	-185.9	-204.2	-121.0	-174.1	-189.7	-187.7
3	3-нитропентан	-186.3	-204.6	-122.9	-175.8	-192.9	-190.5
4	2-метил-1-нитробутан	-172.9	-192.4	-110.4	-164.2	-178.8	-177.0
5	2-метил-2-нитробутан	-190.0	-208.5	-128.7	-180.7	-202.8	-200.5
6	2-метил-3-нитробутан	-183.9	-203.6	-122.8	-175.7	-194.7	-193.0
7	3-метил-1-нитробутан	-172.9	-192.3	-111.2	-165.7	-175.5	-173.9
8	2,2-диметил-1-нитропропан	-177.3	-197.9	-116.5	-169.9	-189.0	-189.5

ной структуры на величину $D(C-N)$ в ряду нитроалканов и получить важные дополнительные сведения о сравнительной прочности связей $C-NO_2$, образованных с участием первичных, вторичных и третичных атомов углерода.

МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Расчеты проводились с использованием пакета прикладных программ GAUSSIAN 09 [36]. Энтальпии образования оценивались из полных электронных энергий стандартными методами [37, 38] для оптимальных конформаций. При проведении расчетов использовались композитные методы G3B3 [38] и G4 [39], которые лучше других квантовохимических методов передают термодинамические характеристики нитроалканов [35, 37, 38, 40]. С целью получения более подробных данных мы применяли также методы теории функционала плотности B3LYP [41, 42] с базисом 6-31G(d,p), wB97XD [43] с базисами TZVP и TZVPP, а также SAM-B3LYP [44] с базисом 6-31+G(2df,p).

РЕЗУЛЬТАТЫ

В табл. 1 приведены расчетные значения энтальпий образования нитропентанов. К сожалению, надежные экспериментальные данные по энтальпиям образования мононитропентанов отсутствуют [45, 46]. Вместе с тем в работах [35, 40] было показано, что для нитрометана, нитроэтана, нитропропанов и нитробутанов термодинамические и расчетные значения энтальпий образования, полученные с использованием методов G3B3 и G4, хорошо согласуются между собой. Средняя в ряду погрешность расчета методом G4 не превышает 3.8 кДж/моль. С учетом этих данных можно полагать, что и для нитропентанов расчетные значения энтальпий образования будут также достаточно надежными. В работе [47] приводится термодинамическое значение энтальпии образования 1-нитропентана в газообразном состоянии, равное

-164 кДж/моль, которое удовлетворительно согласуется с оценкой методом G4: -169.9 кДж/моль.

Все использованные в работе методы одинаково передают тенденции изменения энтальпий образования в ряду нитропентанов. Наибольшие значения энтальпий образования (наименьшие по абсолютной величине) расчет предсказывает для следующих соединений: 1-нитропентана, 2-метил-1-нитробутана, 3-метил-1-нитробутана, 2,2-диметил-1-нитропропана, в которых нитрогруппа присоединена к первичному атому углерода (в табл. 1 — это соединения **1**, **4**, **7**, **8**). В этом случае наличие разветвления углеродного скелета увеличивает абсолютное значение энтальпии образования. Наименьшее в ряду значение энтальпии образования расчет предсказывает для 2-метил-2-нитробутана (соединение **5**), в котором нитрогруппа присоединена к третичному атому углерода. Нитропентаны, в которых нитрогруппа присоединена к вторичному атому углерода (соединения **2**, **3**, **6**), имеют средние в ряду значения энтальпий образования.

В табл. 2 приведены расчетные значения энтальпий образования пентильных радикалов. По результатам расчета относительно большие значения энтальпий образования наблюдается для тех из них, в которых неспаренный электрон локализован преимущественно на первичном атоме углерода (пентил, 2-метилбутил, 3-метилбутил, 2,2-диметилпропил). Радикалы, в которых неспаренный электрон локализован преимущественно на вторичном атоме углерода (пентан-2-ил, пентан-3-ил, 3-метилбутан-2-ил), имеют более низкие значения энтальпий образования. Минимальное в ряду значение энтальпии образования расчет предсказывает для пентильного радикала, в котором неспаренный электрон локализован преимущественно на третичном атоме углерода (2-метил-2-нитробутан).

Сопоставление расчетных и экспериментальных значений энтальпий образования пентильных радикалов представляет достаточно сложную проблему. Долгое время в различных справочниках [48–50] для углеводородных радикалов приво-

Таблица 2. Энтальпии образования ($\Delta H_{f, 298}$) и абсолютные значения их отклонений от экспериментальных оценок (Δ) для радикалов, образующихся при разрыве связи C–NO₂ в нитропентанах (в кДж/моль)

Номер соединения	Радикал	V3LYP/ 6-31G(d,p)		CAM-V3LYP/ 6-31+G(2df,p)		wB97XD/ TZVP		wB97XD/ TZVPP		G3B3		G4		Эксперимент
		$\Delta H_{f, 298}$	Δ	$\Delta H_{f, 298}$	Δ	$\Delta H_{f, 298}$	Δ	$\Delta H_{f, 298}$	Δ	$\Delta H_{f, 298}$	Δ	$\Delta H_{f, 298}$	Δ	
9	Пентил	37.1	17.3	33.5	20.9	84.5	30.1	64.4	10.0	61.0	6.6	56.1	1.7	54.4
10	Пентан-2-ил	20.6	29.6	19.0	31.3	73.2	23.0	50.2	0.0	51.0	0.8	45.7	4.5	50.2
11	Пентан-3-ил	21.9	25.1	20.0	27.0	75.0	28.0	52.1	5.1	51.9	4.9	46.9	0.0	47.0
12	2-метилбутил	38.5	9.4	33.5	14.4	85.5	37.6	63.1	15.2	56.4	8.5	51.5	3.6	47.9
13	2-метилбутан-2-ил	9.4	19.6	8.7	20.3	61.2	32.2	38.6	9.6	39.7	10.8	33.9	4.9	29.0
14	3-метилбутан-2-ил	20.7	19.6	18.1	22.2	70.2	29.9	47.8	7.5	45.5	5.2	40.0	0.3	40.3
15	3-метилбутил	34.6	13.4	30.0	18.0	81.2	33.2	60.0	12.0	53.3	5.3	48.2	0.2	48.0
16	2,2-диметилпропил	33.9	2.5	26.0	10.4	77.9	41.5	56.2	19.8	44.1	7.7	39.1	2.7	36.4
17	NO ₂	23.0	10.1	21.3	11.8	53.9	20.8	22.6	10.5	31.8	1.3	30.7	2.4	33.1
	Среднее значение Δ (без учета NO ₂)		17.1		20.5		31.9		9.9		6.2		2.2	

дидились рекомендуемые значения энтальпий образования, отличающиеся на 12–17 кДж/моль. В последние годы значительное внимание уделялось анализу надежности экспериментальных данных. В результате проделанной работы разброс рекомендуемых значений энтальпий образования радикалов значительно уменьшился. С учетом сказанного, для сравнения с расчетными значениями мы используем результаты, рекомендованные в вышедшей сравнительно недавно работе [51]. Эти значения хорошо согласуются с данными авторитетных термодимических справочников [48, 49]. Абсолютные значения отклонений расчетных величин энтальпий образования пентильных радикалов от рекомендуемых экспериментальных приведены в табл. 2.

По данным расчета наилучшее согласие указанных выше величин наблюдается при использовании метода G4. В этом случае средний в ряду модуль погрешности составляет 2.2 кДж/моль, что даже меньше, чем указанные в справочниках возможные погрешности экспериментального определения [48–51]. Отметим, что аналогичная картина наблюдается и при сравнении экспериментальных и расчетных энтальпий образования углеводородных радикалов C₁–C₄ [40]. В этом случае средний модуль погрешности определения энтальпии образования радикалов при использовании метода G4 составляет 3.5 кДж/моль. Приведенные данные показывают также, что в ряде случаев результаты расчета могут быть использованы для оценки надежности экспериментальных данных. Это важно в тех случаях, когда результаты, рекомендованные в различных термодимических справочниках, значительно различаются. Подобная ситуация дол-

гое время существовала для пентильных радикалов. Рекомендованные в справочнике [50] энтальпии образования для них в газообразном состоянии были значительно ниже приведенных в работах [48, 49].

При использовании данных справочника [50] средний модуль погрешности метода G4 значительно возрастает и достигает значения в 18.6 кДж/моль. Сравнительно недавно в работе [51] при участии авторов справочника [50] эти результаты пересмотрели с учетом появившихся новых экспериментальных данных. При этом рекомендованные для алкильных радикалов C₂–C₅ значения почти не отличались от результатов, приведенных в работах [48, 49]. Рассмотренная ситуация показывает, что результаты квантовохимических расчетов в ряде случаев могут быть использованы не только для восполнения отсутствующих, но и для оценки надежности имеющихся экспериментальных данных.

При использовании метода G3B3 среднее в ряду изученных соединений значение модуля погрешности увеличивается почти в 3 раза (6.2 кДж/моль). Используемые в работе методы теории функционала плотности значительно хуже согласуются с термодимическими данными. Для методов V3LYP и wB97XD средний в ряду модуль различия расчетных и экспериментальных значений составляет 17.0 и 31.9 кДж/моль соответственно. При этом метод V3LYP систематически занижает, а метод wB97XD – завышает значения энтальпии образования радикалов. Отмеченные тенденции следует учитывать при анализе расчетных значений энергий диссоциации связи C–NO₂ нитропентанов. Соответствующие результаты представлены в табл. 3.

Таблица 3. Энергии диссоциации (в кДж/моль) связи C–NO₂ (D(C–N)) в реакции радикального распада нитропентанов

Номер соединения	B3LYP/6-31G(<i>d,p</i>)	SAM-B3LYP/6-31+G(2 <i>df,p</i>)	wB97XD/TZVP	wB97XD/TZVPP	G3B3	G4
1	234.6	246.9	245.7	248.4	264.7	256.6
2	229.5	244.4	248.0	246.9	272.6	264.1
3	231.2	245.9	251.8	250.5	276.7	268.2
4	234.4	247.1	249.8	249.9	267.0	259.1
5	222.4	238.5	243.8	241.9	274.4	265.1
6	227.6	242.9	246.9	246.1	272.1	263.6
7	230.5	243.5	246.3	248.3	260.6	252.8
8	234.2	245.2	248.3	248.7	265.0	259.3

Отсутствие надежных экспериментальных данных по энтальпиям образования нитропентанов не позволяет сравнить полученные расчетные значения с термодимическими оценками $D(C-N)$. В то же время сравнение расчетных и экспериментальных значений энтальпий образования продуктов реакции радикального распада нитропентанов (алкильных радикалов и NO₂) позволяет предположить, что расчетные значения $D(C-N)$, полученные с использованием метода G4, будут достаточно близки наиболее надежным термодимическим оценкам. В качестве дополнительного аргумента в пользу этого предположения могут служить и результаты сравнения расчетных и экспериментальных значений $D(C-N)$ нитроалканов C₁–C₄ [35, 40]. В этом случае средняя абсолютная величина погрешности расчетных и экспериментальных значений $D(C-N)$ при использовании методов G4, G3, G3B3 не превышает 6.6 кДж/моль.

Все использованные в нашей работе методы предсказывают сравнительно незначительное изменение $D(C-N)$ в ряду изомерных нитропентанов (не более чем на 8–13 кДж/моль (G3B3)). Примерно в 2–2.5 раза большие изменения в ряду расчет предсказывает для энтальпий образования нитропентанов и пентильных радикалов. На основе этих данных можно высказать предположение, что изменение в ряду энтальпий образования соединений и радикалов происходит согласованно и при расчете $D(C-N)$ отмеченные различия частично компенсируются.

Анализ полученных данных показывает, что корреляция между энтальпиями образования нитропентанов и радикалов, образующихся при гомолитическом разрыве связи C–NO₂, в них действительно имеет место. Например, по данным метода G4 коэффициент корреляции между указанными выше величинами составляет 0.906. Расчетные значения $D(C-N)$, предсказываемые разными методами, заметно различаются. Например, для 1-нитропентана это различие достигает 30.1 кДж/моль. Максимальные значения для прочности связи C–

NO₂ предсказывает метод G3B3, минимальные – метод B3LYP/6-31G(*d,p*). Как уже отмечалось, наиболее надежными оценками $D(C-N)$ мы считаем полученные по методу G4. Например, для 1-нитропентана он предсказывают значение $D(C-N)$, равное 256.6 кДж/моль, которое очень близко расчетным оценкам прочности этой связи, полученным с использованием этого метода для нитроэтана, 1-нитропропана, 1-нитробутана: 256.9, 258.6, 256.5 кДж/моль соответственно [35].

По данным методов G4 и G3B3 относительно более прочные связи в нитропентанах образованы с участием вторичного атома углерода: 2-нитропентан, 3-нитропентан, 2-метил-3-нитробутан. Наиболее прочная связь C–NO₂ в нитропентанах наблюдается в 3-нитропентане. Повышение прочности связи C–NO₂ в соединениях **2**, **3** и **6**, в которых нитрогруппа находится при вторичном атоме углерода, по сравнению с нитропентанами, в которых эта связь образована с участием первичного атома углерода (соединения **1**, **4**, **7** и **8**), связано с различными тенденциями изменения энтальпий образования нитропентанов и алкильных радикалов.

В изомерных пентильных радикалах максимальное значение энтальпий образования наблюдается для тех из них, которые образуются при разрыве связи C–N при первичном атоме углерода (соединения **9**, **12**, **15**, **16**). Однако это увеличение не компенсирует уменьшения энтальпий образования в 1-нитропентанах по сравнению с 2-нитропентанами. Отмеченные тенденции и объясняют увеличение $D(C-N)$ в 2-нитропентанах по сравнению с 1-нитропентанами. Аналогичная тенденция, по данным метода G4, наблюдается и для нитроалканов C₁–C₄ [35, 40], что согласуется и с термодимическими данными. По результатам использованных в работе DFT-методов наблюдается противоположная тенденция. Относительно более прочными являются связи C–NO₂, образованные с участием первичных атомов углерода, а менее прочными –

связи, образованные с участием вторичных атомов углерода. Поскольку эти данные противоречат термодинамическим оценкам, в дальнейшем при рассмотрении закономерностей влияния молекулярной структуры на изменение в ряду энергии диссоциации связи $C-NO_2$ соответствующие результаты, полученные методами теории функционала плотности, не используются. Обсуждение в дальнейшем проводится на основе результатов метода G4.

Значения $D(C-N)$ внутри группы соединений, имеющих связи $C-NO_2$, образованные с участием первичных (соединения **1**, **4**, **7**, **8**) или вторичных (соединения **2**, **3**, **6**) атомов углерода, достаточно близки. Вместе с тем среди изомерных нитробутанов, имеющих связи образованные с участием вторичных атомов углерода, расчет отмечает различия у 2-нитропентана и 3-нитропентана. В последнем из этих соединений, в котором нитрогруппа присоединена к центральному атому углерода, расчет предсказывает заметное увеличение прочности связи $C-NO_2$. Анализ данных по энтальпиям образования соединений и радикалов (табл. 1, 2), показывает, что это связано с небольшим уменьшением энтальпии образования 3-нитропентана по сравнению с 2-нитропентаном, а также с увеличением энтальпии образования радикала, образующегося при гомолитическом разрыве связи $C-NO_2$ в 3-нитропентане. Прочность связи $C-NO_2$, образованной с участием третичного атома углерода в 2-нитро-2-метилбутане, почти не отличается от расчетных значений, предсказываемых для соединений, в которых нитрогруппа присоединена к вторичному атому углерода: 2-нитропентан, 3-нитро-2-метилбутан.

Сравнение с расчетными данными, полученными для других изученных с использованием метода G4 нитроалканов [35, 40], показывает, что предсказываемые для близких по структуре соединений значения $D(C-N)$ различаются незначительно. Так, например, для 1-нитробутана и 1-нитропентана эти величины совпадают. Интересно, что достаточно близкие значения $D(C-N)$ метод G4 предсказывает для нитрогексанов¹⁾. Для них наблюдаются и аналогичные закономерности влияния молекулярной структуры на изменение прочности связи $C-NO_2$ в ряду. Например, по данным расчета наименее прочными являются связи, образованные с участием первичных атомов углерода. Расчетные значения $D(C-N)$ в 1-нитрогексане только на 1.2 кДж/моль меньше, чем в 1-нитропентане (255.43 и 256.6 кДж/моль). Заметно более прочными являются связи $C-NO_2$ в нитрогексанах и нитропентанах, образованных с участием вторичных атомов углерода. Существенно, что и в

этом случае расчетные значения $D(C-N)$ для близких по структуре соединений различаются незначительно. Так, для 2-нитрогексана и 2-нитропентана метод G4 предсказывает значения, равные соответственно, 263.1 и 264.1 кДж/моль. Для 3-нитрогексана и 3-нитропентана величины $D(C-N)$ равны соответственно 267.3 и 268.2 кДж/моль.

Близкие значения $D(C-N)$ предсказывает расчет и для нитроалканов, в которых нитрогруппа присоединена к третичному атому углерода. Оценки $D(C-N)$ по методу G4 в 2-нитро-2-метилпентане и 2-нитро-2-метилбутане равны соответственно 264.8 и 265.1 кДж/моль. Оценки, полученные по методу G3B3, в большинстве случаев превышают результаты, полученные с использованием метода G4, примерно на 6–7 кДж/моль. Однако влияние молекулярной структуры на изменение прочности связи в ряду изученных соединений они передают одинаково. Отметим, что подобные тенденции можно наблюдать и для всех изученных в настоящее время с использованием метода G4 мононитроалканов C_1-C_6 . Эти результаты представляют значительный интерес для понимания общих закономерностей влияния молекулярной структуры на изменение в ряду энтальпий образования соединений и радикалов, а также энергий диссоциации связи $C-NO_2$ и энергий активации радикального газофазного распада алифатических нитросоединений.

Нами были также оценены барьеры других основных альтернативных механизмов первичного акта газофазного мономолекулярного распада нитропентанов. Рамки данной статьи не позволяют привести все полученные нами результаты. Поэтому приведем только оценки величин барьеров активации изученных реакций, полученные методом G4.

Для реакции изомеризации нитропентанов в пентилнитриты (нитро-нитритные перегруппировки) в ряду соединений **1–8** были определены значения энтальпий активации, равные соответственно 265.3, 251.9, 252.6, 267.8, 248.5, 250.6, 268.2, 262.8 кДж/моль. Характерной особенностью процесса является близость энтальпий активации прямой и обратной реакции. Различие этих величин не превышает 20 кДж/моль. Поскольку барьеры реакций нитро-нитритных перегруппировок соединений **1–8**, хотя и несколько ниже, но все же близки к значениям $D(C-N)$ – табл. 3, а энтропии активации существенно меньше, чем для реакций радикального распада, то данный механизм не может конкурировать с процессом гомолитического разрыва связи $C-N$.

Для реакций β -элиминирования HNO_2 от соединений **1–7** были получены значения энтальпий активации, равные соответственно 199.1, 195.6, 199.0, 200.9, 185.9, 198.2, 194.3 кДж/моль, что значительно ниже энергии диссоциации связей $C-N$ в

¹⁾ Работа по изучению термодинамических свойств нитрогексанов нами не завершена, поэтому мы приводим результаты только для нескольких изученных соединений.

нитропентанах (табл. 3). Этот процесс является наиболее энергетически выгодным среди всех исследуемых нами альтернативных процессов первичного акта. Сопоставление энтальпий активации реакций β -элиминирования HNO_2 от соединений 1–7 с расчетными значениями $D(\text{C}-\text{N})$ для этих соединений показывает, что корреляции между ними не наблюдается. Следует обратить внимание на то, что метод G4 для всех изученных нитроалканов C_1-C_5 предсказывает отсутствие подобной зависимости, в то время как согласно результатам методов функционала плотности она должна существовать [13]. Судя по всему, этот вывод методов функционала плотности является артефактом.

ВЫВОДЫ

Резюмируя сказанное, можно полагать, что полученные с использованием метода G4 расчетные значения энтальпий образования нитропентанов, пентильных радикалов и энергий диссоциации связи $\text{C}-\text{NO}_2$ в нитропентанах будут достаточно надежными. Они могут быть использованы для восполнения отсутствующих экспериментальных данных, а также для обсуждения результатов изучения кинетики газофазного распада нитроалканов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Орлова Е.Ю. Химия и технология бризантных взрывчатых веществ. Л.: Химия, 1981.
- Манелис Г.Б., Назин Г.М., Рубцов Ю.И., Струнин В.А. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ и порохов. М.: Наука, 1996.
- Назин Г.М., Манелис Г.Б. // Успехи химии. 1994. Т. 63. Вып. 4. С. 327.
- Назин Г.М., Манелис Г.Б., Дубовицкий Ф.И. // Успехи химии. 1968. Т. 37. Вып. 8. С. 1443.
- Назин Г.М., Манелис Г.Б. // Изв. АН СССР. Сер. хим. 1972. № 4. С. 811.
- Brill T.V., James K.J. // Chem. Rev. 1993. V. 93. № 8. P. 2667; <https://doi.org/10.1021/cr00024a005>
- Заслонко И.С., Петров Ю.П., Смирнов В.Н. // Кинетика и катализ. 1997. Т. 38. Вып. 3. С. 353.
- Храповский Г.М., Марченко Г.Н., Шамов А.Г. Влияние молекулярной структуры на кинетические параметры термического распада С- и О-нитросоединений. Казань: "ФЭН", 1997.
- Назин Г.М., Дубихин В.В., Гончаров Т.К. и др. // Хим. физ. 2021. Т. 40. № 7. С. 16.
- Назин Г.М., Дубихин В.В., Гончаров Т.К. и др. // Хим. физ. 2021. Т. 40. № 6. С. 54.
- Назин Г.М., Корсунский Б.Л. // Хим. физ. 2021. Т. 40. № 3. С. 53.
- Крисяк Б.Э. // Хим. физ. 2020. Т. 40. № 1. С. 3.
- Храповский Г.М., Шамов А.Г., Николаева Е.В., Чачков Д.В. // Успехи химии. 2009. Т. 78. Вып. 10. С. 980.
- Королев В.Л., Пивина Т.С., Поролло А.А. и др. // Успехи химии. 2009. Т. 78. Вып. 10. С. 1022.
- Смирнов Л.П. // Успехи химии. 2010. Т. 79. Вып. 5. С. 466.
- Khrapkovskii G.M., Shamov A.G., Shamov G.A., Slyapochnikov V.A. // Mendeleev Commun. 1997. № 5. P. 169; <https://doi.org/10.1070/MC1997v007n05ABEH000825>
- Shamov A.G., Khrapkovskii G.M. // Mendeleev Commun. 2001. № 4. P. 163; <https://doi.org/10.1070/MC2001v011n04ABEH001423>
- Mazilov E.A., Nikolaeva E.V., Shamov A.G., Khrapkovskii G.M. // Mendeleev Commun. 2007. № 17. P. 359; <https://doi.org/10.1016/j.mencom.2007.11.022>
- Храповский Г.М., Розин А.М., Тихомиров В.А., Шамов А.Г., Марченко Г.Н. // Докл. АН СССР. 1988. Т. 298. Вып. 4. С. 921.
- Шамов А.Г., Николаева Е.В., Храповский Г.М. // ЖПХ. 2009. Т. 82. Вып. 10. С. 1587.
- Шамов А.Г., Николаева Е.В., Храповский Г.М. // ЖОХ. 2004. Т. 74. Вып. 8. С. 1327.
- Chen S.C., Xu S.C., Diau E., Lin M.C. // J. Phys. Chem. A. 2006. № 110. P. 10130; <https://doi.org/10.1021/jp0623591>
- Николаева Е.В., Шамов А.Г., Храповский Г.М. // ЖОХ. 2014. Т. 84. Вып. 11. С. 1777.
- Khrapkovskii G.M., Shamov A.G., Tsyshesky R.V. et al. // Comput. Theor. Chem. 2011. V. 966. № 1–3. P. 265; <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2011.03.016>
- Tsyshesky R.V., Garifzianova G.G., Chachkov D.V., Shamov A.G., Khrapkovskii G.M. // J. Energ. Mat. 2009. V. 27. № 4. P. 263; <https://doi.org/10.1080/07370650902733004>
- Khrapkovskii G.M., Shamsutdinov T.F., Chachkov D.V., Shamov A.G. // J. Mol. Struct. (THEOCHEM). 2004. V. 686. № 1–3. P. 185; <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2004.09.001>
- Khrapkovskii G.M., Shamov A.G., Tsyshesky R.V. et al. // Comput. Theor. Chem. 2012. V. 985. P. 80; <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2012.02.003>
- Шарипов Д.Д., Егоров Д.Л., Чачков Д.В., Шамов А.Г., Храповский Г.М. // ЖОХ. 2011. Т. 81. Вып. 11. С. 1822.
- Martinez-Nunez E., Borges Jr. I., Vasquez S.A. // J. Phys. Org. Chem. 2002. V. 15. № 2. P. 123; <https://doi.org/10.1002/poc.460>
- Hu W.F., He T.J., Chen D.M., Liu F.C. // J. Phys. Chem. A. 2002. V. 106. № 32. P. 7294; <https://doi.org/10.1021/jp020070n>
- Nguyen M.T., Le H.T., Hajgato B., Veszpremi T., Lin M.C. // J. Phys. Chem. 2003. V. 107. № 21. P. 4286; <https://doi.org/10.1021/jp027532h>
- Chen S.C., Xu S.C., Diau E., Lin M.C. // J. Chem. Phys. A. 2006. V. 110. № 33. P. 10130; <https://doi.org/10.1021/jp0623591>
- Fayet G., Joubert L., Rotureau P., Adamo C. // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113. № 48. P. 13621; <https://doi.org/10.1021/jp905979w>

34. Храпковский Г.М., Николаева Е.В., Чачков Д.В., Шамов А.Г. // ЖОХ. 2004. Т. 74. Вып. 6. С. 983.
35. Храпковский Г.М., Егоров Д.Л., Николаева Е.В., Чачков Д.В., Шамов А.Г. // ЖОХ. 2015. Т. 85. Вып. 8. С. 1241.
36. 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 J.A., Peralta Jr., 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 O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J. Gaussian 09. Rev. D. 01. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2009.
37. Curtiss L.A., Redfern P.C., Raghavachari K. // J. Chem. Phys. 2005. V. 123. P. 124107-1; <https://doi.org/10.1063/1.2039080>
38. Baboul A.G., Curtiss L.A., Redfern P.C., Raghavachari K. // J. Chem. Phys. 1999. V. 110. P. 7650; <https://doi.org/10.1063/1.478676>
39. Curtiss L.A., Redfern P.C., Raghavachari K. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 084108; <https://doi.org/10.1063/1.2436888>
40. Храпковский Г.М., Тсышевский Р.В., Чачков Д.В., Егоров Д.Л., Шамов А.Г. // J. Mol. Struct. (THEOCHEM). 2010. V. 958. № 1–3. P. 1; <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2010.07.012>
41. Becke A.D. // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 3098; <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
42. Lee C., Yang W., Parr R.G. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. № 2. P. 785; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
43. Chai J.-D., Head-Gordon M. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2008. V. 10. P. 6615.
44. Yanai T., Tew D., Handy N. // Chem. Phys. Lett. 2004. V. 393. P. 51; <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.06.011>
45. Мирошниченко Е.А., Конькова Т.С., Иноземцев Я.О., Матюшин Ю.Н. // Изв. РАН. Сер. хим. 2010. Вып. 5. С. 870.
46. Мирошниченко Е.А., Конькова Т.С., Иноземцев Я.О., Воробьева В.П., Матюшин Ю.Н. // Хим. физика. 2008. Т. 27. Вып. 8. С. 29.
47. Мирошниченко Е.А., Конькова Т.С., Матюшин Ю.Н., Иноземцев Я.О., Воробьева В.П. // Бултеров. сообщ. 2011. Т. 26. Вып. 11. С. 46.
48. Energetics of Organic Free Radicals / Eds Martinho Simoes J.A., Greenberg A., Liebman J.F. London: Blackie Academic and Professional, 1996. P. 22; https://doi.org/10.1007/978-94-009-0099-8_2
49. NIST Chemistry WebBook, NIST Standart Reference Database Nuber 69. Gaithersburg MD: National Institute of Standards and Technology, 20899; <http://webbook.nist.gov>
50. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А., Сайфуллин И.Ш. Термохимия органических свободных радикалов. М.: Наука, 2001.
51. Орлов М.Ю., Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Изв. АН. Сер.хим. 2014. Вып. 12. С. 2620.