

Two dimensional analysis between the performance and the sensitivity of methylnitroimidazole derivatives

One Kwon Rim★

The 4th R&D Institute, Agency for Defense Development (ADD), Daejeon, 34186, Korea

Department of Weapon System Engineering, University of Science & Technology (UST)

(Received October 5, 2015; Revised December 1, 2015; Accepted December 1, 2015)

메틸나이트로이미다졸 유도체의 성능-감도 이차원적 분석

임완권★

국방과학연구소 4본부

과학기술연합대학원대학교 무기체계공학과

(2015. 10. 5. 접수, 2015. 12. 1. 수정, 2015. 12. 1. 승인)

Abstract: Two-dimensional analysis between the explosive performance and the impact sensitivity for methylnitroimidazole derivatives was performed to understand where these new energetic molecules could be utilized. The explosive performance was analyzed with the Cheetah program, while the impact sensitivity was predicted using neural network analysis. Successive nitration of methylimidazole made the molecule more sensitive, but methyltrinitroimidazole appeared to have a relatively good safety characteristic. We recently developed a novel method to analyze the potential usage of new energetic molecules using a two-dimensional chart, where the explosive performance and the impact sensitivity were located on the X-axis and Y-axis, respectively. An analysis of a two-dimensional plot between the performance and the sensitivity indicated that methyldinitroimidazole would be useful for insensitive explosive formulations, while methyltrinitroimidazole was forecasted for use as an ingredient for high explosive formulations.

요약: 메틸나이트로이미다졸계 유도체들에 관한 화약 성능과 충격감도 간의 이차원 분석이 이들 물질의 효용성을 판단하기 위해 진행되었다. 화약 성능은 Cheetah 프로그램으로 계산되었으며, 충격감도는 인공신경망 연구로 예측했다. 연속적인 나이트로기의 치환이 분자들을 민감하게 하지만 메틸트라이나이트로이미다졸까지도 비교적 안전한 상태를 유지하는 것으로 예측된다. 최근에 국방과학연구소에서는 성능과 감도를 X, Y축에 도시하고 신규화약물질의 유용성을 전체적으로 분석하는 방안을 개발하였다. 이들 성능-감도 이차원 그래프에 따르면 메틸다이나이트로이미다졸계 유도체들은 둔감화약조성에 사용이 가능할 것으로 판단되고, 반면 메틸트라이나이트로이미다졸은 고퍃화약조성에 사용할 수 있을 것으로 판단된다.

Key words: Explosive performance, Impact sensitivity, Cheetah program, Neural network, Methylnitroimidazole

★ Corresponding author

Phone : +82-(0)42-821-2987 Fax : +82-(0)42-823-3400

E-mail : okrim@add.re.kr

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서 론

신규 고에너지물질 개발은 일반적으로 두 가지 방향으로 많이 진행되고 있다. 하나는 화학적 위력이 매우 뛰어난 고에너지를 함유한 물질이나 조성을 개발하는 작업이며, 또 다른 하나는 일정 수준의 충격에도 안정할 정도의 둔감한 물질이나 조성을 개발하는 작업이다. 이들 두 작업은 상호 상반된 특성을 지니고 있어서 성능이 매우 우수한 화학이어도 너무 민감하면 사용할 수 없는 실정이며, 또한 취급에 안전한 화약을 개발하더라도 위력이 너무 낮으면 효용성이 매우 제한적일 수 밖에 없는 실정이다. 그러므로 신규 화약물질의 효율성을 검토하는 과정에서 이들 두 가지 요소를 병행 검토할 수 밖에 없는 실정이다.¹⁴

기존 화학의 성능을 예측하고 분석하는 작업은 첫 번째 원리를 이용하여 다양한 화학적 특성치들을 계산하고 이들을 통해서 자유에너지를 최소화하는 반응 경로를 연구하여 최근에는 매우 정확하게 예측하고 있는 실정이다. 하지만 화학 성능과는 달리 안정성을 분석할 수 있는 작업은 현재까지도 많은 논란이 있다. 많은 연구자들이 특정한 분자설명인자 하나 또는 몇 개를 이용하여 화학의 안정성을 예측하려는 시도를 많이 하였으나 전반적으로 학계에서 수용할 만한 상관관계를 제시하지 못하고 있는 실정이다.⁵ 이런 문제점에는 여러 가지 이유가 있는 것으로 판단하고 있다. 첫째는 실험치가 정확한 화약물질의 안전특성을 반영하기가 힘든 실정이다. 현재 널리 사용되는 안전특성을 예측하는 실험으로 일정 무게의 추를 떨어뜨려 소량의 화약물질에 충격을 가하고는 화약물질이 반응하거나 또는 반응하지 않는 50%의 확률을 지닌 높이를 에너지로 환산하여 사용하고 있으나⁶ 본 실험은 제약 개발 시의 동물실험과 유사한 성격으로 정량화된 수치의 의미가 모호한 실정이다. 또한 시험시의 주변조건과 시험장치 등에 영향을 받아 재현성이 떨어지는 문제점도 있다.

현재 화약물질의 민감도를 추정하기 위해서는 화학의 조성을 개발한 뒤에 다량의 화약량을 사용해서 진행하는 대형갭실험(Large Scale Gap Test)이 비교적 정확하면서도 재현성 있는 결과를 제공하는 것으로 알려지고 있다.⁷ 하지만 본 방법을 신규 화약물질에 사용하기에는 다량의 화약물질이 필요하며, 화학 조성 개발과정을 거쳐야 하므로 상당한 시간과 노력이 필요한 실정이어서 신규 물질의 스크리닝을 위한 작업에 적용하기에는 불가능한 실정이다. 그러므로 소량의

화학 샘플을 사용하여 일정 무게의 추를 떨어뜨려 측정하는 충격감도 실험이 현재로서는 가장 현실적인 실험일 것으로 판단한다. 하지만 본 실험은 다소 재현성이 떨어지며, 화약물질의 물리적 형태에 따라서도 달라지는 실험이므로 그 결과 분석에 매우 주의를 요하는 실정이다. 이런 연유로 성능-감도 이차원적 그래프에 적용할 때에는 충격감도 결과를 로그 수치로 변환하여 도시하고 있다. 대부분의 충격감도와 물리적 또는 화학적 특성치를 비교하는 작업에서도 충격감도 수치를 직접적으로 상관관계 도출에 사용하지 않고 로그 수치로 변환하여 사용하고 있는 실정이다. 그러므로 이런 경우에는 특정 분자설명인자들을 사용하여 예측작업을 수행하는 것 보다는 기존의 모든 실험결과들과 다양한 분자설명인자들을 동원하는 지식기반적 접근방법이 더 효율적일 것으로 판단한다. 현재 국과연에서는 한남대학교, 분자설계연구소와 공동으로 개발한 지식 기반적 방법인 인공지능망 연구를 이용하여 비교적 우수한 예측력을 확보하고 있으며, 화학의 안전 특성의 예측력을 높이는 연구를 지속적으로 수행하고 있다.

2. 연구 방법

본 연구에 기술된 방안들은 국방과학연구소(이하 국과연으로 약칭) 고폭화약팀에서 기 개발한 화학 모델링 표준절차인 ADD Method-1⁸에 따라 진행한 내용으로 사용한 프로그램으로는 화약분자의 안정화된 삼차원적 구조 및 에너지 계산에는 Gaussian-03 프로그램을,⁹ 화약성능 계산에는 Cheetah 프로그램을, 충

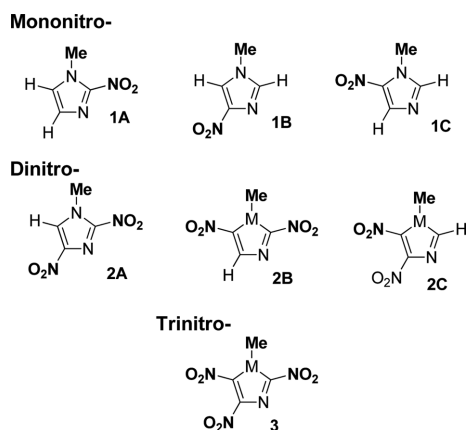


Fig. 1. Chemical structures of methylnitroimidazoles studied in this work.

격감도 계산에는 프로파게이터 프로그램을 사용하였다.¹⁰ 본 연구에 사용된 메틸나이트로이미다졸 유도체들은 나이트로 치환기 1 개인 화합물 3 종, 나이트로 치환기 2 개인 화합물 3 종, 나이트로 치환기 3 개인 화합물 1 종에 대한 분석작업을 수행하였다. 연구대상 화합물은 Fig. 1에 도시하였다.

2.1. 화약성능 예측 작업

메틸나이트로이미다졸계 유도체 화합물에 대한 화약 성능 계산은 미국 로렌스리버모어 국립연구소에서 개발된 화약성능 계산 프로그램인 Cheetah 프로그램을 사용하였다.¹¹ 자세한 계산 절차와 계산 결과에 관해서 본 논문 앞에 투고된 논문에 상세하게 보고하였다.¹²

2.2. 충격감도 예측 작업

충격감도 예측은 인공신경망 작업을 수행하였다. 초기 화약물질의 충격감도를 인공신경망으로 예측하는 작업은 Nefati 등이 수행하였다.¹³ 이들은 Storm, Stine, and Kramer (SSK)가 수집한 약 200여개의 화약분자들의 충격감도 수치를 동원하여 작업을 하였다.¹⁴ 본 연구에도 SSK가 발간한 충격감도 데이터베이스를 동원하여 수행하였으며, 기본적인 충격감도 용 인공신경망 최적화 작업은 국과연, 한남대학교, 분자설계연구소에서 공동으로 작업을 수행하여 수립하였다.¹⁰ 본 연구에서 수행한 충격감도 예측연구는 기존에 설정한 인공신경망 최적화 결과를 사용하였다. 최적화된 인공신경망 구조에는 17 개의 위상적 분자설명인자들(산소당량, N=N결합 수, C=O 결합수, CO₂ 개수, C(sp³)-NO₂ 결합수, C(sp³)-NO₂ 결합수, N-NO₂ 결합수, O-NO₂ 결합수, 고리 개수, NH₂ 개수, OH 개수, C(NO₂)₃ 개수,

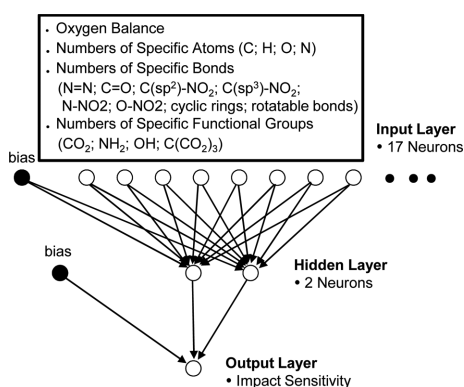


Fig. 2. Architecture of artificial neural network used in this work.

C 개수, H 개수, N 개수, O 개수, 회전가능한 결합수)을 사용하고, 은닉층에 2 개의 뉴런을 두는 구조를 사용하여 작업을 수행하였다. 화약분자를 위한 훈련작업은 기존의 논문¹⁰에 기술한 바와 같이 작업을 하였으며, 훈련된 인공신경망 구조를 이용하여 신규 메틸나이트로이미다졸 유도체를 계산하였다. 계산은 총 10 번 수행하였으며, 그 결과를 평균하여 사용하였다. 본 연구에 사용된 인공신경망의 구조는 Fig. 2에 보는 바와 같다.

2.3. 성능-감도 이차원적 분석

화약 성능과 감도가 계산이 되면 신규 화약물질이나 조성에 대한 성능과 감도 전반에 대한 분석이 가능하다. 일반적으로 널리 알려진 화약들을 이용하여 성능과 감도의 개략적 관계를 보면 Fig. 3과 같은 형태로 나타나고 있다. 이런 많은 연구가 진행되면서도 뛰어난 화약분자를 개발하기 어려운 현실은 화약 성능과 감도의 이차원적인 그래프를 보면 쉽게 이해가 가능하다.⁸ 즉 둔감성이 뛰어나면 성능은 다소 떨어지게 되고, 반면 화약 분자의 성능이 뛰어나면 민감한 것으로 알려져 이들 두 특성이 서로 상반적인 경향을 띠는 것으로 알려져 있다. 그러므로 고성능을 가지면서 둔감성도 뛰어난 화약들은 Fig. 3의 그래프에서 우측 상부에 자리를 점하여야 하며 이와 같은 화약을 개발하는 작업이 화약계의 큰 목표라 할 수 있다. 현재로서는 대부분의 최상의 화약들이 점선의 반비례 곡선 선상에 위치하게 되어 있어 이들의 한계를 넘는 화약의 개발이 매우 중요한 연구 과제이다. 또한 최근에는 둔감화약에 대한 관심에 매우 높아져 지정 둔감성 이상에서 화약 조성을 개발해야 하는 사례가 많아

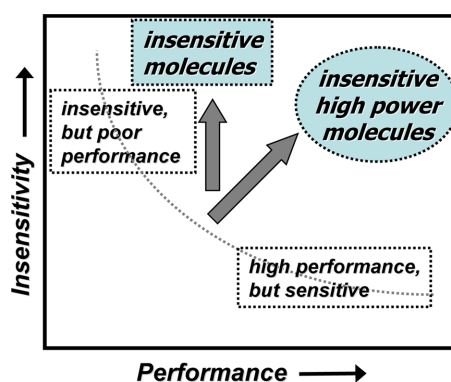


Fig. 3. Schematic diagram of two dimensional plot between the performance and the sensitivity.

Table 1. C-J pressure, detonation velocity, and impact sensitivity of methylnitroimidazole derivatives^a

Compounds	Detonation Velocity (km/sec)	C-J Pressure (GPa)	Impact Sensitivity (log(H _{50%}), ^b cm) ^c
1A	6.266	13.54	240.7(152 ^d)
1B	6.482	14.94	240.7(161 ^d)
1C	6.116	12.64	240.7(165 ^d)
2A	7.525	23.43	151.0
2B	7.327	21.40	151.0(88 ^d)
2C	7.536	23.50	151.0(86 ^d)
3	8.468(8.66 ^f)	31.56(33.92 ^f)	57.9(49, ^e 58 ^d)

^aValues in parentheses are from the literatures. ^bH_{50%} means the height when 50% of explosive samples tested are exploded when a certain weight of the hammer is dropped. ^cDrop hammer of 2.5 kg weight is used. ^dRef. 16. ^eRef. 17. ^fRef. 18

서 둔감 화약의 영역에도 부차적인 관심을 많이 기울이고 있다.

3. 결과 및 토론

Cheetah 프로그램을 사용하여 획득한 화약성능과 인공신경망을 사용하여 분석한 충격감도는 Table 1에 정리하였다. 화약성능에 대한 분석결과는 기존에 발표한 논문에서 자세하게 설명한 바 있으며, 충격감도에 대한 분석 결과는 그림으로 도시하면 Fig. 4와 같다. 현재 사용되는 분자설명인자들로 구성된 인공신경망 방법으로 분석한 결과로는 나이트로기 위치 변화에 따른 이성질체를 전혀 구분하지 못하는 것으로 추정된다. 그러므로 동일한 나이트로기가 치환된 이성질체들에서의 충격감도 수치는 동일하게 표현된다. 추후, 화약 안전성 실험치가 이성질체들을 분류할 수 있을 정도로 정밀하게 측정 가능하며, 인공신경망 입력자료로 이성질체에 관련된 분자설명인자들이 추가된다면

개선될 것으로 사료된다. Fig. 4에서 보는 바와 같이 나이트로 치환기 1 개인 유도체들은 매우 둔감한 편에 속한다. 나이트로 치환기 1 개인 유도체들은 2.5 kg의 추를 사용하여 반응(go)/비반응(no go) 비율이 각각 50%인 높이 H_{H50%}가 160 cm로서 둔감화약인 TNT에 비해서도 더 둔감한 것으로 예측되고 있다. 나이트로 치환기 2 개인 유도체가 되면 TNT와 거의 유사한 정도는 151 cm로 계산이 된다. 반면 나이트로 치환기 3 개인 화합물인 3에서는 58 cm로 민감해지는 것으로 예측된다. 하지만 이들 민감도는 현재 군용으로 가장 널리 사용되는 고성능 화약들인 RDX (H_{H50%}=26 cm), HMX (H_{H50%}=29 cm)에 비해서는 훨씬 덜 민감한 편이므로 제조, 저장 및 운반 등의 취급에 주의만 하면 큰 문제가 없을 것으로 판단한다.

본 물질들에 대하여 중국의 Cheng 그룹에서도 충격감도 예측 작업을 수행한 바가 있다.¹⁶ 이들은 나이트로기가 연결된 결합 중에서 가장 약한 결합력을 사용하여 예측작업을 수행하였다. 이들 결과들을 Table 1에 적시하여 본 연구 결과치와 비교하였다. Cheng 그룹의 결과치는 나이트로 치환기 1 개인 유도체들의 경우 152-165 cm이며, 나이트로 치환기 2 개의 경우 88 cm, 나이트로 치환기 3 개일때는 58 cm로 예측하고 있다. 나이트로 치환기 3 개의 경우는 본 계산 결과와 정확하게 일치하는 것으로 나타나지만, 나이트로 치환기 1 개이거나 나이트 치환기 2 개인 유도체들의 경우에는 본 계산에 비해서는 민감도가 높은 것으로 나타나고 있다. 하지만 전체적인 경향은 매우 유사하며 50 cm 이상 높은 수치의 경우에는 다소 차이가 있어도 안전성을 유추하는 데에는 큰 문제가 없는 실정이다. 특히 나이트로 치환기 3 개인 유도체인 3의 경우에는 이미 합성에 성공하여 화학적 특성과 화약적

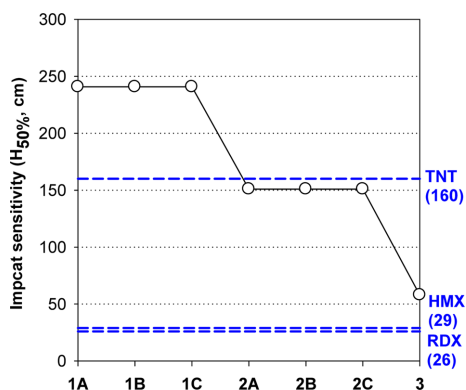


Fig. 4. Impact sensitivities of methylnitroimidazole derivatives.

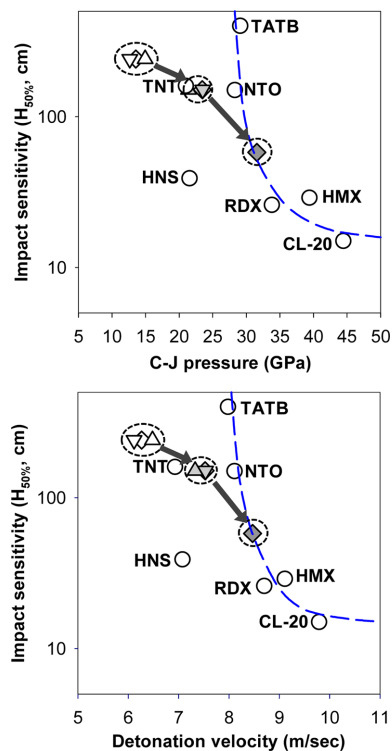


Fig. 5. Two dimensional analyses between the explosive performance and the sensitivity. C-J pressure (top) and detonation velocity (bottom) are used as explosive performance, while impact sensitivity is used as safety characteristics. Symbols for 1A, 1B, 1C, 2A, 2B, 2C, and 3 are \triangle (white), ∇ (white), \diamond (white), \triangle (pale grey), ∇ (pale grey), \diamond (pale grey), and \diamond (dark grey). For common explosives, see the main text and ref. 19.

안전성을 조사한 바가 있다.¹⁷ Table 1에 병기한 충격 감도의 실험치는 49 cm로 예측치와 매우 잘 일치하고 있는 실정이므로 본 예측작업이 비교적 신뢰성이 있는 것으로 추정할 수 있다.

화약 성능과 감도 분석이 완료되면 국과연에서 개발한 성능-감도 이차원 그래프를 이용하여 신규 화약 물질의 전체적인 유용성에 대한 분석작업을 수행한다. 화약 성능으로는 기존에 발표한 C-J 압력과 폭발속도를 이용하였으며, 감도는 본 연구에서 획득한 충격감도 예측 결과를 사용하여 성능-감도 이차원 그래프에 도시한 내용이 Fig. 5이다. Fig. 5에 기존에 균용으로 널리 사용되는 화약물질들인 2,4,6-트라이니트로톨루엔(2,4,6-trinitrotoluene, TNT), 헥사나이트로스티븐(hexanitrostilbene, HNS), 1,3,5-트리아미노-2,4,6-트라이니트로벤젠(1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene,

TATB), 3-나이트로-1,2,4-트리아졸-5-온(3-nitro-1,2,4-triazole-5-one, NTO), 사이클로트라이메틸렌 트라이나이트라민(cyclotrimethylene trinitramine, RDX), 사이클로테트라메틸렌 테트라나이트라민(cyclotetramethylene tetranitramine, HMX). 헥사나이트로헥사아자아이스부르지탄(hexanitohexaazaisowurtzitane, CL-20)을 참고물질들로 도시하였다.¹⁹ 일반적으로 TNT, TATB, NTO 등은 화약 성능은 다소 떨어지지만 둔감화약의 주성분들로 많이 사용되고 있으며, RDX, HMX, CL-20는 민감함에도 불구하고 고성능화약의 주성분으로 많이 사용되고 있다. 이들 참고물질들의 성능-감도 이차원 그래프에서 차지하는 위치가 Fig. 3의 개념적 도식도에 잘 일치하는 것으로 볼 수 있다. 추가적으로 성능과 감도를 예측한 신규물질들을 이차원 그래프에서 차지하는 위치를 이들 참고물질과 비교하면 실용적인 사용처를 쉽게 파악할 수 있다.

Fig. 5에 참고물질과 더불어 신규로 예측한 메틸나이트로이미다졸 유도체들을 도시하였다. Fig. 5에서 보는 바와 같이, 같은 수의 나이트로기가 도입된 이성질체들의 위치는 거의 같은 위치에 있어 이성질체에 대한 토의는 거의 무의미하며 치환된 나이트로기의 개수에 따른 차이에 대해 조사하였다. 나이트로 치환기 1 개인 유도체들은 그림의 좌측 상단에 위치하며, TNT와 비교하여도 좌상단에 위치하고 있다. 나이트로 치환기 2 개인 유도체들이 되면 나이트로 치환기 1 개인 유도체의 위치에서 약간 우하단쪽으로 움직여 TNT 오른쪽에 오른쪽에 위치하고 있다. 주어진 위치를 근거로 유추하면 나이트로 치환기 2 개인 유도체들의 전체적인 속성이 TNT와 매우 유사하지만, 성능면에서는 TNT보다는 우세할 것으로 판단된다. 반면 나이트로 치환기 3 개인 유도체가 되면 위치가 우하단쪽으로 상당히 많이 움직여 NTO와 RDX 중간 선상에 위치하게 된다. 이는 3이 성능과 둔감성이 적절하게 조화를 이루는 위치에 있으므로 현재까지 알려진 화약들과는 전혀 다른 속성을 지니고 있음을 보여 주고 있다. 만약 대량생산이 비교적 저가에 가능하다면 기존의 화약물질들로서는 확보하기 어려운 우수한 특성의 화약조성 개발이 가능할 것으로 판단된다. 또한 중요한 현상 중에 하나가 Fig. 5에 의하면 나이트로기를 도입할 때 마다 우수한 성능을 연결하는 곡선 쪽으로 급격하게 움직이는 현상을 볼 수 있다. 그러므로 3의 경우에는 생산되었을 경우 성능 및 감도 모두를 종합하여 판단할 경우 상당히 최선 화약물질들에 버금가는 특성을 지닐 것임을 이차원 분석 차트에서

의 위치로 판단할 수 있다.

Fig. 5의 두 차트를 비교하였을때, C-J 압력이나 폭발속도를 사용한 두 경우 차트의 경향성이 거의 동일하게 나타남을 알 수 있다. 그러므로 화약 성능을 대표하는 특성으로 C-J 압력이나 폭발속도 중 어느 것을 사용하여도 무방할 것으로 판단된다.

4. 결 론

신규 고성능 용융화학 대상물질로 많은 연구가 수행되고 있는 메틸나이트로이미다졸 유도체들에 대하여 화약 성능과 감도를 분석하였다. 화약 성능은 Cheetah 프로그램을 이용하여 자유에너지 최소화 방법을 기초로 분석하였으며, 충격감도는 프로파게이터 프로그램을 사용하여 인공신경망 방법으로 분석하였다. 최종적으로 국과연에서 개발한 화약 성능-충격감도 이차원 차트를 이용하여 메틸나이트로이미다졸 유도체들의 화약물질의 유용성을 분석하였다. 성능-감도 이차원 차트에서 신규 화약물질이 차지하는 위치를 분석한 결과, 메틸다이아이트로이미다졸 유도체들은 TNT와 유사한 특성을 지니는 둔감화약물질로 판단되나, TNT보다는 성능이 우수할 것으로 추정된다. 반면 메틸트라이나이트로이미다졸은 고폭화약 쪽으로 근접하여 RDX 보다는 약간 성능이 떨어지지만 둔감 특성은 상당히 높을 것으로 추정되고 있다. 메틸트라이나이트로이미다졸이 이차원 차트에 접하는 위치를 판단하면 기존의 화약들과는 상당히 다른 특성으로 고폭화약 조성 등에 좋은 성분으로 사용될 수 있을 것으로 판단된다.

감사의 글

본 연구는 국방과학연구소 컴퓨터의 병렬컴퓨터를 이용하여 수행되었으며, 기 개발된 ADD Method-1 을 적용하여 진행되었습니다.

References

1. M. B. Talawar, R. Sivabalan, M. Anniyappan, G. M. Gore, S. N. Asthana, and B. R. Gandhe, *Combust., Expl., Shock Waves*, **43**, 62-72 (2007).
2. P.-A. Persson, R. Holmberg and J. Lee, 'Rock Blastings and Explosives Engineering', CRC Press, Boca Raton, FL, 1993.
3. J. P. Agrawal, *Progress Energy Combust. Sci.*, **24**, 1-30 (1998).
4. S. Borman, *S. Chem. & Eng. News, Jan.* **17**, 18-22 (1994).
5. S. Gordon and B. J. McBride, 'Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations', NASA SP-273, National Aeronautics and Space Administration, Washinton, D.C., 1976.
6. B. M. Dobratz and P. C. Crawford, 'LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants', Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1985.
7. T. P. Liddiard and D. Price, 'The Expanded Large Scale Gap Test', NSWC TR 86-32, Naval Surface Weapons Center, MD, 1987.
8. S.G. Cho, 'A Systematic Procedure to Predict Explosive Performance and Sensitivity of Novel High-Energy Molecules in ADD, ADD Method-1' In 'Handbook of Material Science Research', p431, C. Rene, E. Turcotte, Eds., Nova Science Publishers, New York, 2010.
9. M. J. Frisch et al., Gaussian 03, Revision D.02, Gaussian, Inc., Wallinford, CT, 2004.
10. S. G. Cho, K. T. No, E. M. Goh, J. K. Kim, J. H. Shin, Y. D. Joo, and S. Seong, *Bull. Korean Chem. Soc.*, **26**, 399-408 (2005).
11. L. E. Fried, W. M. Howard and P. C. Souers, 'Cheetah 2.0 User Manual', Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL MA 117541 Rev. 5, 1998.
12. O.K. Rim, *Anal. Sci. Technol.*, **28**, 347-352 (2015).
13. H. Nefati, J.-M. Cense, J.-J. Legendre, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **36**, 804-810 (1996).
14. C. B. Storm, J. R. Stine, J. F. Kramer, Sensitivity Relationships in Energetic Materials. LA-UR-89-2936, Los Alamos Nat. Lab., NM, 1989.
15. S. K. Lee, S. G. Cho, J. S. Park, Y. Y. In and K. T. No, *Bull. Korean Chem. Soc.*, **33**, 855-861 (2012).
16. X. Su, X. Cheng, C. Meng and X. Yuan, *J. Hazard. Mater.*, **161**, 551-558 (2009).
17. J. R. Cho, K. J. Kim, S. G. Cho and J. K. Kim, *J. Heterocyclic Chem.*, **39**, 141-147 (2002).
18. P. Ravi, G. M. Gore, S. P. Tewari and A. K. Skider, *J. Energ. Mat.*, **29**, 209-227 (2011).
19. R. Meyer, J. Kohler and A. Homberg, 'Explosives', 5th Ed., Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2002.