

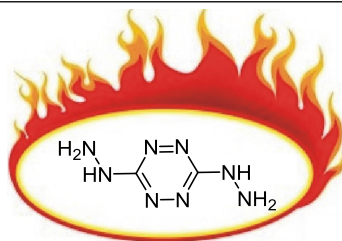
Усовершенствованные синтез и термохимические свойства амино- и гидразино-1,2,4,5-тетразинов

Татьяна С. Конькова^{1*}, Юрий Н. Матюшин¹, Евгений А. Мирошниченко¹,
Надежда В. Пальсаева², Алексей Б. Шереметев^{2*}

¹ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН,
ул. Косыгина, 4, Москва 119991, Россия; e-mail: taskon@mail.ru

² Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН,
Ленинский пр., 47, Москва 119991, Россия; e-mail: sab@ioc.ac.ru

Поступило 17.08.2020
Принято после доработки 5.10.2020



Разработаны улучшенные методики синтеза 3,6-диамино- и 3,6-дигидразино-1,2,4,5-тетразинов, а также 6-амино[1,2,4]триазоло-[4,3-*b*][1,2,4,5]тетразина. Методом бомбовой калориметрии определены их энергии сгорания и рассчитаны энтальпии образования в стандартном состоянии. На основе полученных данных оценен вклад 1,2,4,5-тетразинового фрагмента в энтальпию сгорания его производных.

Ключевые слова: 1,2,4,5-тетразин, калориметрия, энтальпия образования, энтальпия сгорания.

Сведения о прецизионных экспериментальных значениях энтальпий образования (ΔH_f) соединений различных классов, несомненно, составляют основу фундаментальной термохимии, а также имеют большое значение для прикладной науки. К сожалению, экспериментальные значения доступны менее чем для 0.1% известных соединений. Поскольку экспериментальное определение термохимических характеристик весьма трудоемкий процесс, значительные усилия тратятся на разработку вычислительных подходов. Различные эмпирические и полуэмпирические методы требуют обширной параметризации и часто приводят к существенным ошибкам при оценке нетипичных молекул, в частности богатых энергией, что характерно для компонентов энергетических материалов (взрывчатых веществ, ракетных топлив, пиротехнических составов).

При оценке потенциальной ценности энергетического соединения ключевыми показателями эффективности обычно являются скорость и давление детонации – для взрывчатых веществ, и удельный импульс – для ракетного топлива. Базовой характеристикой, определяющей эти свойства, является энергия, которая выделяется при детонации или сгорании и может быть легко

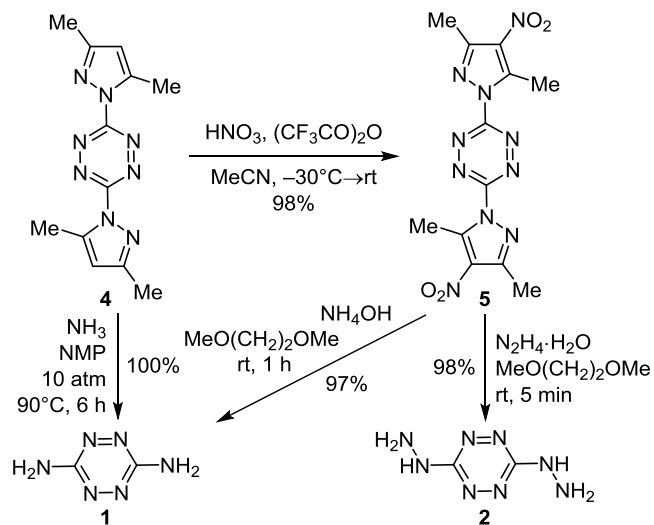
оценена расчетными методами,¹ если известна теплота образования соединения ΔH_f .² Энергия разложения также связана с чувствительностью энергетических соединений к инициированию детонации,³ характеризуюя риски их использования. Лишь располагая достоверным значением ΔH_f можно корректно оценить прикладные характеристики и безопасность использования энергоемкого соединения.

Полиазотистые гетероциклы – это наиболее перспективные и экологически привлекательные структурные блоки для конструирования новых энергетических соединений. Действительно, соединениям с большим содержанием азота присуща высокая энергоемкость, а их разложение сопровождается выделением большого количества тепла и образованием экологичного молекулярного азота в качестве основного продукта деструкции.⁴

В последние годы продемонстрирована перспективность конструирования энергоемких соединений на основе 1,2,4,5-тетразина.⁵ Однако имеющиеся в литературе сведения об экспериментально измеренных значениях энтальпий образования производных этого гетероцикла весьма скудны.⁶ В настоящем сообщении

приводятся результаты термодимического исследования трех производных тетразина: 3,6-диамино-1,2,4,5-тетразина (1), 3,6-дигидразинил-1,2,4,5-тетразина (2) (схема 1) и 6-амино[1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4,5]тетразина (3) (схема 2), уже широко используемых⁵ в практической химии энергоемких соединений.

Схема 1



Методом сжигания в калориметрической бомбе нами измерены энергии сгорания соединений 1–3 и рассчитаны энтальпии их образования в стандартном состоянии. На основе полученных термодимических данных рассчитан вклад 1,2,4,5-тетразинового фрагмента в энтальпию сгорания его производных. Заметим, что получение прецизионных экспериментальных значений стандартных энтальпий образования в твердой фазе $\Delta H_f^\circ(\text{cr})$, дополняя имеющуюся базу данных, позволяет повысить точность оценки энтальпий образования гипотетических аналогов методом групповых вкладов, сочетающим в себе простоту и надежность.

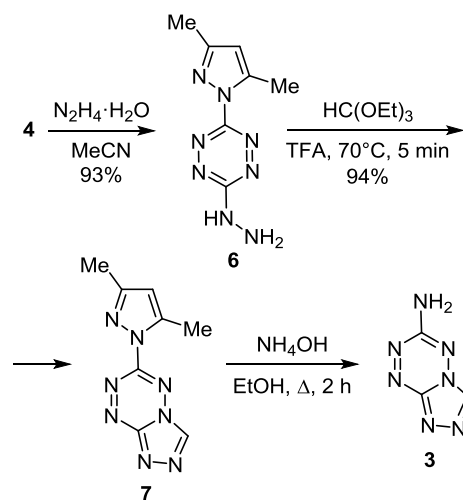
Несмотря на то, что соединения 1–3 давно известны, методы их синтеза не эффективны или реализуются с использованием дорогих реагентов. Свое исследование мы начали с разработки более эффективных процессов синтеза. Наиболее широко используемым прекурсором в синтезе производных 1,2,4,5-тетразина (называемого также *s*-тетразином) является 3,6-бис(3,5-диметилпиразол-1-ил)-*s*-тетразин (4).⁷

Диметилпиразолильные группы соединения 4 могут быть замещены при действии различных нуклеофилов, что широко используется в органическом синтезе для получения тетразинсодержащих соединений.⁸ Известно, что введение в положение 4 пиразола электроноакцепторного фрагмента, такого как атом брома или хлора, облегчает замещение этого модифицированного фрагмента нуклеофилами.⁹ Полагая, что присутствие нитрогруппы в пиразольном цикле еще более повысит нуклеофугность уходящего фрагмента, мы синтезировали нитропроизводное 5 обработкой соединения 4 смесью 100% HNO_3 и трифторуксусного ангидрида (схема 1).

Как известно, замещение двух пиразольных фрагментов в тетразине 4 аминогруппами хорошо проходит лишь при обработке избытком NH_3 в *N*-метилпирролидоне (NMP) при 90 °C в автоклаве под давлением (10 атм) в течение 6 ч.⁷ Мы нашли, что замещение нитропиразольного фрагмента соединения 5 легко осуществляется избытком водного NH_3 в глице при комнатной температуре и обычном давлении за 1 ч с образованием диамина 1 с выходом 97% (схема 1). При обработке раствора соединения 5 в глице гидразинидом оба нитропиразольных фрагмента мгновенно замещаются при комнатной температуре и образуется 3,6-дигидразинил-*s*-тетразин (2) с количественным выходом (схема 1).

Схема синтеза соединения 3 также была упрощена (схема 2). Наиболее проблематичной стадией в синтезе соединения 3 является стадия формирования 1,2,4-триазольного цикла, приводящая к образованию бициклического продукта 7. Ранее для циклизации легкодоступного моногидразинилпроизводного 6 использовали дорогой диэтоксиметилацетат, и в результате кипячения реакционной смеси в течение 5 мин образовывалось соединение 7 в выходе 93%.¹⁰ Позже сообщалось, что кипячение моногидразина 6 в избытке более дешевого триэтилортоформиата в течение 3 ч позволяет получить продукт 7 с выходом 72%.¹¹ Нами показано, что добавление к триэтилортоформиату трифторуксусной кислоты позволяет провести реакцию при комнатной температуре за 1 ч (выход 70%), а при 70 °C она завершается за 5 мин, приводя к продукту 7 с выходом 94%. Замещение пиразольного фрагмента соединения 7 проводили согласно литературной методике в среде кипящего EtOH, используя 30% водный аммиак, что позволяло получить через 2 ч сырец соединения 3 с выходом 77%.¹⁰ Аналитически чистый образец 3 получен с выходом 58%.

Схема 2



Разработанные методики хорошо масштабируются, что позволяет получать указанные соединения в необходимых количествах. Для термодимического изучения образцы очищают многократной пере-

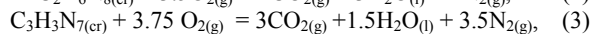
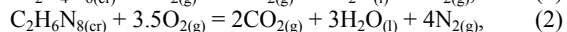
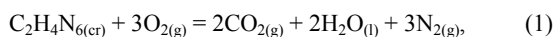
Таблица 1. Энергии сгорания производных тетразина 1–3*

Опыт	m_o	ΔT	Q	q_a	q_i	q_N	q_{cot}	$-\Delta U^*_B$
Соединение 1								
1	0.100831	2.13457	1144.19	757.13	0.524	4.42	6.74	3544.3
2	0.075659	1.89702	1016.86	739.84	0.524	2.07	6.07	3546.9
3	0.074610	1.96027	1050.76	776.39	0.524	2.04	7.12	3547.6
4	0.119840	2.23241	1196.64	760.49	0.524	4.49	6.04	3547.2
$-\Delta U^*_B = 3546.5 \pm 2.1 \text{ кал}\cdot\text{г}^{-1}$								
Соединение 2								
1	0.076797	2.35093	1263.84	989.80	3.824	2.35	7.49	3650.9
2	0.071023	2.33160	1253.44	980.26	3.824	2.21	7.61	3654.3
3	0.079823	2.42102	1301.52	995.26	3.824	2.51	8.36	3652.6
4	0.081317	2.40201	1291.30	979.78	3.824	2.54	8.17	3652.2
5	0.081924	2.42271	1302.42	988.81	3.824	2.58	7.75	3655.4
$-\Delta U^*_B = 3653.1 \pm 2.0 \text{ кал}\cdot\text{г}^{-1}$								
Соединение 3								
1	0.075299	1.86283	989.42	707.43	0.524	2.62	6.58	3615.8
2	0.084248	2.02763	1076.96	761.76	0.524	2.95	7.37	3612.6
3	0.081874	2.42706	1304.76	997.54	0.524	2.86	7.69	3617.1
4	0.080778	2.38783	1283.67	980.09	0.524	2.82	8.21	3615.2
5	0.081228	2.39929	1289.83	984.21	0.524	2.84	8.35	3618.3
$-\Delta U^*_B = 3615.8 \pm 2.5 \text{ кал}\cdot\text{г}^{-1}$								

* Принятые обозначения: m_o – масса навески исследуемого соединения в вакууме, г; ΔT – исправленный подъем температуры в калориметре, условный град.; Q – количество теплоты, измеренное в опыте, кал; q_a – тепловыделение от сгорания вспомогательного вещества – бензойной кислоты, кал; q_i – энергия поджига, кал; q_N – поправка на образование азотной кислоты, кал; q_{cot} – тепловыделение от сгорания хлопчатобумажной нити, кал; ΔU^*_B – энергия сгорания вещества в условиях бомбы, кал·г⁻¹.

кристаллизацией и вакуумной сушкой. Структуры и чистота синтезированных соединений подтвержались данными спектроскопии ЯМР ¹H и ¹³C, масс-спектрометрии и элементным анализом.

Энергии сгорания в условиях калориметрической бомбы для исследуемых соединений приведены в табл. 1. Реакции сгорания соединений 1–3 протекают в соответствии со стехиометрией представленной в уравнениях (1)–(3) соответственно:



где индексы cr, g и l отвечают кристаллическому, газообразному и жидкому состоянию соответственно.

Энтальпии образования тетразинов 1–3 рассчитаны исходя из энтальпий сгорания по уравнениям (4)–(6) соответственно:

$$\Delta H^{\circ}_f[C_2H_4N_6]_{(cr)} = 2\Delta H^{\circ}_f[CO_2]_{(g)} + 2\Delta H^{\circ}_f[H_2O]_{(l)} + 3\Delta H^{\circ}_f[N_2]_{(g)} - \Delta H^{\circ}_c, \quad (4)$$

$$\Delta H^{\circ}_f[C_2H_6N_8]_{(cr)} = 2\Delta H^{\circ}_f[CO_2]_{(g)} + 3\Delta H^{\circ}_f[H_2O]_{(l)} + 4\Delta H^{\circ}_f[N_2]_{(g)} - \Delta H^{\circ}_c, \quad (5)$$

$$\Delta H^{\circ}_f[C_3H_3N_7]_{(cr)} = 3\Delta H^{\circ}_f[CO_2]_{(g)} + 1.5\Delta H^{\circ}_f[H_2O]_{(l)} + 3.5\Delta H^{\circ}_f[N_2]_{(g)} - \Delta H^{\circ}_c, \quad (6)$$

где ΔH°_c – стандартная энтальпия сгорания соответствующего соединения, ккал·моль⁻¹, а ΔH°_f – стандартная энтальпия его образования, ккал·моль⁻¹.

При расчете стандартных энтальпий образования исследуемых соединений были использованы эталон-

Таблица 2. Энтальпии сгорания и образования производных 1,2,4,5-тетразина 1–3

Соединение	$-\Delta H^{\circ}_c$, ккал·моль ⁻¹	ΔH°_f , ккал·моль ⁻¹
1	395.9 ± 0.2	71.2 ± 0.2
2	517.3 ± 0.3	124.3 ± 0.3
3	493.7 ± 0.3	108.9 ± 0.3

ные значения энтальпий образования продуктов сгорания: $\Delta H^{\circ}_f[CO_2]_{(g)} = -94.051 \pm 0.031$ и $\Delta H^{\circ}_f[H_2O]_{(l)} = -68.315 \pm 0.009$ ккал·моль⁻¹.¹² В табл. 2 представлены полученные термохимические характеристики исследованных соединений.

На основе полученных значений термохимических величин, используя значения термохимических вкладов в энтальпию сгорания amino- и гидразиногрупп (–84.1 и –144.6 ккал·моль⁻¹ соответственно, определены по производным бензола¹³), проведена оценка вклада 1,2,4,5-тетразинового фрагмента в энтальпию сгорания в стандартном состоянии. Этот вклад, рассчитанный из термохимических параметров соединения 1, составил –228.0 ккал·моль⁻¹ (что соответствует –2.85 ккал·г⁻¹) и отличается лишь на 0.1 ккал от значения, полученного при расчете из энтальпии сгорания соединения 2, подтверждая точность оценки.

Ранее нами показано, что вклад [1,2,4]триазоло[4,3-*b*]-[1,2,4,5]тетразинового фрагмента, рассчитанный на основе энтальпий сгорания его 3-(3-*R*-фуразанил-амино)производных, составляет –409.0 ккал·моль⁻¹.^{6d}

Вклад этого фрагмента, исходя из энтальпии сгорания соединения **3**, составляет -409.6 ккал·моль⁻¹, то есть находится в хорошем согласии с ранее опубликованным значением.

Полученные данные могут быть использованы при оценке энтальпийных характеристик соединений, содержащих 1,2,4,5-тетразиновый и [1,2,4]триазоло[4,3-*b*]-[1,2,4,5]тетразиновый фрагменты.

В заключение отметим, что недавно энтальпия образования соединения **3** была рассчитана в рамках теории функционала плотности с базами ВЗLYP и ВЗP86.¹⁴ Согласно расчетам, ее значение составило 148.16 и 146.21 ккал·моль⁻¹ соответственно. Как видно, расчетные значения существенно завышены (ср. с табл. 2). Поскольку энтальпия образования соединения является ключевым параметром в расчетах всех важных характеристик энергоемких материалов, использование некорректных исходных данных приводит к фатальным ошибкам.

Экспериментальная часть

ИК спектры зарегистрированы на спектрометре Bruker Alpha в таблетках KBr. Спектры ЯМР ¹H, ¹³C и ¹⁴N зарегистрированы на спектрометре Bruker AM-300 (300, 75 и 21 МГц соответственно) в ДМСO-*d*₆. Химические сдвиги ядер ¹H и ¹³C приведены относительно ТМС, ядер ¹⁴N – относительно MeNO₂. Масс-спектры зарегистрированы на приборе Finnigan MATINCOS 50 (прямой ввод, ионизация ЭУ, 70 эВ). Элементный анализ выполнен на приборе PerkinElmer Series II 2400. Температуры плавления определены в плавильном блоке Gallenkamp и не исправлены. Контроль за ходом реакций и чистотой полученных соединений осуществлен методом ТСХ на пластинах Sorbfil 60 F₂₅₄.

Исходное соединение **4** получено по литературной методике.⁷

3,6-Бис(3,5-диметил-4-нитропиразол-1-ил)-1,2,4,5-тетразин (5). К охлажденным до -10 °C 11.2 мл трифторуксусного ангидрида по каплям добавляют 4 мл концентрированной HNO₃ (*d* 1.5 г/см³). Полученный раствор выдерживают при -10 °C в течение 0.5 ч, охлаждают до -30 °C и по каплям добавляют 20 мл абсолютного MeCN. Затем присыпают 0.6 г (2.2 ммоль) тетразина **4** и оставляют нагреваться до комнатной температуры. Реакционную смесь перемешивают еще в течение 15 мин при комнатной температуре и выливают в лед. Осадок отфильтровывают, промывают H₂O (3 × 15 мл) и 5 мл *i*-PrOH, высушивают на воздухе и кристаллизуют из MeCN. Выход 0.78 г (98%), розовый аморфный порошок, т. пл. 284–286 °C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 1576, 1516, 1504, 1452, 1436, 1412, 1380, 1348, 1176, 1132, 1064, 1036, 996, 940, 848, 792, 764. Спектр ЯМР ¹H, δ , м. д.: 2.40 (12H, уш. с, 4CH₃). Спектр ЯМР ¹³C, δ , м. д.: 12.2; 13.8; 132.4; 143.5; 147.3; 152.3. Спектр ЯМР ¹⁴N, δ , м. д.: -14.4 (NO₂). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 360 [M]⁺ (19), 167 (28), 149 (47), 121 (100), 93 (67), 80 (53), 67 (82), 53 (61), 39 (72). Найдено, %: C 40.08; H 3.41; N 38.78. C₁₂H₁₂N₁₀O₄. Вычислено, %: C 40.00; H 3.36; N 38.88.

3,6-Диамино-1,2,4,5-тетразин (1). К суспензии 5 г (0.014 моль) соединения **5** в 30 мл глима при комнатной температуре при перемешивании приливают 30 мл 33% водного NH₃. Примерно через 1 ч перемешивания из образовавшегося раствора выпадает осадок. Осадок отфильтровывают, промывают смесью CCl₄-*i*-PrOH, 5:1 и сушат на воздухе. Выход 1.9 г (97%), мелкие красно-коричневые кристаллы, т. пл. 300 °C (с разл.) (т. пл. >350 °C¹⁵). Продукт по физико-химическим и спектральным характеристикам идентичен описанному в литературе.¹⁶ Найдено, %: C 21.47; N 3.65; N 74.92. C₂H₄N₆. Вычислено, %: C 21.43; H 3.60; N 74.97.

3,6-Дигидразино-1,2,4,5-тетразин (2). К быстро перемешиваемому раствору 1.8 г (0.005 моль) соединения **5** в 20 мл глима при комнатной температуре по каплям добавляют 0.5 г (0.01 моль) N₂H₄·H₂O и через 5 мин смесь охлаждают до 0 °C. Осадок отфильтровывают, промывают смесью CCl₄-*i*-PrOH, 5:1 и сушат на воздухе. Получают 1.7 г (98%) красно-коричневого твердого продукта **2**, т. пл. 160–162 °C (с разл.), идентичного по всем показателям описанному в литературе.¹⁰ Найдено, %: C 16.97; H 4.27; N 78.78. C₂H₆N₈. Вычислено, %: C 16.90; H 4.26; N 78.84.

3-(3,5-Диметил-1H-пиразол-1-ил)[1,2,4]триазоло[4,3-*b*][1,2,4,5]тетразин (7). К суспензии 4.12 г (0.02 моль) соединения **6** в 20 мл (0.15 моль) ортомуравьиного эфира по каплям добавляют 5 мл (0.067 моль) трифторуксусной кислоты. При этом смесь самопроизвольно разогревается до 40 °C, и образуется раствор. После добавления примерно половины трифторуксусной кислоты начинает выпадать желтый аморфный осадок. Реакционную смесь нагревают до 70 °C и дают ей самопроизвольно остыть. Осадок отфильтровывают, промывают водным *i*-PrOH, высушивают. Выход 4.06 г (94%), ярко-желтое аморфное вещество, т. пл. 241–243 °C (т. пл. 246–247 °C,¹⁰ т. пл. 248°C¹¹). Продукт по спектральным характеристикам идентичен описанному в литературе.¹⁰ Найдено, %: C 44.50; H 3.77; N 51.75. C₈H₈N₈. Вычислено, %: C 44.44; H 3.73; N 51.83.

[1,2,4]-Триазоло[4,3-*b*][1,2,4,5]тетразин-6-амин (3). К 15 мл 8% раствора NH₄OH в 20 мл EtOH добавляют 0.54 г (2.5 ммоль) соединения **7**. Реакционную смесь кипятят в колбе с обратным холодильником в течение 2 ч, после чего упаривают половину растворителя. Остаток экстрагируют CH₂Cl₂ (2 × 15 мл) для отделения диметилпиразола. В водную фракцию добавляют 5 мл *i*-PrOH, полученную смесь оставляют на ночь в холодильнике. На следующий день выпавший осадок отфильтровывают, сушат на воздухе. Продукт перекристаллизовывают из H₂O, что, согласно литературе,¹⁰ приводит к образованию моногидрата продукта с т.пл. 217–218 °C (H₂O). Вещество сушат до постоянного веса в сушильном шкафу при 100–110 °C (~24 ч), что позволяет получить безводный желтый аморфный продукт **3**, выход 0.2 г (58%), т. пл. 186–189°C (с разл.). ИК спектр, ν , см⁻¹: 3393, 3136, 3038, 2853, 1680, 1550, 1443, 1414, 1368, 1325, 1139, 1050, 970, 944, 872, 836, 761, 711, 696, 670. Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 137 [M]⁺ 121, 98, 95, 86, 82, 77, 67, 57, 56, 55, 44. Найдено, %:

C 26.31; H 2.23; N 71.47. C₃H₃N₇. Вычислено, %: C 26.28; H 2.21; N 71.51. По спектрам ЯМР ¹H и ¹³C соединение идентично описанному в литературе.¹⁰

Калориметрические измерения. Энергии сгорания исследуемых соединений определены на прецизионном автоматическом калориметре сжигания с изотермической оболочкой (конструкция лаборатории термодинамики энергоемких соединений ИХФ РАН), разработанном специально для изучения энергоемких материалов.¹⁷ Образцы исследуемых соединений (обычно от 0.07 до 0.12 г) взвешивают в платиновом тигле и помещают в калориметрическую бомбу, которую затем наполняют кислородом. Начальное давление кислорода при сжигании всех веществ составляет около 3 Мпа. Перед проведением эксперимента в бомбу вводили 1 мл дистиллированной H₂O для создания давления насыщенного пара и растворения образующихся в процессе сгорания окислов азота. Подробная методика подготовки образца и проведения эксперимента по сжиганию описана ранее.¹⁵

Файл сопроводительных материалов, содержащий информацию о калориметрических измерениях, доступен на сайте журнала <http://hgs.osi.lv>.

Н. В. Палысаева и А. Б. Шереметев благодарят Российский научный фонд (грант 20-13-00289) за поддержку.

Термохимические исследования выполнены Т. С. Коньковой, Ю. Н. Матюшиным и Е. А. Мирошниченко в рамках государственного задания Федеральному исследовательскому центру химической физики им. Н. Н. Семенова РАН по теме 44.8 (0082-2014-0012)

Список литературы

- (a) Пепекин, В. И.; Лебедев, Ю. А. *Докл. АН СССР*, **1977**, 234, 1391. (b) Пепекин, В. И.; Губин, С. А. *Хим. физика* **2003**, 22(9), 72. (c) Викторов, С. Б.; Губин, С. А.; Маклашова, И. В.; Пепекин, В. И. *Хим. физика* **2005**, 24(12), 22. (d) Репекин, В. И. *Dokl. Phys. Chem.* **2007**, 414, 159. [*Докл. АН* **2007**, 414, 781.] (e) Репекин, В. И.; Губин, С. А. *Comb. Explos. Shock Waves* **2007**, 43, 84. [*Физика горения и взрыва* **2007**, 43(1), 99.] (f) Репекин, В. И. *Russ. J. Phys. Chem. B* **2010**, 4, 954. [*Хим. физика* **2010**, 29(12), 8.] (g) Bogdanova, Yu. A.; Gubin, S. A.; Korsunskii, B. L.; Repekin, V. I. *Comb. Explos. Shock Waves* **2009**, 45, 738. [*Физика горения и взрыва* **2009**, 45(6), 115.] (h) Repekin, V. I. *Russ. J. Phys. Chem. B* **2011**, 5, 41. [*Хим. физика* **2011**, 30(1), 20].
- Физика взрыва*; Орленко, Л. П., Ред.; Физматлит: Москва, т. 1, 2002.
- Repekin, V. I.; Korsunskii, B. L.; Denisaev, A. A. *Comb. Explos. Shock Waves* **2008**, 44, 586. [*Физика горения и взрыва* **2008**, 44(5), 101.]
- Green Energetic Materials*; Brinck, T., Ed.; Wiley: Chichester, 2014.
- (a) Keshavarz, M. H.; Abadi, Y. H.; Esmailpour, K.; Damiri, S.; Ofatadeh, M. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2017**, 53, 797. [*Химия гетероцикл. соединений* **2017**, 53, 797.]
- (b) Rudakov, G. F.; Moiseenko, Y. A.; Spesivtseva, N. A. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2017**, 53, 802. [*Химия гетероцикл. соединений* **2017**, 53, 802.] (c) Sinditskii, V. P.; Smirnov, S. P.; Egorshv, V. Yu.; Chernyi, A. N.; Shkineva, T. K.; Palysaeva, N. V.; Suponitsky, K. Yu.; Dalinger, I. L. *Thermochim. Acta* **2017**, 651, 83. (d) Wang, G.; Lu, T.; Fan, G.; Li, C.; Yin, H.; Chen, F.-X. *Chem.-Asian. J.* **2018**, 13, 3718. (e) Chen, D.; Yang, H.; Yi, Z.; Xiong, H.; Zhang, L.; Zhu, S.; Cheng, G. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, 57, 2081. (f) Shyder, C. J.; Wells, L. A.; Chavez, D. E.; Imler, G. H.; Parrish, D. A. *Chem. Commun.* **2019**, 2461. (g) Zhu, W.; Ye, Z.; Dong, Z. *New J. Chem.* **2019**, 43, 16300. (h) Ren, J.; Zhang, T.; Li, Z.; Wang, L.; Zhang, T. *Thermochim. Acta* **2019**, 682, 178391. (i) Wang, G.; Fu, Z.; Yin, H.; Chen, F.-X. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2019**, 44, 1010. (j) Sinditskii, V. P.; Burzhava, A. V.; Usuntsinova, A. V.; Egorshv, V. Yu.; Palysaeva, N. V.; Suponitsky, K. Yu.; Ananiev, I. V.; Sheremetev, A. B. *Combust. Flame* **2020**, 213, 343. (k) Wu, J.-T.; Xu, J.; Li, W.; Li, H.-B. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2020**, 45, 536. (l) Gao, H.; Zhang, Q.; Shreeve, J. M. *J. Mater. Chem. A* **2020**, 8, 4193. (m) O'Sullivan, O. T.; Zdilla, M. J. *Chem. Rev.* **2020**, 120, 5682.
- (a) Stinecipher, M. M. In *49th Calorimetry Conference*; Santa Fe, 1994. (b) Licht, H.-H.; Ritter, H. *J. Energ. Mater.* **1994**, 12, 223. (c) Chavez, D. E.; Hiskey, M. A. *J. Pyrotech.* **1998**, (7), 11. (d) Konkova, T. S.; Matyushin, Yu. N.; Miroshnichenko, E. A.; Vorobev, A. V.; Palysaeva, N. V.; Sheremetev, A. B. *Russ. J. Phys. Chem. B* **2020**, 14, 69. [*Хим. физика* **2020**, 39(1), 47.]
- Coburn, M. D.; Buntain, G. A.; Harris, B. W.; Hiskey, M. A.; Lee, K.-Y.; Ott, D. G. *J. Heterocycl. Chem.* **1991**, 28, 2049.
- Tolshchina, S. G.; Rusinov, G. L.; Charushin, V. N. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2013**, 49, 66. [*Химия гетероцикл. соединений* **2013**, 75.]
- (a) Latosh, N. I.; Rusinov, G. L.; Ganebnykh, I. N.; Chupakhin, O. N. *Russ. J. Org. Chem.* **1999**, 35, 1363. [*Журн. орган. химии* **1999**, 35, 1392.] (b) Novák, Z.; Bostai, B.; Csékei, M.; Lörincz, K.; Kotschy, A. *Heterocycles* **2003**, 60, 2653.
- Chavez, D. E.; Hiskey, M. A. *J. Heterocycl. Chem.* **1998**, 35, 1329.
- Rusinov, G. L.; Ganebnykh, I. N.; Chupakin, O. N. *Russ. J. Org. Chem.* **1999**, 35, 1350. [*Журн. орган. химии* **1999**, 35, 1379.]
- Cox, J. D.; Wagman, D. D.; Medvedev, V. A. *CODATA Key Values for Thermodynamics*; Hemisphere Publishing Corp.: New York, 1989.
- (a) Pedley, J. B. *Thermochemical Data and Structures of Organic Compounds*; Thermodynamic Research Center: College Station, 1994, vol. 1, p. 200. (b) Walters, R. N. *Fire Mater.* **2002**, 26, 131. (c) Sagadeev, E. V.; Gimadeev, A. A.; Barabanov, V. P. *Theor. Found. Chem. Eng.* **2009**, 43, 108. [*Теорет. основы хим. технологии* **2009**, 43, 114.]
- Wei, T.; Zhu, W.; Zhang, J.; Xiao, H. *J. Hazard. Mater.* **2010**, 179, 581.
- Kon'kova, T. S.; Matyushin, Yu. N.; Miroshnichenko, E. A.; Vorob'ev, A. B. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2009**, 58, 2020. [*Изв. АН, Сер. хим.* **2009**, 1958.]
- (a) Coburn, M. D.; Ott, D. G. *J. Heterocycl. Chem.* **1990**, 27, 1941. (b) Glidewell, C.; Lightfoot, P.; Royles, B. J. L.; Smith, D. M. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1997**, 1167.
- Иноземцев, Я. О.; Воробьев, А. Б.; Иноземцев, А. В.; Матюшин, Ю. Н. *Горение и взрыв* **2014**, 7, 260.