

ЛОКАЛИЗАЦИЯ И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВОЙ ЭНЕРГИИ ЛАЗЕРНОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ РАЗЛОЖЕНИЯ В ОБЪЕМЕ КРИСТАЛЛА ТАТБ

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

Большинство молекулярных кристаллов энергетических материалов обладает анизотропией свойств. Связано это не только с кристаллической структурой, определенной группой симметрии и распределением плотности упаковки атомов и молекул, но и с анизотропией молекулярного строения, передачей энергии от одного структурного элемента другому по средствам перераспределения связей и образования резонансных состояний вещества. Данное свойство проявляется довольно редко в основном в веществах, имеющих семиполярные центры способные к делокализации состояния материи. Гипотеза о существовании резонансных состояний не нова, однако в области энергетических материалов находит подтверждение в явном виде только у БТФ, в котором большинство низкоэнергетических процессов перестроения являются обратимыми. Кроме того, анизотропия сильно связана с параметрами химической активности, которые строго определяют различия в кинетике протекания химических реакций в твердом теле в зависимости от направления инициирования.

В данной работе для исследования распределения пороговой энергии инициирования химических реакций и анизотропии резонансных состояний были выбраны текстурированные кристаллы сверхчистого 1,3,5-тринитро-2,4,6-триамино бензола (ТАТБ) уложенного в плоскости совершенной спайности для кристаллов ТАТБ (020). Воздействие лазерным излучением проводилось с целью определения кинетики реакций переноса протона, элиминирования воды и циклизации с образованием ряда оксодиазольных циклов. Данные процессы могут формировать резонансные пары молекул с обратимыми переходами. Лазерное излучение длиной волны 473, 532, 633 нм вызывало протекание химических реакций разложения до полной деструкции молекул в направлении (100). В направлении (010) деструкции не происходило даже при дозе облучения 500 Дж. Наибольший эффект был достигнут для энергии квантов от 2 до 2,3 эВ при сопоставимой дозе облучения.

В результате были построены тензоры химического потенциала, которые были связаны с тензорами термической и упругой деформации сверхчистых кристаллов ТАТБ.
