

Энергонасыщенный материал (ЭМ) ТАТБ чрезвычайно привлекательно для научных исследований, благодаря своей сложной кристаллической структуре [1-2]. Обладая триклинной сингонией, кристаллы ТАТБ характеризуются высокой анизотропией и низкой симметрией, представляющей значительные трудности для рентгеноструктурного анализа. Вместе с тем, ТАТБ обладает уникально низкой чувствительности к внешним тепловым и механическим воздействиям [3]. Высокая стойкость по сравнению с большинством известных ЭМ позволяет расширить диапазон изменения термодинамических параметров (давления, температуры и т.д.) при проведении экспериментальных исследований, необходимых для построения уравнения состояния. Параметры уравнения состояния определялись на основании рентгеноструктурных исследований ТАТБ в изотермических условиях. Кривая изотермического сжатия до давлений  $\sim 6,5$  ГПа при температуре  $T_0 = 293$  К была получена на ускорительном комплексе Института Ядерной Физики (ИЯФ) Сибирского Отделения РАН с использованием метода порошковой дифракции при сжатии ТАТБ в ячейке с алмазными наковальнями DAC (diamond anvil cell). Схема используемой в данной работе ячейки с алмазными наковальнями, конструкции Меррилла-Бассета [4], приведена на рисунке 1. Рис. 1 - Схема ячейки с алмазными наковальнями В этих устройствах два алмаза ювелирного качества, ограненные специальным способом, сжимаются с помощью несложного рычажно-винтового устройства. Исследуемый образец вместе со смесью метилового и этилового спиртов и кристаллом рубина помещается в отверстие в прокладке (гаскете) из прочного пластичного материала. Снаряженная гаскета устанавливается непосредственно между рабочими плоскостями алмазов. Подробное описание работы таких камер дано в обзорах [5-7]. Смесью спиртов обеспечивает гидростатичность давления, а по смещению линии R-люминесценции рубина измеряется давление [8], приложенное к исследуемому образцу. Для изменения давления и его измерения на оптическом спектрометре алмазные наковальни снимали с синхротронного пучка и после этих процедур снова на нем юстировали. Исследования проводились на источнике синхротронного излучения (СИ) ускорительного комплекса ВЭПП-3, расположенном в ИЯФ СО РАН. Источником СИ на данном ускорителе является излучение релятивистских электронов с энергией 2 ГэВ из вигглера с полем 2 Тл. Синхротронное излучение вигглера имеет непрерывный спектр с критической длиной волны  $\lambda_c = 2.33$  Å и интегральной мощностью 103 Вт. Схема проведения экспериментов приведена на рис.2. Пучок рентгеновских лучей по вакуумированному каналу, через коллиматор (размер щели не превышал 100 мкм), подводится к алмазной камере высокого давления. С помощью коллиматора можно менять размер падающего пучка и избавляться, таким образом, от рассеяния на материале металлической прокладки (гаскете). Регистрация дифракционных сигналов от сжатого образца ТАТБ осуществлялась при помощи детектирующей системы на основе

запоминающего экрана MAR345 фирмы MarResearch. Энергия рентгеновских квантов составляла  $E=33,7$  кэВ [9, 10]. Получаемая картина двумерной дифракции интегрированием по азимутальному углу переводилась в одномерный спектр "Интенсивность- $2\theta$ ", который анализировался в дальнейшем. Полученные таким образом дифрактограммы приведены на рис 2. Рис. 2 - Дифрактограммы ТАТБ при сжатии в алмазных наковальнях температуре  $T=293\text{K}$  При атмосферном давлении регистрировалось до десяти дифракционных пиков, что вполне достаточно для анализа триклинной системы. Однако, с увеличением давления до  $\sim 4$  ГПа, количество регистрируемых рефлексов сокращалось до четырех. Для расчета параметров элементарной ячейки ТАТБ, необходимо регистрировать минимум шесть дифракционных пиков. На основе дифрактограмм методами рентгеноструктурного анализа, учитывающего реальную кристаллографическую модель ТАТБ, были определены параметры кристаллической структуры и элементарный объем молекулярного кристалла ТАТБ. Используя данную модель, удалось рассчитать объем элементарной ячейки на основании дифрактограмм с малым (менее 6) количеством рефлексов. Взаимосвязь гидростатического давления  $P$  и относительного объема кристалла ТАТБ приведена на рис.3. Рис. 3 - Изотерма ТАТБ при температуре  $T=293\text{K}$  Для сравнения на графике приведены данные, полученные другими исследователями [11-13]. Данные по изотермическому сжатию аппроксимировались уравнением полученным из (2) в предположении, что давление складывается из потенциальной и тепловой составляющих  $P(V,T) = P_x(V) + P_t(V,T)$ : (1) Тепловой член в уравнении (1) учитывает начальную температуру проведения экспериментов. Потенциальная составляющая давления  $P_x(\delta)$  задавалась в виде потенциала Борна-Майера: (2) а температура Дебая  $\theta(\delta)$  - выражением: (3) Функция Грюнайзена  $\gamma(\delta)$  описывалась приближением Ландау-Слейтера. Учитывая, что силами притяжения в молекулярных кристаллах являются силы Ван-дер-Ваальса, значение  $s$  в выражении (2) фиксировалось и принималось равным  $s = 2$ . В ходе аппроксимации методом нелинейной регрессии были найдены коэффициенты  $b$  и  $S_{0k}$ . Полученное уравнение изотермы (1) хорошо согласуется с данными работы [11], полученными для ТАТБ в более широком (до 13 ГПа) диапазоне изменения давления. Полученное в результате аппроксимации значение  $S_{0k}$  - скорости звука при  $T=0$  К оказалось завышенным по сравнению с данными работ [13, 14]. Таким образом, получено уравнение изотермического сжатия взрывчатого вещества 1,3,5-триамино 2,4,6-тринитробензол, хорошо описывающее статические эксперименты по изотермическому сжатию. В ходе аппроксимации экспериментальных данных по изотермическому сжатию определены все параметры уравнения состояния вида:  $F(V,T) = F_x(V) + F_0(V) + F_T(V,T)$ , где  $F_x(V)$  - потенциальная (холодная) часть свободной энергии, которая зависит только от объема  $V$ ;  $F_0$  - свободная энергия нулевых колебаний

кристалла при  $T=0$ ;  $F_T(V,T)$  - тепловая (квазигармоническая) часть свободной энергии, зависящая от объема и температуры. Можно ожидать, что использование полученного уравнения состояния (1) позволит повысить точность описания термодинамических параметров непрореагировавшего энергонасыщенного материала ТАТБ при численном моделировании ударно-волновых и детонационных процессов.