

С. Г. АЛЕКСЕЕВ, канд. хим. наук, доцент, чл.-корр. ВАНКБ, старший научный сотрудник Научно-инженерного центра "Надежность и ресурс больших систем и машин" УрО РАН (Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а); старший научный сотрудник Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: Alexshome@mail.ru)

А. Ю. КОШЕЛЕВ, старший преподаватель Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22); соискатель Научно-инженерного центра "Надежность и ресурс больших систем и машин" УрО РАН (Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Студенческая, 54а; e-mail: Alekshelev@mail.ru)

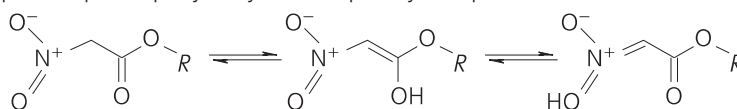
Н. М. БАРБИН, д-р техн. наук, канд. хим. наук, заведующий кафедрой химии Уральского государственного аграрного университета (Россия, 620075, г. Екатеринбург, ул. Карла Либкнехта, 42); старший научный сотрудник Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: NMBarbin@mail.ru)

М. А. СПИРИДОНОВ, д-р хим. наук, главный научный сотрудник Уральского института ГПС МЧС России (Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, 22; e-mail: sma@mtf.ustu.ru)

УДК 614.841.41:547-304.1:547-326

СВЯЗЬ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПОЖАРНОЙ ОПАСНОСТИ С ХИМИЧЕСКИМ СТРОЕНИЕМ. XIX. НИТРОАЦЕТАТЫ

Проведено QSPR-исследование в ряду нитроацетатов. Показано, что при температуре кипения исследуемые соединения существуют в смеси кето- и одной из енольной форм. При температуре вспышки в паровой фазе присутствуют все три таутомера:



Установлено, что прогнозирование температуры кипения и вспышки по одной изомерной форме дает неприемлемые результаты. С помощью программ ACD/Lab 2014 и TEST рассчитаны температуры кипения и вспышки кето- и енольных таутомеров нитроуксусных эфиров и изомерных смесей. Найдено, что с помощью метода углеродной цепи можно с точностью до 1–4 градусов сделать прогноз температур вспышки нитроацетатов. Для удобства применения данного метода предложено уравнение: $T_{всп} = -0,0833x^3 + 1,75x^2 - 4,5238x + 361,57$ (где x – число атомов углерода в молекуле).

Ключевые слова: эфир; нитроацетат; температура вспышки; прогноз; хемоинформатика.

DOI: 10.18322/PVB.2015.24.07.17-27

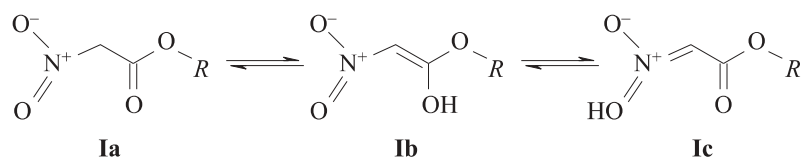
Одним из направлений хемоинформатики является поиск взаимосвязи между химическим строением и свойствами органических соединений. В этой области уже достигнут определенный прогресс, что нашло отражение в целом ряде обзоров, монографий и диссертаций [1–39].

Настоящая работа продолжает начатый нами цикл исследований по корреляции между химическим строением и пожарной опасностью различных классов органических соединений [40–57]. Объектом настоящего исследования являются нитроацетаты, в частности нитроуксусный эфир ($R=C_2H_5$). Он широко применяется в тонком органическом синтезе различных соединений, включая противовирусный препарат широкого спектра действия три-

азавирин [58], который может использоваться для борьбы с такими злободневными заболеваниями, как лихорадка Эбола, птичий и свиной грипп [59].

Необходимо отметить, что ациклические производные нитроуксусного эфира (I) существуют либо в кетоформе, либо в смеси кетоизомера с одним из енольных таутомеров (см. рисунок) [60].

В таблице представлены справочные и расчетные данные по температурам кипения и вспышки нитроэфиров (II)–(VIII). Прогнозирование температур кипения и вспышки выполнено с помощью специального программного обеспечения ACD/Lab 2014 (Advanced Chemistry Development, Inc., Canada) и TEST, версия 4.1 (Environmental Protection Agency, USA) для кето- и енольных форм и смесей изомеров. Тем-



Производные нитроуксусного эфира

Температуры кипения и вспышки соединений II–VIII

Соединение	R	$T_{\text{кип}}$, К	Ошибка, К	$T_{\text{всп}}$, К	Ошибка, К
II	CH ₃	468–471	–	–	–
IIa	CH ₃	472 ¹	2,5	354 ¹	8
		470 ²	0,5	378 ²	16
		447 ³	22,5	344 ³	22
		445 ⁴	24,5	363 ⁴	3
IIb	CH ₃	466 ¹	3,5	343 ¹	19
		–	–	385 ³	23
		–	–	403 ⁴	41
IIc	CH ₃	547 ¹	77,5	391 ¹	29
IIa + IIb	CH ₃	469 ¹	0,5	349 ¹	13
IIa + IIc	CH ₃	510 ¹	40,5	373 ¹	11
IIa + IIb + IIc	CH ₃	495 ¹	25,5	362 ¹	–
				<u>361</u>	1
				361*	1
III	CH ₂ CH ₃	513⁵ 515–518 500–502	–	366⁵ 365	–
IIIa	CH ₂ CH ₃	484 ¹	29	357 ¹	9
		482 ²	31	365 ²	1
		451 ³	62	360 ³	6
		457 ⁴	56	366 ⁴	0
IIIb	CH ₂ CH ₃	473 ¹	40	348 ¹	18
IIIc	CH ₂ CH ₃	549 ¹	36	394 ¹	
IIIa + IIIb	CH ₂ CH ₃	479 ¹	35	353 ¹	13
IIIa + IIIc	CH ₂ CH ₃	517 ¹	4	376 ¹	10
IIIa + IIIb + IIIc	CH ₂ CH ₃	502 ¹	11	366 ¹	0
				<u>367</u>	1
				366*	0
IVa	(CH ₂) ₂ CH ₃	475 ¹	41	361 ¹	11
		475 ³	41	367 ³	5
		475 ⁴	41	377 ⁴	5
IVb	(CH ₂) ₂ CH ₃	488 ¹	28	357 ¹	15
IVc	(CH ₂) ₂ CH ₃	557 ¹	41	399 ¹	27
IVa + IVb	(CH ₂) ₂ CH ₃	482 ²	34	359 ¹	13
IVa + IVc	(CH ₂) ₂ CH ₃	516¹	–	380 ¹	8
IVa + IVb + IVc	(CH ₂) ₂ CH ₃	507 ¹	9	372 ¹	–
				<u>374</u>	2
				372*	0
Va	(CH ₂) ₃ CH ₃	492 ¹	38	365 ¹	17
		484 ³	46	365 ³	17
		490 ⁴	40	383 ⁴	1

Соединение	R	$T_{кин}$, К	Ошибка, К	$T_{всп}$, К	Ошибка, К
Vb	(CH ₂) ₃ CH ₃	506 ¹	24	368 ¹	14
Vc	(CH ₂) ₃ CH ₃	568 ¹	38	405 ¹	23
Va + Vb	(CH ₂) ₃ CH ₃	499 ¹	31	370 ¹	12
Va + Vc	(CH ₂) ₃ CH ₃	530¹	–	389 ¹	7
Va + Vb + Vc	(CH ₂) ₃ CH ₃	522 ¹	8	382¹	–
				<u>379</u>	3
				379*	3
VIa	(CH ₂) ₄ CH ₃	511 ¹	36	370 ¹	15
		497 ³	50	371 ³	14
		–	–	390 ⁴	5
VIb	(CH ₂) ₄ CH ₃	523 ¹	24	373 ¹	12
VIc	(CH ₂) ₄ CH ₃	583 ¹	36	413 ¹	28
VIa + VIb	(CH ₂) ₄ CH ₃	517 ¹	30	372 ²	13
VIa + VIc	(CH ₂) ₄ CH ₃	547¹	–	392 ¹	7
VIa + VIb + VIc	(CH ₂) ₄ CH ₃	539 ¹	8	385¹	–
				<u>389</u>	4
				387*	2
VIIa	(CH ₂) ₅ CH ₃	529 ¹	33	374 ¹	21
		522 ³	40	378 ³	17
		–	–	398 ⁴	3
VIIb	(CH ₂) ₅ CH ₃	541 ¹	21	389 ¹	6
		–	–	417 ³	22
		–	–	460 ⁴	65
VIIc	(CH ₂) ₅ CH ₃	594 ¹	32	421 ¹	26
VIIa + VIIb	(CH ₂) ₅ CH ₃	535 ¹	27	382 ¹	13
VIIa + VIIc	(CH ₂) ₅ CH ₃	562¹	–	398 ¹	3
VIIa + VIIb + VIIc	(CH ₂) ₅ CH ₃	555 ¹	7	395¹	–
				<u>394</u>	1
				395	0
VIIIa	(CH ₂) ₆ CH ₃	547 ¹	30	378 ¹	24
		524 ³	53	380 ¹	22
VIIIb	(CH ₂) ₆ CH ₃	559 ¹	18	399 ¹	3
		–	–	401 ³	1
VIIIc	(CH ₂) ₆ CH ₃	607 ¹	30	429 ¹	27
VIIIa + VIIIb	(CH ₂) ₆ CH ₃	553 ¹	24	389 ¹	13
VIIIa + VIIIc	(CH ₂) ₆ CH ₃	577¹	–	404 ¹	2
VIIIa + VIIIb + VIIIc	(CH ₂) ₆ CH ₃	571 ¹	6	402¹	–
				<u>399</u>	3
				402	0

Примечания:

1. Нормальным шрифтом приведены экспериментальные данные из базы данных ACD/Lab. Курсивом выделены расчетные данные; курсивом с подчеркиванием — данные, полученные по методу углеродной цепи; курсивом со звездочкой — по предложенному уравнению (1); жирным шрифтом — значения, взятые в качестве эталона для сравнения.

2. Индексами 1–4 обозначены данные, полученные соответственно по методу программы ACD/Lab, по методу программы ACD/Lab по данным химической базы ChemSpider, по методу среднего значения (Consensus Method) программы TEST, по методу иерархической кластеризации (Hierarchical Clustering Method) программы TEST.

3. Индексом 5 обозначены данные, полученные авторами.

пературы кипения и вспышки смесей изомеров определены как средние значения показателей чистых изомеров. На основании сопоставления экспериментальных данных с результатами прогноза для метилового (II) и этилового (III) эфиров (см. таблицу) можно сделать вывод, что нитроуксусные эфиры (II)–(VIII) при кипении существуют в смеси кето- и одной из енольной форм, а при температуре вспышки в паровой фазе присутствуют все три изомера. С учетом этого выбраны соответствующие эталоны для сравнения результатов расчета температур кипения и вспышки нитроацетатов.

В предыдущих исследованиях [40–57] на различных классах органических соединений успешно ап-

робирован метод углеродной цепи (МУЦ). В случае нитроацетатов он также позволяет с точностью 1–4 К предсказывать температуру вспышки смеси изомеров нитроацетатов (см. таблицу). Для удобства применения МУЦ можно воспользоваться следующим эмпирическим уравнением:

$$T_{\text{всп}} = -0,0833x^3 + 1,75x^2 - 4,5238x + 361,57 \quad (r^2 = 0,9906), \quad (1)$$

где x — число атомов углерода в молекуле.

В заключение отметим, что при прогнозировании температур кипения и вспышки нитроацетатов необходимо учитывать таутомерные равновесия, поэтому расчеты этих показателей по чистому изомеру не дают приемлемых результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Todeschini R., Consonii V. Handbook of molecular descriptors // Methods and Principles in Medicinal Chemistry / R. Mannhold, H. Kubinyi, H. Timmerman (eds.). — Darmstadt : Wiley-VCH Verlag GmbH, 2000. — Vol. 11. — 667 p.
2. Todeschini R., Consonii V. Molecular descriptors for chemoinformatics. — Weinheim : Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009. — Vol. I & II. — 1265 p.
3. QSAR and Molecular Modeling Studies in Heterocyclic Drugs I / S. P. Gupta (ed.) // Topics in Heterocyclic Chemistry / R. R. Gupta (ed.). — Berlin : Springer-Verlag, 2006. — Vol. 3. — 278 p.
4. QSAR and Molecular Modeling Studies in Heterocyclic Drugs II / S. P. Gupta (ed.) // Topics in Heterocyclic Chemistry / R. R. Gupta (ed.). — Berlin : Springer-Verlag, 2006. — Vol. 4. — 296 p.
5. Statistical modelling of molecular descriptors in QSAR/QSPR / M. Dehmer, K. Varmuza, D. Bonchev, F. Emmert-Streib (eds.). — N. Y. : Wiley-Blackwell, 2012. — 456 p.
6. Roy K., Kar S., Das R. N. A primer on QSAR/QSPR modeling. Fundamental concepts. — Heidelberg : Springer, 2015. — 121 p.
7. Katritzky A. R., Kuanar M., Slavov S., Hall C. D., Karelson M., Kahn I., Dobchev D. A. Quantitative correlation of physical and chemical properties with chemical structure: utility for prediction // Chemical Reviews. — 2010. — Vol. 110, No. 10. — P. 5714–5789. DOI: 10.1021/cr900238d.
8. Батов Д. В. Использование аддитивно-группового метода для анализа, систематизации и прогнозирования показателей пожарной опасности горючих жидкостей // Российский химический журнал. — 2014. — Т. LVIII, № 2. — С. 4–14.
9. Алексеев С. Г., Смирнов В. В., Барбин Н. М. Температура вспышки. Часть II. Расчет через давление насыщенного пара // Пожаровзрывобезопасность. — 2012. — Т. 21, № 10. — С. 21–35.
10. Алексеев С. Г., Смирнов В. В., Алексеев К. С., Барбин Н. М. Температура вспышки. Часть III. Методы расчета через температуру кипения // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 3. — С. 30–43.
11. Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Смирнов В. В., Барбин Н. М. Температура вспышки. Часть IV. Дескрипторный метод расчета // Пожаровзрывобезопасность. — 2014. — Т. 23, № 5. — С. 18–37.
12. Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Барбин Н. М. Методы прогнозирования основных показателей пожаровзрывоопасности органических соединений // Техносферная безопасность. — 2015. — № 2(7). URL: <http://uigps.ru/content/nauchnyy-zhurnal#> (дата обращения: 05.07.2015).
13. Батов Д. В. Термохимия растворов органических неэлектролитов в смешанных растворителях : дис. ... д-ра хим. наук. — Иваново, 2002. — 317 с.
14. Виноградова М. Г. Расчетные методы исследования взаимосвязи “структура – свойство” в атомном представлении : дис. ... д-ра хим. наук. — Тверь, 2004. — 440 с.
15. Волков Л. П. Новые корреляции физических свойств веществ, способы их определения, прогнозирования : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — Самара, 2005. — 283 с.
16. Скворцова М. И. Математические модели и алгоритмы в исследованиях связи между структурой и свойствами органических соединений : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — М., 2007. — 272 с.
17. Васин А. Я. Взаимосвязь химического строения и пожаровзрывоопасности органических красителей, лекарственных средств и их аэрозвесей : дис. ... д-ра техн. наук. — М., 2008. — 306 с.

18. Кузнецов М. А. Научные основы прогнозирования и расчета термодинамических свойств неполярных углеводородов : дис. ... д-ра техн. наук. — Тамбов, 2008. — 325 с.
19. Баскин И. И. Моделирование свойств химических соединений с использованием искусственных нейронных сетей и фрагментных дескрипторов : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — М., 2009. — 365 с.
20. Кирлан С. А. Моделирование и прогноз свойств биологически активных гетероциклических соединений на основе связи “структура – активность – токсичность” : автореф. дис. ... д-ра хим. наук. — Уфа, 2011. — 49 с.
21. Гришина М. А. Анализ и прогноз биологической активности соединений на основе физико-химических закономерностей : автореф. дис. ... д-ра хим. наук. — Уфа, 2012. — 42 с.
22. Красных Е. Л. Давление насыщенных паров и энтальпии испарения кислородсодержащих соединений. Модифицированный QSPR-метод прогнозирования указанных свойств : дис. ... д-ра хим. наук. — Самара, 2015. — 247 с.
23. Боридко В. С. Программный комплекс для прогнозирования свойств сложных органических соединений на основе анализа неоднозначных зависимостей “структура – свойство” : дис. ... канд. техн. наук. — М., 2000. — 107 с.
24. Артеменко Н. В. Прогнозирование липофильности и других физико-химических свойств органических соединений с применением фрагментного подхода и искусственных нейронных сетей : дис. ... канд. хим. наук. — М., 2002. — 193 с.
25. Рыжов А. Н. Конформационный анализ алканов в задачах “структура – свойство” : дис. ... канд. хим. наук. — М., 2005. — 180 с.
26. Харитонова А. Г. Физико-химические свойства азотсодержащих гетероциклических соединений. Связь “структура – свойство” : автореф. дис. ... канд. хим. наук. — Самара, 2005. — 23 с.
27. Иванова А. А. Методология построения количественных моделей связи “структура – свойство” для разнородных выборок органических соединений : дис. ... канд. хим. наук. — М., 2007. — 186 с.
28. Захаров А. В. Прогноз количественных свойств органических соединений на основе дескрипторов атомных окрестностей : дис. ... канд. биол. наук. — М., 2008. — 120 с.
29. Аносова Е. Б. Пожаровзрывоопасность новых фармацевтических препаратов и полупродуктов их синтеза : дис. ... канд. техн. наук. — М., 2009. — 177 с.
30. Прохорова П. Е. Синтез и свойства карбонилпроизводных 1,2,3-триадиазола : дис. ... канд. хим. наук. — Екатеринбург, 2010. — 159 с.
31. Веденина Н. В. Анализ и прогнозирование экологической опасности органических веществ : автореф. дис. ... канд. техн. наук. — Волгоград, 2010. — 22 с.
32. Передерин Ю. В. Прогнозирование свойств высокоэнергетических композитов с использованием информационных технологий : дис. ... канд. техн. наук. — Бийск, 2013. — 179 с.
33. Nannoalal Y. Methods for the estimation of critical properties, liquid vapour pressure and liquid viscosity of organic compounds : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — University of Kwazulu-Natal, 2006. — 463 p.
34. Goodman B. T. Thermodynamic property prediction for solid organic compounds based on molecular structure : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Brigham Young University, 2010. — 108 p.
35. Rowley J. Flammability limits, flash points, and their consanguinity: critical analysis, experimental exploration, and prediction : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Brigham Young University, 2010. — 261 p.
36. Gebreyohannes S. Quantitative structure-property relationship generalized activity coefficient models : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Oklahoma State University, 2014. — 177 p.
37. Yerramsetty K. M. Quantitative structure-property relationship modeling & computer-aided molecular design: Improvements & applications : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Birla Institute of Technology and Science Pilani, 2005. — 292 p.
38. Krein M. On the development and use of large chemical similarity networks, informatics best practices and novel chemical descriptors towards materials quantitative structure property relationships : dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy. — Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute, 2011. — 207 p.
39. Sirimulla S. Computer aided drug design methods & quantitative structure – activity/property relationships. — University of Texas at El Paso, 2010. — 112 p.
40. Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. I. Алканолаы // Пожаровзрывобезопасность. — 2010. — Т. 19, № 5. — С. 23–30.

41. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. II. Кетоны (часть 1) // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2011. — Т. 20, № 6. — С. 8–15.
42. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. III. Кетоны (часть 2) // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2011. — Т. 20, № 7. — С. 8–13.
43. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Алексеев К. С., Орлов С. А.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. IV. Простые эфиры // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2011. — Т. 20, № 9. — С. 9–16.
44. *Алексеев К. С., Барбин Н. М., Алексеев С. Г.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. V. Карбоновые кислоты // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2012. — Т. 21, № 7. — С. 35–46.
45. *Алексеев К. С., Барбин Н. М., Алексеев С. Г.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VI. Альдегиды // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2012. — Т. 21, № 9. — С. 29–37.
46. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Смирнов В. В.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VII. Нитроалканы // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2012. — Т. 21, № 12. — С. 22–24.
47. *Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. VIII. Сложные эфиры (часть 1) // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2013. — Т. 22, № 1. — С. 31–57.
48. *Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. IX. Хлоралканы // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2013. — Т. 22, № 4. — С. 13–21.
49. *Алексеев С. Г., Алексеев К. С., Животинская Л. О., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. X. Сложные эфиры (часть 2) // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2013. — Т. 22, № 5. — С. 9–19.
50. *Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Калач А. В.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XI. Галогеналканы // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2013. — Т. 22, № 8. — С. 25–37.
51. *Алексеев С. Г., Мавлютова Л. К., Кошелев А. Ю., Алексеев К. С., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XII. Алкилбензолы и диалкилбензолы // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2014. — Т. 23, № 6. — С. 38–46.
52. *Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XIII. Тиоспирты // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2014. — Т. 23, № 8. — С. 15–25.
53. *Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XIV. Алкиламины // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2014. — Т. 23, № 9. — С. 27–37.
54. *Смирнов В. В., Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Животинская Л. О.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XV. Тиоэфиры // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2014. — Т. 23, № 11. — С. 24–33.
55. *Алексеев С. Г., Кошелев А. Ю., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XVI. α, ω -Аминоспирты // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2014. — Т. 23, № 12. — С. 13–19.
56. *Алексеев С. Г., Мавлютова Л. К., Кошелев А. Ю., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XVII. Дихлоралканы // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2015. — Т. 24, № 1. — С. 25–39.
57. *Алексеев С. Г., Кошелев А. Ю., Барбин Н. М.* Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XVIII. Алкильные производные аминотанолола // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2015. — Т. 24, № 2. — С. 36–44.
58. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Авдеев А. С., Пицальников А. В., Орлов С. А., Уломский Е. Н., Артемьев Г. А.* Показатели пожаровзрывоопасности нитроуксусного эфира // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2008. — Т. 17, № 5. — С. 48–53.
59. *Алексеев С. Г., Барбин Н. М., Авдеев А. С., Пицальников А. В., Орлов С. А., Уломский Е. Н.* Показатели пожаровзрывоопасности противовирусного препарата триазавирина и полупродуктов его синтеза // *Пожаровзрывобезопасность*. — 2008. — Т. 17, № 3. — С. 46–48.

60. Азотсодержащие соединения / Под ред. И. О. Сазерленда // Общая органическая химия / Под ред. Д. Бартона, У. Д. Оллиса. — М. : Химия, 1982. — Т. 3. — 736 с.

Материал поступил в редакцию 12 июня 2015 г.

Для цитирования: Алексеев С. Г., Кошелев А. Ю., Барбин Н. М., Спиридонов М. А. Связь показателей пожарной опасности с химическим строением. XIX. Нитроацетаты // Пожаровзрывобезопасность. — 2015. — Т. 24, № 7. — С. 17–27. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.07.17-27.

English

CORRELATION OF FIRE HAZARD CHARACTERISTICS WITH CHEMICAL STRUCTURE. XIX. NITROACETATES

ALEXEEV S. G., Candidate of Chemistry Sciences, Associate Professor, Corresponding Member of WASCs, Senior Researcher of Science and Engineering Centre "Reliability and Safety of Large Systems" of Ural Branch of Russian Academy of Sciences (Studencheskaya St., 54a, Yekaterinburg, 620049, Russian Federation); Senior Researcher of Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: Alexshome@mail.ru)

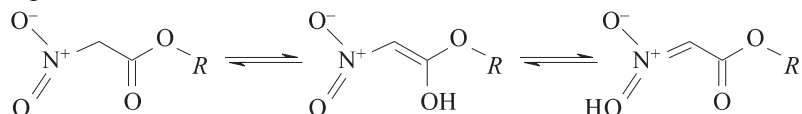
KOSHELEV A. Yu., Senior Lecturer of Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation); Postgraduate Student of Science and Engineering Centre "Reliability and Safety of Large Systems" of Ural Branch of Russian Academy of Sciences (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: Aleksheliev@mail.ru)

BARBIN N. M., Doctor of Technical Sciences, Head of Chemistry Department, Ural State Agrarian University (Karla Libknekhta St., 42, Yekaterinburg, 620075, Russian Federation); Senior Researcher, Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: NMBarbin@mail.ru)

SPIRIDONOV M. A., Doctor of Chemical Sciences, Senior Researcher of Ural State Fire Service Institute of Emercom of Russia (Mira St., 22, Yekaterinburg, 620062, Russian Federation; e-mail address: sma@mtf.ustu.ru)

ABSTRACT

QSPR research in the number of nitroacetates is carried out. It is shown that at the boiling point these compounds exist in mix the keto form and one of the enol forms. There are all three tautomers at flash point in a vapor phase:



It is established that prediction of the boiling and flash points for one of tautomer forms gives unacceptable results. Boiling and flash points of the keto and enol tautomers of nitroacetic esters and isomeric mixtures was calculated by ACD/Lab 2014 and TEST programs. It was found that flash points of nitroesters can be predicted up to 1–4 degrees using the method of the carbon chain. Empirical equations $FP = -0,0833x^3 + 1,75x^2 - 4,5238x + 361,57$ (where x is number of carbon atoms in a molecule) has proposed for the convenience using of this method.

Keywords: esters; nitroacetate; flash point; predict; chemoinformatics.

REFERENCES

1. Todeschini R., Consonii V. Handbook of molecular descriptors. In: Mannhold R., Kubinyi H., Timmerman H. (eds.). *Methods and Principles in Medicinal Chemistry*. Darmstadt, Wiley-VCH Verlag GmbH, 2000, vol. 11. 667 p.

2. Todeschini R., Consonni V. *Molecular descriptors for chemoinformatics*. Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009, vol. I & II. 1265 p.
3. Gupta S. P. (ed.). *QSAR and Molecular Modeling Studies in Heterocyclic Drugs I*. In: Gupta R. R. (ed.). *Topics in Heterocyclic Chemistry*. Berlin, Springer-Verlag, 2006, vol. 3. 278 p.
4. Gupta S. P. (ed.). *QSAR and Molecular Modeling Studies in Heterocyclic Drugs II*. In: Gupta R. R. (ed.). *Topics in Heterocyclic Chemistry*. Berlin, Springer-Verlag, 2006, vol. 4. 296 p.
5. Dehmer M., Varmuza K., Bonchev D., Emmert-Streib F. (eds.). *Statistical modelling of molecular descriptors in QSAR/QSPR*. N. Y., Wiley-Blackwell, 2012. 456 p.
6. Roy K., Kar S., Das R. N. *A primer on QSAR/QSPR modeling. Fundamental concepts*. Heidelberg, Springer, 2015. 121 p.
7. Katritzky A. R., Kuanar M., Slavov S., Hall C. D., Karelson M., Kahn I., Dobchev D. A. Quantitative correlation of physical and chemical properties with chemical structure: utility for prediction. *Chemical Reviews*, 2010, vol. 110, no. 10, pp. 5714–5789. DOI: 10.1021/cr900238d.
8. Batov D. V. Ispolzovaniye additivno-grupпового metoda dlya analiza, sistematizatsii i prognozirovaniya pokazateley pozharной opasnosti goryuchikh zhidkostey [Use of an additive and group method for the analysis, systematization and forecasting of indicators of fire hazard of combustible liquids]. *Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal — Russian Chemical Journal*, 2014, vol. LVIII, no. 2, pp. 4–14.
9. Alexeev S. G., Smirnov V. V., Barbin N. M. Temperatura vspyshki. Chast II. Raschet cherez davleniye nasyshchennogo para [Flash point. Part II. Calculation via partial pressure]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 10, pp. 21–35.
10. Alexeev S. G., Smirnov V. V., Alexeev K. S., Barbin N. M. Temperatura vspyshki. Chast III. Raschet cherez temperaturu kipeniya [Flash point. Part III. Calculation via boiling point]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 3, pp. 30–43.
11. Alexeev S. G., Smirnov V. V., Alexeev K. S., Barbin N. M. Temperatura vspyshki. Chast IV. Deskriptornyy metod rascheta [Flash point. Part IV. Descriptors method of calculation]. *Pozharovzryvobezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 5, pp. 18–37.
12. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Barbin N. M. Metody prognozirovaniya osnovnykh pokazateley pozharovzryvopasnosti organicheskikh soyedineniy [Methods of forecasting major indices fire and explosive hazards of organic compounds]. *Tekhnosfernaya bezopasnost — Technosphere Safety*, 2015, no. 2(7). Available at: <http://uigps.ru/content/nauchnyy-zhurnal#> (Accessed 5 July 2015).
13. Batov D. V. *Termokhimiya rastvorov organicheskikh neelektrolitov v smeshannykh rastvoritelyakh. Dis. dokt. khim. nauk* [Thermochemistry of solutions of organic nonelectrolytes in the mixed solvents. Dr. chem. sci. diss.]. Ivanovo, 2002. 317 p.
14. Vinogradova M. G. *Raschetnyye metody issledovaniya vzaimosvyazi “struktura – svoystvo” v atomnom predstavlenii. Dis. dokt. khim. nauk* [Calculation methods of research of interrelation “structure – property” in atom-nuclear representation. Dr. chem. sci. diss.]. Tver, 2004. 440 p.
15. Volkov L. P. *Novyye korrelyatsii fizicheskikh svoystv veshchestv, sposoby ikh opredeleniya, prognozirovaniya. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [New correlations of physical properties of substances, ways of their definition, forecasting. Dr. phys. and math. sci. diss.]. Samara, 2005. 283 p.
16. Skvortsova M. I. *Matematicheskiye modeli i algoritmy v issledovaniyakh svyazi mezhdru strukturoy i svoystvami organicheskikh soyedineniy. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [Mathematical models and algorithms in researches of communication between structure and properties of organic compounds. Dr. phys. and math. sci. diss.]. Moscow, 2007. 272 p.
17. Vasin A. Ya. *Vzaimosvyaz khimicheskogo stroyeniya i pozharovzryvopasnosti organicheskikh krasi-teley, lekarstvennykh sredstv i ikh aerovzvesey. Dis. dokt. tekhn. nauk* [Interrelation of a chemical structure and fire-and-explosion hazard of organic dyes, medicines and their aero suspensions. Dr. tech. sci. diss.]. Moscow, 2008. 306 p.
18. Kuznetsov M. A. *Nauchnyye osnovy prognozirovaniya i rascheta termodinamicheskikh svoystv nepolyarnykh uglevodorodov. Dis. dokt. tekhn. nauk* [Scientific bases of forecasting and calculation of thermodynamic properties of unpolar hydrocarbons. Dr. tech. sci. diss.]. Tambov, 2008. 325 p.
19. Baskin I. I. *Modelirovaniye svoystv khimicheskikh soyedineniy s ispolzovaniyem iskusstvennykh neyronnykh setey i fragmentnykh deskriptorov. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [Modeling of properties of chemical compounds with use of artificial neural networks and fragmentary descriptors. Dr. phys. and math. sci. diss.]. Moscow, 2009. 365 p.

20. Kirilan S. A. *Modelirovaniye i prognoz svoystv biologicheskii aktivnykh geterotsiklicheskih soyedineniy na osnove svyazi "struktura – aktivnost – toksichnost"*. Avtoref. dis. dokt. khim. nauk [Modeling and the forecast of properties of biologically active heterocyclic compounds on the basis of communication "structure – activity – toxicity". Dr. chem. sci. thesis]. Ufa, 2011. 49 p.
21. Grishina M. A. *Analiz i prognoz biologicheskoy aktivnosti soyedineniy na osnove fiziko-khimicheskikh zakonomernostey*. Avtoref. dis. dokt. khim. nauk [The analysis and the forecast of biological activity of connections on the basis of physical and chemical regularities. Dr. chem. sci. thesis]. Ufa, 2012. 42 p.
22. Krasnykh E. L. *Davleniye nasyshchennykh parov i entalpii ispareniya kislorodsoderzhashchikh soyedineniy. Modifitsirovannyi QSPR-metod prognozirovaniya ukazannykh svoystv*. Dis. dokt. khim. nauk [Pressure of saturated steam and enthalpy of evaporation oxygen of the containing connections. The modified QSPR — a method of forecasting of the specified properties. Dr. chem. sci. diss.]. Samara, 2015. 247 p.
23. Boridko V. S. *Programmnyy kompleks dlya prognozirovaniya svoystv slozhnykh organicheskikh soyedineniy na osnove analiza neodnoznachnykh zavisimostey "struktura – svoystvo"*. Dis. kand. tekhn. nauk [Program complex for forecasting of properties of difficult organic compounds on the basis of the analysis of ambiguous dependences "structure – property". Cand. tech. sci. diss.]. Moscow, 2000. 107 p.
24. Artemenko N. V. *Prognozirovaniye lipofilnosti i drugikh fiziko-khimicheskikh svoystv organicheskikh soyedineniy s primeneniye fragmentnogo podkhoda i iskusstvennykh neyronnykh setey*. Dis. kand. khim. nauk [Forecasting of a lipofilnost and other physical and chemical properties of organic compounds with application of fragmentary approach and artificial neural networks. Cand. chem. sci. diss.]. Moscow, 2002. 193 p.
25. Ryzhov A. N. *Konformatsionnyy analiz alkanov v zadachakh "struktura – svoystvo"*. Dis. kand. khim. nauk [The conformational analysis of alkanes in tasks "structure – property". Cand. chem. sci. diss.]. Moscow, 2005. 180 p.
26. Kharitonova A. G. *Fiziko-khimicheskiye svoystva azotsoderzhashchikh geterotsiklicheskih soyedineniy. Svyaz "struktura – svoystvo"*. Avtoref. dis. kand. khim. nauk [Physical and chemical properties of nitrogen-containing heterocyclic compounds. Communication "structure – property". Cand. chem. sci. thesis]. Samara, 2005. 23 p.
27. Ivanova A. A. *Metodologiya postroyeniya kolichestvennykh modeley svyazi "struktura – svoystvo" dlya raznorodnykh vyborok organicheskikh soyedineniy*. Dis. kand. khim. nauk [Methodology of creation of quantitative models of communication "structure – property" for diverse selections of organic compounds. Cand. chem. sci. diss.]. Moscow, 2007. 186 p.
28. Zakharov A. V. *Prognoz kolichestvennykh svoystv organicheskikh soyedineniy na osnove deskriptorov atomnykh okrestnostey*. Dis. kand. biol. nauk [The forecast of quantitative properties of organic compounds on the basis of descriptors of nuclear vicinities. Cand. biol. sci. diss.]. Moscow, 2008. 120 p.
29. Anosova E. B. *Pozharovzryvoopasnost novykh farmatsevticheskikh preparatov i poluproduktov ikh sinteza*. Dis. kand. tekhn. nauk [Fire-and-explosion hazard of new pharmaceutical preparations and semi-products of their synthesis. Cand. tech. sci. diss.]. Moscow, 2009. 177 p.
30. Prokhorova P. E. *Sintez i svoystva karbonilproizvodnykh 1,2,3-tiadiazola*. Dis. kand. khim. nauk [Synthesis and properties of carbonyl derivatives of 1,2,3-tiadiazol. Cand. chem. sci. diss.]. Yekaterinburg, 2010. 159 p.
31. Vedenina N. V. *Analiz i prognozirovaniye ekologicheskoy opasnosti organicheskikh veshchestv*. Avtoref. dis. kand. tekhn. nauk [Analysis and forecasting of ecological danger of organic substances. Cand. tech. sci. thesis]. Volgograd, 2010. 22 p.
32. Perederin Yu. V. *Prognozirovaniye svoystv vysokoenergeticheskikh kompozitov s ispolzovaniye informatsionnykh tekhnologiy*. Dis. kand. tekhn. nauk [Forecasting of properties of high-energy composites with use of information technologies. Cand. tech. sci. diss.]. Biysk, 2013. 179 p.
33. Nannoolal Y. *Methods for the estimation of critical properties, liquid vapour pressure and liquid viscosity of organic compounds*. Dr. Ph. Diss. University of Kwazulu-Natal, 2006. 463 p.
34. Goodman B. T. *Thermodynamic property prediction for solid organic compounds based on molecular structure*. Dr. Ph. Diss. Brigham Young University, 2010. 108 p.
35. Rowley J. *Flammability limits, flash points, and their consanguinity: critical analysis, experimental exploration, and prediction*. Dr. Ph. Diss. Brigham Young University, 2010. 261 p.
36. Gebreyohannes S. *Quantitative structure-property relationship generalized activity coefficient models*. Dr. Ph. Diss. Oklahoma State University, 2014. 177 p.

37. Yerramsetty K. M. *Quantitative structure-property relationship modeling & computer-aided molecular design: Improvements & applications*. Dr. Ph. Diss. Birla Institute of Technology and Science Pilani, 2005. 292 p.
38. Krein M. *On the development and use of large chemical similarity networks, informatics best practices and novel chemical descriptors towards materials quantitative structure property relationships*. Dr. Ph. Diss. Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute, 2011. 207 p.
39. Sirimulla S. *Computer aided drug design methods & quantitative structure-activity/property relationships*. Dr. Ph. Diss. University of Texas at El Paso, 2010. 112 p.
40. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. I. Alkanoly [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. I. Alcohols]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2010, vol. 19, no. 5, pp. 23–30.
41. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. II. Ketony (chast 1) [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. II. Ketones (part 1)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 6, pp. 8–15.
42. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. III. Ketony (chast 2) [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. III. Ketones (part 2)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 7, pp. 8–13.
43. Alexeev S. G., Barbin N. M., Alexeev K. S., Orlov S. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. IV. Prostyye efiry [Correlation of fire hazard indices with chemical structure. IV. Ethers]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2011, vol. 20, no. 9, pp. 9–16.
44. Alexeev K. S., Barbin N. M., Alexeev S. G. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. V. Karbonovyye kisloty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. V. Carboxylic acids]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 7, pp. 35–46.
45. Alexeev K. S., Barbin N. M., Alexeev S. G. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. VI. Aldegidy [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VI. Aldehydes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 9, pp. 29–37.
46. Alexeev S. G., Barbin N. M., Smirnov V. V. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. VII. Nitroalkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VII. Nitroalkanes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2012, vol. 21, no. 12, pp. 22–24.
47. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. VIII. Slozhnyye efiry (chast 1) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. VIII. Esters (part 1)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 1, pp. 31–57.
48. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhivotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. IX. Khlorkalkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. IX. Chloroalkanes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 4, pp. 13–21.
49. Alexeev S. G., Alexeev K. S., Zhivotinskaya L. O., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. X. Slozhnyye efiry (chast 2) [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. X. Esters (part 2)]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 5, pp. 9–19.
50. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Kalach A. V. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. XI. Galogenalkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XI. Haloalkanes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2013, vol. 22, no. 8, pp. 25–37.
51. Alexeev S. G., Mavlyutova L. K., Koshelev A. Yu., Alexeev K. S., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. XII. Alkilbenzoly i dialkilbenzoly [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XII. Alkyl benzenes and dialkyl benzenes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 6, pp. 38–46.
52. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhivotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniyem. XIII. Tiospirty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XIII. Alkylthiols]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 8, pp. 15–25.

53. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XIV. Alkilaminy [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XIV. Alkylamines]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 9, pp. 27–37.
54. Smirnov V. V., Alexeev S. G., Barbin N. M., Zhihotinskaya L. O. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XV. Tioefiry [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XV. Thioethers]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 11, pp. 24–33.
55. Alexeev S. G., Koshelev A. Yu., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XVI. α,ω -Aminospiirty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XVI. α,ω -Alkanolamines]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2014, vol. 23, no. 12, pp. 13–19.
56. Alexeev S. G., Mavlyutova L. K., Koshelev A. Yu., Alexeev K. S., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XVII. Dikhloralkany [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XVII. Dichloroalkanes]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2015, vol. 24, no. 1, pp. 25–39.
57. Alexeev S. G., Koshelev A. Yu., Barbin N. M. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XVIII. Alkilnyye proizvodnyye aminometanola [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XVIII. Alkyl derivatives of aminomethanol]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2015, vol. 24, no. 2, pp. 36–44.
58. Alexeev S. G., Barbin N. M., Avdeev A. S., Pishchalnikov A. V., Orlov S. A., Ulomskiy E. N., Artemyev G. A. Pokazateli pozharovzryvoopasnosti nitrouksusnogo efira [Fire-and-explosion hazard characteristics of nitroacetic ether]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2008, vol. 17, no. 5, pp. 48–53.
59. Alexeev S. G., Barbin N. M., Avdeev A. S., Pishchalnikov A. V., Orlov S. A., Ulomsky E. N. Pokazateli pozharovzryvoopasnosti protivovirusnogo preparata triazavirina i poluproduktov yego sinteza [Fire and explosion hazard characteristics of the antiviral drug triazavirin and semi-products of its synthesis]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2008, vol. 17, no. 3, pp. 46–48.
60. Sutherland I. O. (ed.). Nitrogen compounds. In: Barton D., Ollis U. D. (eds.). *Comprehensive Organic Chemistry. The Synthesis and Reactions of Organic Compounds*. Oxford, Pergamon Press, 1979, vol. 2. 1329 p. (Russ. ed.: Sazerlend I. O. (ed.). Azotsoderzhashchiye soyedineniya. *Obshchaya organicheskaya khimiya*. Moscow, Khimiya Publ., 1982, vol. 3. 736 p.).

For citation: Alexeev S. G., Koshelev A. Yu., Barbin N. M., Spiridonov M. A. Svyaz pokazateley pozharnoy opasnosti s khimicheskim stroyeniym. XIX. Nitroatsetaty [Correlation of fire hazard characteristics with chemical structure. XIX. Nitroacetates]. *Pozharovzryvbezopasnost — Fire and Explosion Safety*, 2015, vol. 24, no. 7, pp. 17–27. DOI: 10.18322/PVB.2015.24.07.17-27.