

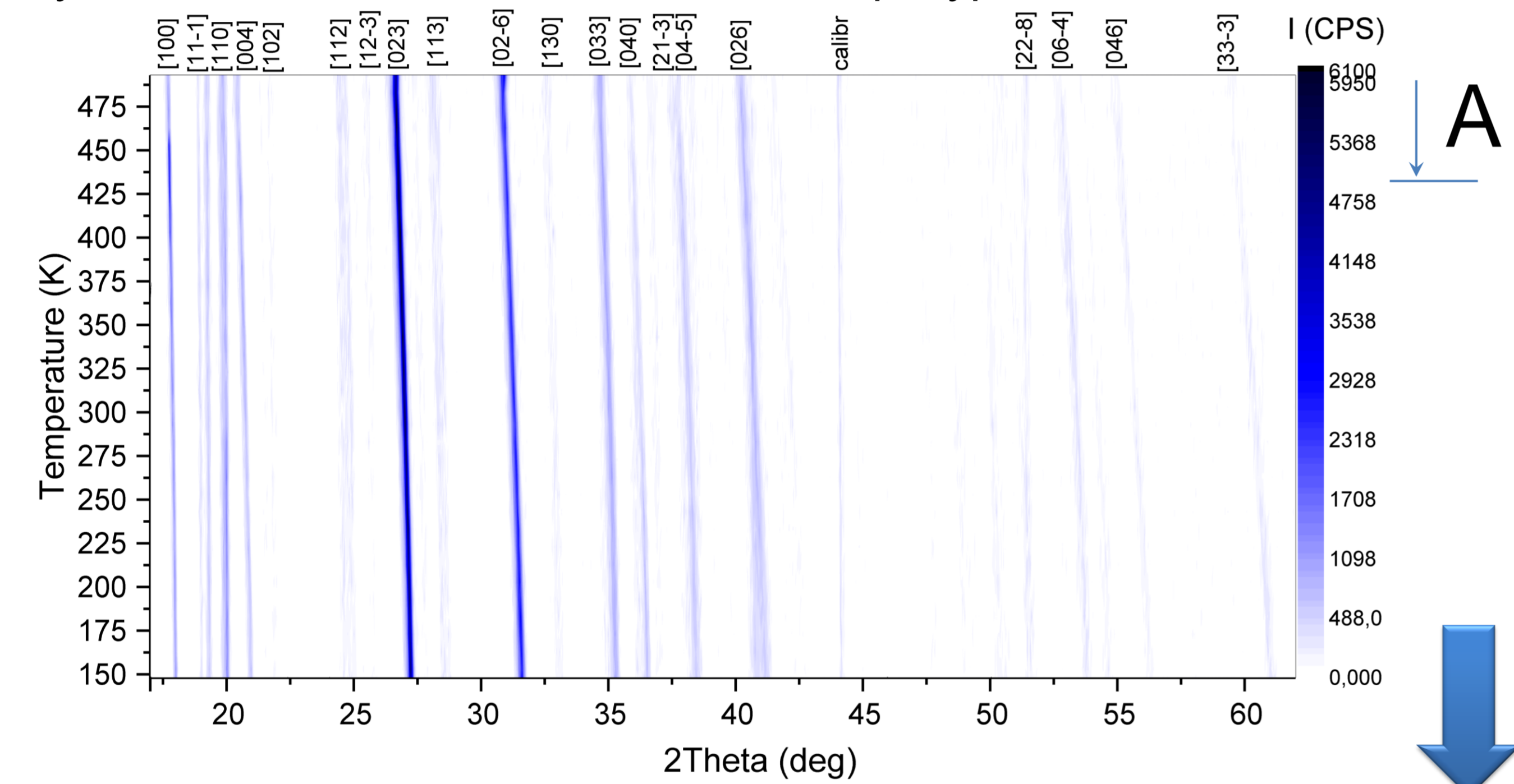
# ТЕНЗОРЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ $\alpha$ -МОДИФИКАЦИИ СВЕРХЧИСТЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ 3-НИТРО-1,2,4-ТРИАЗОЛ-5-ОНА

Станкевич А.В., Гагаркин Д.М.

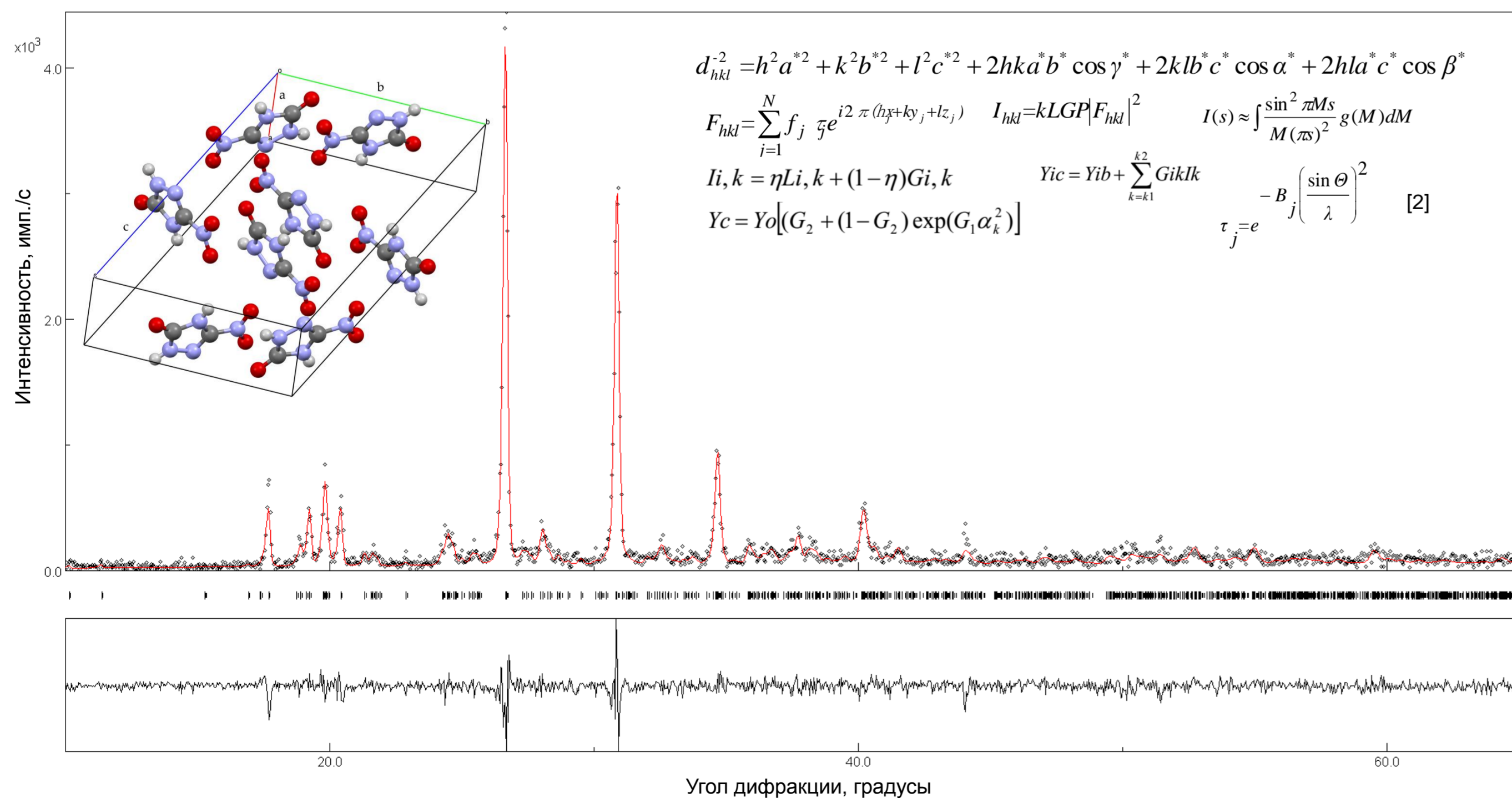
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина», Снежинск, 456770, г. Снежинск, Россия

## Цель – изучение анизотропной термической деформации $\alpha$ -НТО

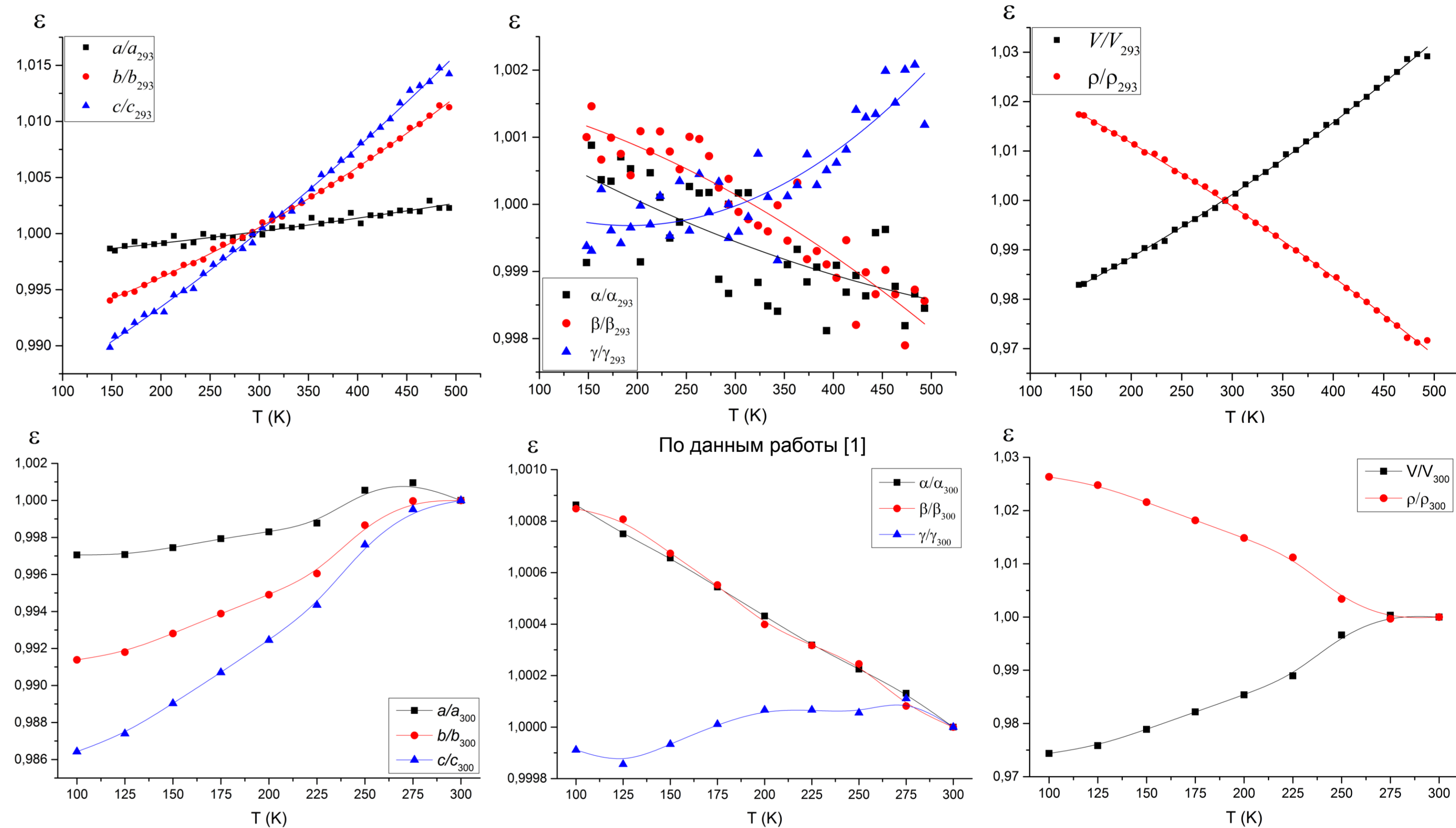
Измерения данных дифракции и рассеяния рентгеновских лучей от НТО в зависимости от температуры



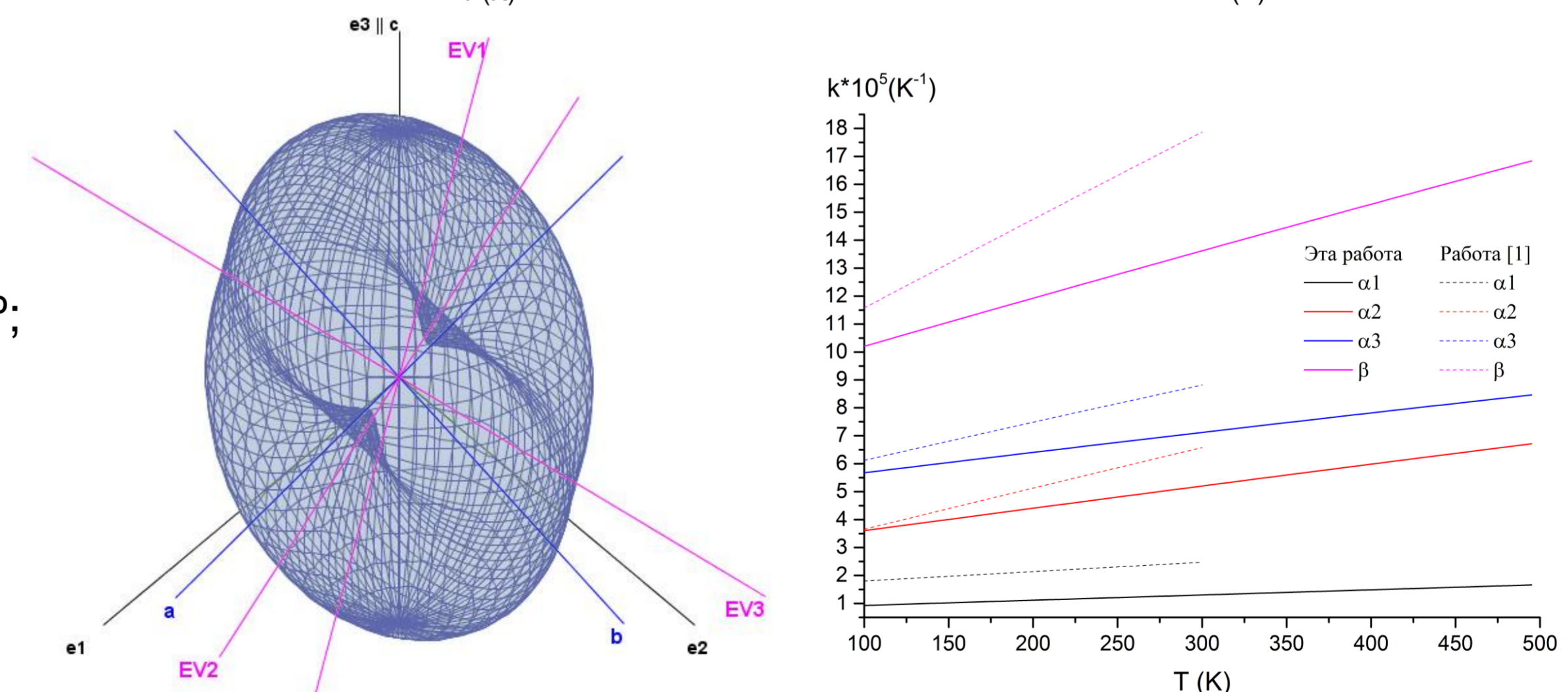
Анализ в каждой точке при конкретной температуре **A-A**



## Зависимость изменения параметров элементарной ячейки от температуры



**$\alpha$ -НТО<sub>(293)</sub>: P-1;**  
 $a = 5,134(5) \text{ \AA};$   
 $b = 10,338(9) \text{ \AA};$   
 $c = 18,030(5) \text{ \AA};$   
 $\alpha = 106,7; \beta = 97,6(4)^\circ; \gamma = 90,3^\circ;$   
 $Z = 2; V = 909,1 \text{ \AA}^3;$   
 $\rho = 1,901 \text{ г/см}^3;$   
 $D = 320 \pm 24;$   
 $e = (1,25 \pm 0,17) \cdot 10^{-4}$   
 $R_{wp} = 12,2\%.$



[1] Bolotina N.B., Pinkerton A.A. Temperature dependence of thermal expansion tensors of energetic materials // J. Appl. Cryst. – 2015. – 48.

[2] Pecharsky, V.K. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials/ V.K. Pecharsky, P.Y. Zavalij. Kluwer Academic Publishers, 2003. – 703 p.