

АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗИ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ И МОРФОЛОГИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

А. В. Станкевич

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

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

При термическом воздействии на молекулярные кристаллы протекают процессы анизотропной термической деформации и полиморфных переходов. Каждая точка кристаллического твердого тела перемещается относительно своего первоначального положения на некоторую величину, которая определяется не только изменением параметров элементарной ячейки, но и изменением независимых координат атомов, т. е. тензором распределения электронной плотности и потенциала химической активности. В свою очередь при определенных значениях температуры и давления окружающей среды кристаллические тела формируют различные виды равновесной огранки кристалла и габитуса. В случае отклонения от заданных параметров существования кристалла происходит накопление внутренних напряжений пропорционально перемещению поля деформации внутри кристалла, что может приводить к потере равновесной морфологии.

В данной работе проведен анализ взаимосвязи изменения характеристик кристаллической структуры (параметров элементарной ячейки, плотности упаковки, независимых координат атомов и длин связей в молекулах) и микроморфологических характеристик (габитус, равновесная огранка, площадь поверхности граней, скорость деформации граней). Анализ проводился для семнадцати молекулярных кристаллов энергетических материалов в сверхчистом состоянии: α -, β -, β' -ДНА, α -ТНТ, α -, β -, γ -, δ -октоген, α -, β -, γ -апрол, α -НТО, α -гексоген, ТЭН-І, БТФ и ТАТБ. Экспериментальные данные о состоянии кристаллов твердого тела при конкретной температуре были получены методами порошковой рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Обработка данных выполнялась методами полнопрофильного анализа с интегрированным циклом уточнения квантово-топологической модели с помощью различных полуэмпирических методов квантовой химии [1–5]. Экспериментальные данные огранки кристаллов получены методами электронной и оптической микроскопии. Обработка данных выполнялась методами дихотомии и Монте-Карло согласно правила скорости роста Бравэ-Фриделя-Доннели-Харкера (BFDH) и термодинамического минимума поверхностной энергии Гиббса (ЕМ).

В результате были построены диаграммы тензора деформации морфологии молекулярных кристаллов по всем кристаллографическим плоскостям роста граней. Установлена связь главных кристаллографических осей в равновесной морфологии и элементарной ячейке исследуемых молекулярных кристаллов.

Литература

1. **Stankevich, A. V.** Anisotropic thermal expansion of HE crystals under atmospheric pressure [Text] / A. V. Stankevich, et al. // XXXII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, Book of Abstracts. – March 1–6, 2017, Elbrus, Russia – P. 292.
2. **Stankevich, A. V.** Thermal strain tensors for benzoctrifuroxane and pentaerythritol tetranitrate molecular crystals [Text] / A. V. Stankevich, et al. // J. Phys.: Conf. Ser. – 2019. – Vol. 1147. – P. 012009.
3. **Stankevich, A. V.** Polymorphism and thermal deformation of 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene in the temperature range from 145 to 473 K [Text] / A. V. Stankevich, et al. // J. Phys.: Conf. Ser. – 2021. – Vol. 1787. – P. 012006.
4. **Станкевич, А. В.** Анизотропное тепловое расширение молекулярного кристалла 1,3,5-триамино 2,4,6- тринитробензола при нормальном давлении [Текст] / А. В. Станкевич, Е. Б. Смирнов, О. В. Костицын и др. // Школа по подготовке молодых специалистов «Использование синхротронно-

го и терагерцового излучения для исследования высокоэнергетических материалов» 15–20 сентября 2015 г., – Книга тезисов, Новосибирск. – С. 46–49.

5. **Stankevich, A. V.** Tensors of thermal deformation for various polymorphic modifications of 2,4-dinitroanisole [Text] / A. V. Stankevich, N. A. Rasputin, A. Kh. Rudina et al. // *Energetic Materials Frontiers*. – 2024. – Vol. 5. – P. 257–266.
