

# ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛЬНОГО РАСЧЕТА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ТВЕРДОФАЗНЫХ ПРОЦЕССОВ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

А. В. Дзябченко

*Физико-химический институт им. Л.Я.Карпова*

Процессы инициации и распространения фронта термического распада молекул высокоэнергетического вещества в кристалле предполагают наличие некоторого пустого пространства в окрестности распадающейся молекулы, поскольку распад приводит к мгновенному, по сравнению с временем релаксации кристаллической решетки, увеличению суммарного объема молекулярного вещества (эффект клетки). Механизм высвобождения объема может быть понят на основе модели, предполагающей полиморфное превращение в микрообъеме кристалла в более плотную фазу (в то время как на периферии образуется дефектная область, где плотность понижена). Ключевым моментом, таким образом, является понимание того факта, что исходное состояние, будучи при обычных условиях энергетически предпочтительным, может быть не самым плотным, по сравнению с альтернативными формами. Давление способствует переходу в фазу с высокой плотностью, поэтому давление перехода  $P_{\text{фп}}$  должно отражать устойчивость энергетического материала к детонации и другим видам механического воздействия.

В докладе сообщаются результаты расчетов равновесной структуры полиморфных модификаций гексогена (RDX) в интервале давлений на основе новой модели силового поля молекулы, в рамках которой учитывается действие как внутри-, так и межмолекулярных сил кристаллического поля, а также фактора внешнего давления на конформацию и упаковку молекул. Данная модель отлично воспроизводит наблюдаемую упаковку и *aae*-конформацию молекулы RDX в  $\alpha$ -полиморфе (группа  $Pbca$ ,  $Z = 8$ ) в отсутствие давления, а также ее трансформацию в промежуточную *aae/aaa*-конформацию обеих независимых молекул в  $\gamma$ -полиморфе (группа  $Pca2_1$ ,  $Z = 8$ ) при давлении 5 ГПа. Расчет  $\beta$  формы ( $Pca2_1$ ,  $Z = 8$ ) также корректно воспроизвел *aaa*-конформацию двух независимых молекул, наблюдаемую в структурном эксперименте при обычном давлении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (08-03-00993\_а и 10-03-91162-ГФЕН\_а).