



ИОС УрО РАН



РФЯЦ-ВНИИТФ

2023

ТЕНЗОРЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ 2,4-ДИНИТРОАНИЗОЛА

А. В. Станкевич^{1,2}, Н. А. Распутин², А. Х. Рудина¹, В. И. Филякова², Г. Л. Русинов², В. Н. Чарушин²

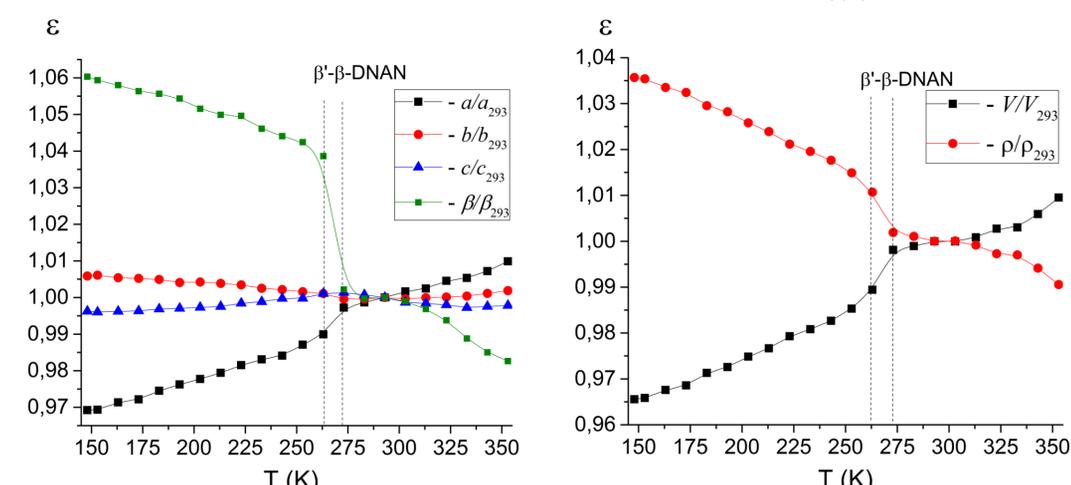
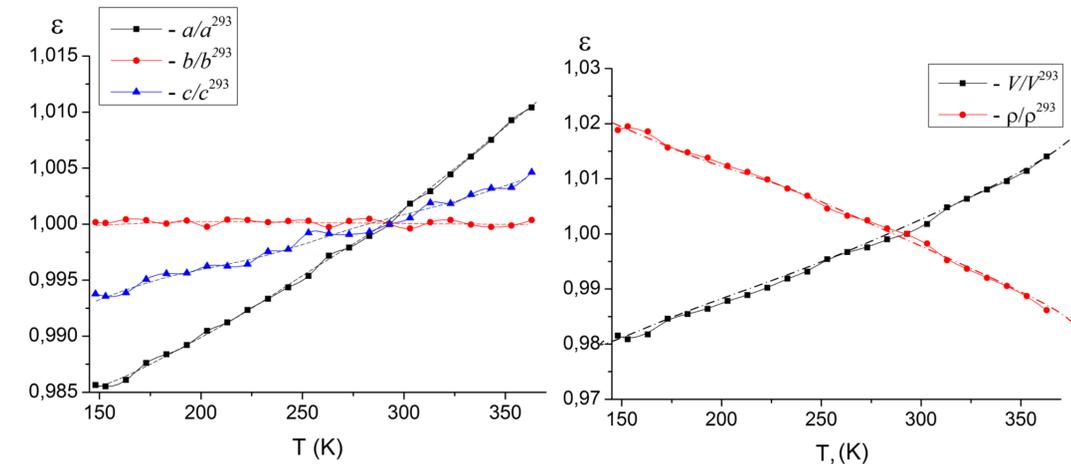
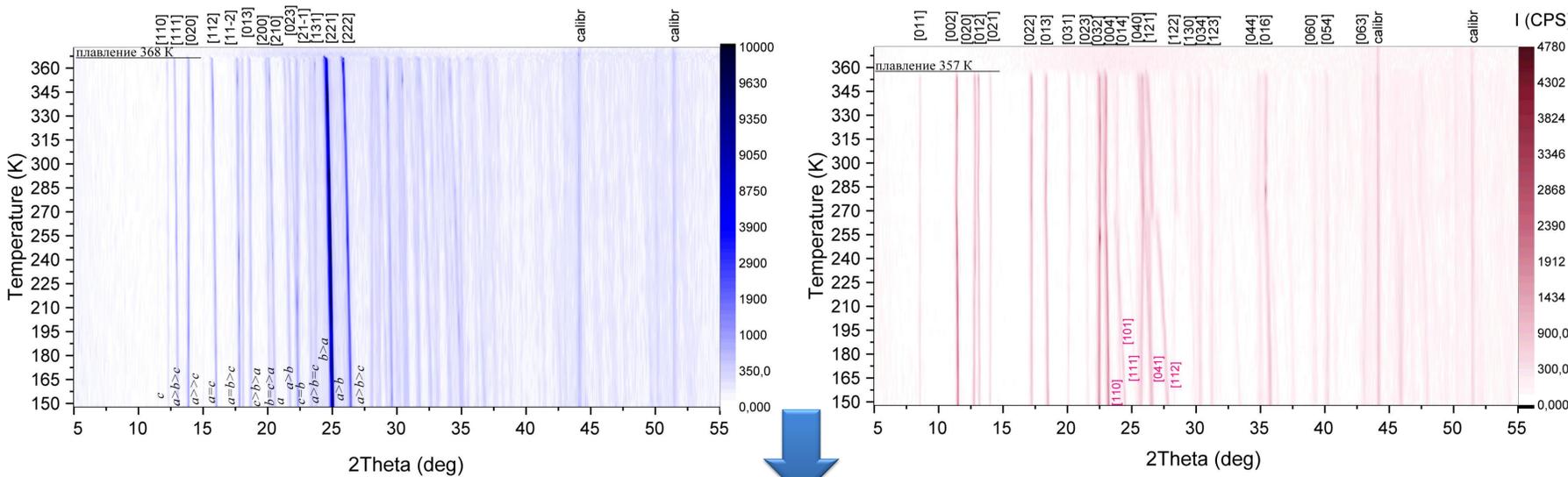
¹ Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский НИИ технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Снежинск, Россия

² Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского, УрО РАН, Екатеринбург, Россия

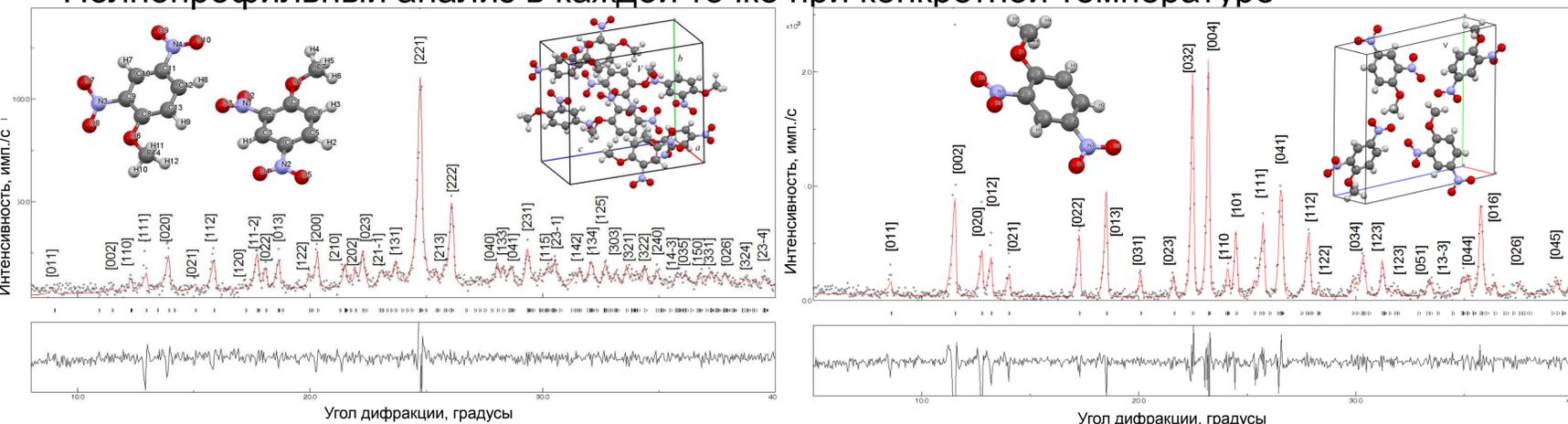
Цель – изучение анизотропной термической деформации 2,4-ДНА

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

Зависимость изменения параметров элементарной ячейки от температуры



Полнопрофильный анализ в каждой точке при конкретной температуре

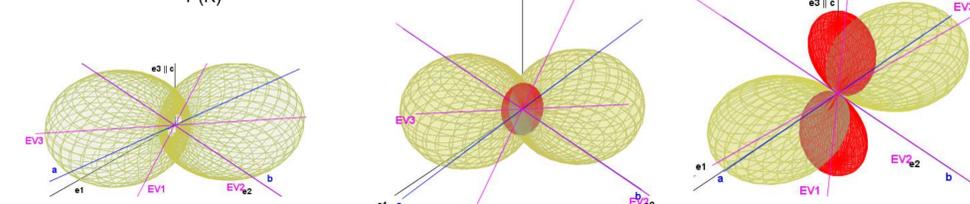
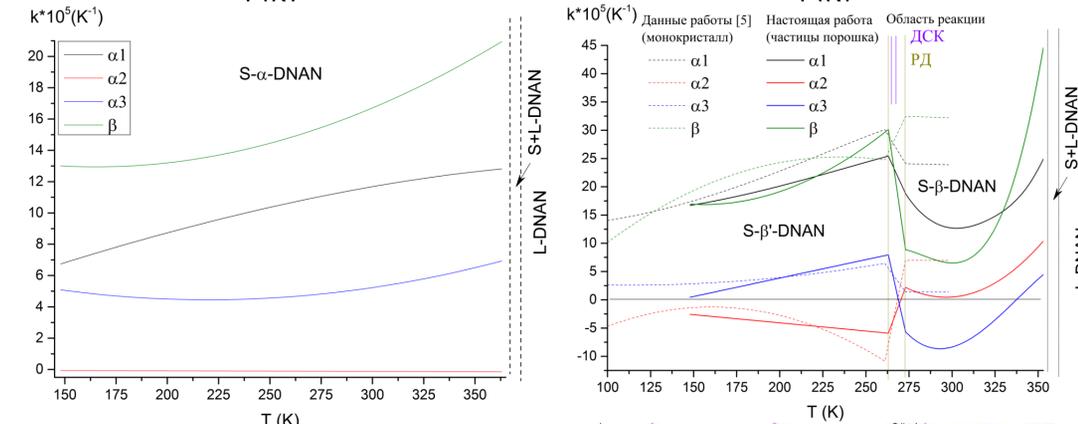


α-ДНА₍₂₉₃₎: *P*21/*n*; *a* = 8,816(9) Å; *b* = 12,712(9) Å; *c* = 15,495(7) Å; $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta = 82,1(4)^\circ$; *Z* = 8; *V* = 1719,87 Å³; $\rho = 1,530 \text{ г/см}^3$; *D* = 252±31; *e* = (1,37±0,10)·10⁻⁶; *R*_{wp} = 15,8%.

β-ДНА₍₂₉₃₎: *P*21/*n*; *a* = 3,980(11) Å; *b* = 13,749(13) Å; *c* = 15,467(9) Å; $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta = 90,8(6)^\circ$; *Z* = 4; *V* = 847,5 Å³; $\rho = 1,553 \text{ г/см}^3$; *D* = 858±37; *e* = (1,53±0,24)·10⁻³; *R*_{wp} = 17,1%.

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \sin(\beta) & 0 & a \cos(\beta) \\ -b \sin(\alpha) \cos(\gamma^*) & b \sin(\alpha) \sin(\gamma^*) & b \cos(\alpha) \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix}, \quad \alpha_{1,2,3} = (l_1 \ l_2 \ l_3) \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{(hkl)} = \frac{f}{|f|} = \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{V^* |c|} \cdot (ub^* - va^* \cos(\gamma^*)) \\ \frac{v}{b^* |f|} \\ \frac{1}{|f|} \cdot (ua \cos(\beta) + vb \cos(\alpha) + wc) \end{pmatrix}, \quad \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \approx \beta$$



Вывод
Условные коэффициенты анизотропии равны $\eta_{\alpha\text{-ДНА}} = 11,62$ (для α -2,4ДНА); $\eta_{\beta\text{-ДНА}} = 21,87$ (для β -2,4ДНА); $\eta_{\beta'\text{-ДНА}} = 31,03$ (для β' -2,4ДНА).

[1] Takahashi H, Tamura R. Low temperature phase transition induced biaxial negative thermal expansion of 2,4-dinitroanisole// CrystEngComm. – 2015. – V17. – P. 8888–8896.
[2] Тензоры термической деформации молекулярных кристаллов ТНТ и ДНА / А.В. Станкевич, А.Ю. Гармашев, О.В. Костицын, Н.П. Тайбинов// VII Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Перспективы создания и применения конденсированных высокоэнергетических материалов», Бийск, 12–14 сентября 2018 г.