

УДК 532.593+536.715

## ОПИСАНИЕ УДАРНОГО СЖАТИЯ НЕКОТОРЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

М. А. Бирюкова<sup>1</sup>, Д. В. Петров<sup>1</sup>, Ю. М. Ковалёв<sup>2</sup>, Е. Б. Смирнов<sup>1,2</sup><sup>1</sup>РФЯЦ, ВНИИ технической физики им. акад. Е. И. Забабахина, 456770 Снежинск, bma\_vniitf@mail.ru<sup>2</sup>Южно-Уральский государственный университет (НИУ), 454080 Челябинск

Предложен подход, позволяющий строить ударные адиабаты молекулярных кристаллов нитросоединений на основании данных по их изотермическому сжатию. С этой целью были построены уравнения состояния кристаллов тэнна и ТАТБ. Представленный в работе сравнительный анализ экспериментальных данных по ударно-волновому сжатию простого кристалла тэнна и результатов расчетов, проведенных с помощью предложенного подхода по пересчету давлений изотермического сжатия на ударную адиабату и построенного уравнения состояния тэнна, показал, что экспериментальные и расчетные значения давления находятся в пределах погрешности эксперимента.

**Ключевые слова:** уравнение состояния, молекулярные кристаллы, ударная адиабата, теплопроводность, температура ударного сжатия, изотермическое сжатие.

DOI 10.15372/FGV2024.9478  
EDN LBWZNY

### ВВЕДЕНИЕ

Процессы, протекающие при действии ударных волн на энергетические материалы, представляют большой практический и теоретический интерес и рассматривались в многочисленных исследованиях [1]. Одной из актуальных проблем в этих исследованиях является ударно-волновой разогрев энергетического материала. Это связано с тем, что кинетика ударно-волнового инициирования детонации конденсированных взрывчатых веществ (ВВ) существенным образом зависит от температуры, возникающей после прохождения ударной волны. В работах [1, 2] проведен анализ существующих уравнений состояния конденсированных веществ, в том числе и полуэмпирических уравнений состояния, для которых необходимо определить, из теоретических соображений, форму функциональной зависимости одного из термодинамических потенциалов, а коэффициенты, входящие в термодинамический потенциал, определить на основании результатов термодинамических, статических и динамических экспериментов.

Для ВВ построить ударную адиабату в широком диапазоне давлений не представляется возможным, так как при ударно-волновом сжатии возможно инициирование детонации.

Поэтому в работе [3] был предложен подход для пересчета значений давления в условиях изотермического сжатия на ударно-волновое сжатие. Недостатком данного подхода является то, что не все параметры, входящие в формулу пересчета, могут быть определены непосредственно из эксперимента. Это касается, в частности, коэффициента Грюнайзена для ВВ, которые представляют собой молекулярные кристаллы нитросоединений, когда различные уравнения состояния приводят к различным результатам [1].

Целью данной работы является получение формулы пересчета давлений при изотермическом сжатии на значения при ударно-волновом сжатии с параметрами, которые определяются в результате непосредственных измерений, и апробация полученного выражения при построении ударных адиабат ТАТБ и тэнна с помощью уравнений состояния, описанных в работах [4, 5].

### МЕХАНИЗМ ПЕРЕСЧЕТА ДАННЫХ ПО ИЗОТЕРМИЧЕСКОМУ СЖАТИЮ НА УДАРНУЮ АДИАБАТУ

Для нахождения связи между давлением при изотермическом сжатии с давлением при ударно-волновом процессе воспользуемся известным термодинамическим равенством [6]

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p \quad (1)$$

и зависимостью коэффициента Грюнайзена  $\gamma$  от объема  $V$  в виде [3, 7]

$$\gamma(V) = -\frac{d(\ln \theta)}{d(\ln V)} = \gamma_0 \left(\frac{V}{V_0}\right).$$

Здесь  $E$ ,  $p$ ,  $T$ ,  $\theta$ ,  $V_0$ ,  $\gamma_0$  — внутренняя энергия, давление, температура, характеристическая температура Дебая, объем при начальных условиях, коэффициент Грюнайзена при начальных условиях.

Интегрируя уравнение (1) по удельному объему от начального состояния  $V_0$  до текущей величины, получаем равенство, которое для изотермического процесса может быть представлено в виде

$$E_t(V) - E_t(V_0) = \gamma_0 C_V T \frac{V - V_0}{V_0} - \int_{V_0}^V p_t dV, \quad (2)$$

где  $C_V$  — удельная теплоемкость при постоянном объеме. Аналогично работе [3] индекс  $t$  у внутренней энергии и давления указывает на условия изотермического сжатия.

На ударной адиабате связь между внутренней энергией и давлением определяется следующим образом:

$$E_s(V) - E_s(V_0) = p_s(V_0 - V)/2. \quad (3)$$

Индекс  $s$  у внутренней энергии и давления указывает на условия ударного сжатия.

Связь между внутренней энергией и давлением в изотермическом процессе и при ударном сжатии определяется соотношением

$$\left(\frac{dE}{dp}\right)_V = \frac{V}{\gamma}. \quad (4)$$

Интегрируя равенство (4) с учетом постоянства правой части, получаем соотношение, определяющее связь между величинами при изотермическом и ударном сжатии:

$$E_s(V) - E_t(V) = \frac{V}{\gamma} (p_s(V) - p_t(V)). \quad (5)$$

В силу того, что значения внутренней энергии при изотермическом процессе и ударном сжатии в начальный момент времени совпадают, уравнение (4) после подстановки в него

выражений для внутренней энергии изотермического процесса (2) и ударного сжатия (3) позволяет получить равенство для определения давления в процессе ударного сжатия:

$$\begin{aligned} \frac{V}{\gamma} p_t(V) + \gamma_0 C_V T_0 \frac{V_0 - V}{V_0} + \int_{V_0}^V p_t dV = \\ = p_s(V) \left( \frac{V}{\gamma} - \frac{1}{2} (V_0 - V) \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Из равенства (6) следует, что выражение для давления ударного сжатия имеет следующий вид [3]:

$$p_s(V) = \frac{\frac{V}{\gamma} p_t(V) + \int_{V_0}^V p_t(V) dV + \gamma_0 C_V T \frac{V_0 - V}{V_0}}{V/\gamma - (V_0 - V)/2}. \quad (7)$$

В выражении (7) присутствует коэффициент  $\gamma$ , который не может быть определен непосредственно из эксперимента. По этой причине воспользуемся уравнением Грюнайзена [8], которое определяет связь коэффициента Грюнайзена  $\gamma$  с коэффициентом объемного расширения  $\alpha$ , теплоемкостью при постоянном объеме  $C_V$  и модулем изотермического сжатия  $K_{T0}$  и позволяет исключить коэффициент  $\gamma$  из уравнения (7):

$$\frac{\gamma}{V} = \frac{\alpha K_{T0}}{C_V}. \quad (8)$$

С учетом (8) зависимость давления ударного сжатия от удельного объема (7) может быть представлена в виде

$$p_s(x) = \frac{a p_t(x) + \int_1^x p_t(x) dx + b(1-x)}{a - (1-x)/2}, \quad (9)$$

где  $a = C_V / \alpha K_{T0} V_0$ ,  $b = \alpha K_{T0} T_0$ ,  $x = V/V_0$ ,  $p_t \approx p_c = 3K_{T0}(x^{-(n+4/3)} - x^{-(n+1)})$  [6]. Экспериментальные данные, приведенные в справочниках [9, 10], позволяют вычислить константы  $a$  и  $b$ , входящие в выражение (9). Для кристаллического ТАТБ  $a = 1.143$ ,  $b = 0.4963$  ГПа, а для тэна  $a = 0.8032$ ,  $b = 0.6539$  ГПа.

Выполненные в работе [5] оценки вклада отдельных членов уравнения состояния в давление изотермического сжатия кристаллов ТАТБ показал, что его зависимость от объема может быть описана выражением для составляющей холодного давления  $p_c$ , возникающей из-за изменения межмолекулярных сил в кристалле, и может быть представлена следующим образом:

$$p_t = p_c = -\frac{\partial U_c}{\partial V} = \\ = 3K_{T0}(x^{-(n+4/3)} - x^{-(n+1)}), \quad (10)$$

где  $K_{T0} = c_T^2 \rho_0$ ,  $c_T$  — изотермическая скорость звука,  $\rho_0$  — начальная плотность,  $x = \rho_0/\rho$ . Межмолекулярная энергия  $U_c$ , описывающая поведение энергии невалентных взаимодействий атомов между молекулами (водородные связи и взаимодействие Ван-дер-Ваальса), определяется путем интегрирования равенства (10):

$$U_c = -\frac{3K_{T0}}{\rho_0} \int [x^{-(n+4/3)} - x^{-(n+1)}] dx = \\ = -\frac{3K_{T0}}{\rho_0} \left[ \frac{1}{n+1/3} x^{-(n+1/3)} - \frac{1}{n} x^{-n} \right]. \quad (11)$$

Для определения показателя степени  $n$  в равенствах (10) и (11) в работе [5] был предложен подход, основанный на экспериментальных значениях теплоты сублимации кристалла [9] и модуле изотермического сжатия  $K_{T0}$  [11]. Для кристаллического ТАТБ  $n = 3.177$ ,  $K_{T0} = 0.4963$  ГПа, а для тэна  $n = 3.432$ ,  $K_{T0} = 9.62$  ГПа.

Для проверки работоспособности предлагаемого алгоритма пересчета экспериментальных данных по изотермическому сжатию на ударное сжатие проведем сравнение рассчитанных значений давления ударного сжатия с экспериментом.

Интеграл, входящий в выражение (9), может быть определен численным интегрированием [3] экспериментальных данных по изотермическому сжатию:

$$\int_1^x p_t dx = \sum_{r=1}^L \frac{p_{t,r} + p_{t,r-1}}{2} (x_r - x_{r-1}), \quad (12)$$

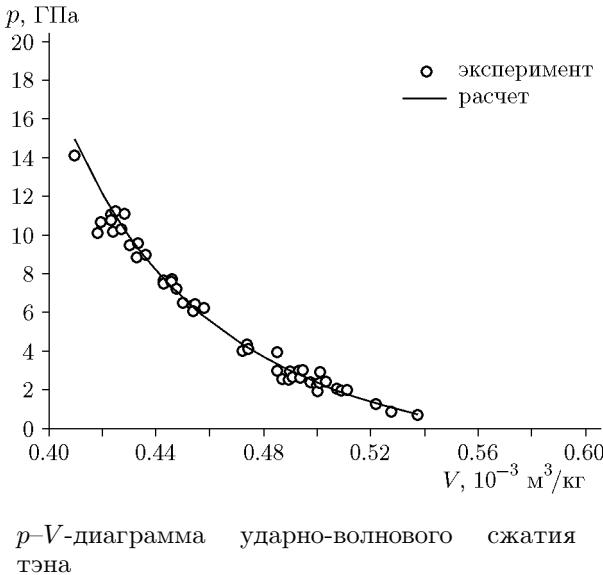
где  $L$  — количество экспериментальных значений давления при изотермическом сжатии [12].

Таблица 1  
Результаты расчета давления  
ударного сжатия тэна

$V/V_0$	$p_t$ [12], ГПа	$p_{s1}$ , ГПа	$p_{s2}$ , ГПа
0.9437 (23)	0.68	0.73	0.726740
0.9168 (18)	1.71	1.82	1.816255
0.8763 (34)	3.42	3.65	3.645291
0.8594 (29)	3.53	3.76	3.762429
0.8410 (21)	3.55	3.78	3.783929
0.8175 (11)	3.95	4.21	4.213410
0.8163 (14)	5.80	6.21	6.225604
0.8042 (21)	7.17	7.72	7.739727
0.7956 (19)	7.45	8.03	8.046113
0.7818 (32)	7.65	8.25	8.269088
0.7730 (29)	8.11	8.76	8.775687
0.7671 (24)	9.04	9.80	9.823472
0.7609 (23)	9.16	9.93	9.944971
0.7525 (23)	10.12	11.01	11.029545
0.7505 (24)	10.45	11.39	11.408197

Также его можно определить интегрированием выражения для давления изотермического сжатия (9).

Для кристаллических ВВ найти экспериментальные данные по ударному сжатию удалось только для тэна [13]. В табл. 1 приведены результаты расчетов давлений ударного сжатия  $p_{s1}$  и  $p_{s2}$ , выполненных по формуле (9) путем численного интегрирования по формуле (12) данных по изотермическому сжатию [12] и интегрирования уравнения состояния (10) соответственно. Хорошо видно, что рассчитанные давления ударного сжатия  $p_{s1}$  и  $p_{s2}$  практически совпадают. В табл. 1 также представлены экспериментальные значения степени сжатия  $x = V/V_0$  (в скобках указана погрешность в двух последних цифрах после запятой) и давление изотермического сжатия  $p_t$ . На рисунке приведена  $p$ - $V$ -диаграмма ударного сжатия тэна, на которой видно хорошее совпадение результатов расчета и эксперимента [13].



### ТЕМПЕРАТУРЫ УДАРНОГО СЖАТИЯ ТАТБ И ТЭНА

Для расчета температуры ударного сжатия рассмотрим распространение стационарной ударной волны в ТАТБ и тэне. Система уравнений газовой динамики, описывающая распространение ударной волны, в лагранжевых переменных  $h, t$  имеет следующий вид:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial t}\right) - \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial u}{\partial h}\right) = 0, \quad (13)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) + \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial p}{\partial h}\right) = 0, \quad (14)$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right) + \frac{p}{\rho_0} \left(\frac{\partial u}{\partial h}\right) = 0, \quad (15)$$

где  $\rho_0$  — начальная плотность,  $u$  — скорость частиц. Данная система законов сохранения замыкается уравнением состояния:

$$\begin{aligned} p &= \frac{MRT\gamma(V)}{V} D(x_D) + p_{cold}, \\ p_{cold} &= -\frac{\partial U_c}{\partial V} - \frac{\partial U_M}{\partial V} + \frac{3}{8} MR\gamma(V)\theta_D/V, \\ x_D &= \theta_D/T, \end{aligned} \quad (16)$$

где  $U_M$  — энергия взаимодействия атомов внутри молекулы,  $D(x_D)$  — функция Дебая [7],  $R$  — универсальная газовая постоянная, деленная на молекулярную массу,  $M$  — количество

деформационных колебаний (колебаний, которые зависят от объема), приходящихся на одну молекулу,  $\theta_D$  — характеристическая температура Дебая для деформационных колебаний,  $p_{cold}$  — холодная составляющая давления. Выражение для холодных составляющих, входящих в уравнения состояния, были определены ранее в работах [4, 5, 14]. Значения характеристической температуры Дебая и количество деформационных колебаний определены в работе [4]: для ТАТБ  $\theta_D = 137.4 \text{ K}$ ,  $M = 12$ , для тэна  $\theta_D = 134.4 \text{ K}$ ,  $M = 16$ .

В силу того, что характеристические температуры энергетических материалов много меньше температур ударного сжатия, воспользуемся высокотемпературным приближением для функции Дебая, ограничившись двумя членами разложения:  $D(x_D) = 1 - 3/8x_D$ .

В этом случае уравнение состояния для описания давления будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} p &= MR\gamma_0\rho_0(T - T_0) + p_c + p_0, \\ p_c &= 3K_{T_0}(x^{-(n+4/3)} - x^{-(n+1)}), \\ p_T &= \alpha K_{T_0}T + p_0. \end{aligned}$$

Уравнение внутренней энергии (12) в результате простых преобразований можно представить в виде

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} + p_T \frac{\partial V}{\partial t} = 0. \quad (17)$$

Система уравнений (12), (13), (17) решалась методом Неймана — Рихтмайера.

Для расчета теплоемкости при постоянном объеме были использованы два выражения — через частоту нормальных колебаний молекул кристаллов [15]:

$$\begin{aligned} C_V &= MR + R \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i^2 \exp(x_i)}{(\exp(x_i) - 1)^2}, \\ x_i &= \theta_i/T, \end{aligned} \quad (18)$$

и через аппроксимационную зависимость [16]:

$$\begin{aligned} C_V/C_{VH} &= 1 - (1 - C_V^0/C_{VH}) \exp[-(T - T_0)/T_c], \\ C_{VH} &= 3NR. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь  $C_V^0$  — теплоемкость при постоянном объеме при начальной температуре,  $T_c$  — параметр, определяемый по известной из эксперимента (или расчета) зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры и равный 560 К для ТАТБ и 565 К для тэна [16],  $N$  — количество атомов в молекуле,  $\theta_i$  — характеристическая температура, соответствующая  $i$ -й частоте нормальных колебаний молекулы. Значения спектров для ряда органических нитросоединений, рассчитанных с помощью квантово-химических методов [17, 18], приведены в работе [15].

Контроль выполнения условий Гюгонио осуществлялся путем сравнения значений внутренней энергии, полученной в расчетах:

$$\Delta E = \frac{3K_{T0} \left( \frac{1}{n+1/3} (x^{-(n+1/3)} - 1) - \frac{1}{n} (x^{-n} - 1) \right)}{\rho_0 - (\alpha K_{T0} T_0 - p_0)(1-x)/\rho_0 + \Delta E_T},$$

и на ударной адиабате:

$$\Delta E_s = \frac{p}{2\rho_0}(1-x).$$

Изменение тепловой части внутренней энергии  $\Delta E_T$  в случае, когда зависимость теплоемкости при постоянном объеме от температуры определяется по формуле (18), имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta E_T &= \\ &= MR(T - T_0) + RT \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i}{\exp(x_i) - 1} - E_{T0}, \\ E_{T0} &= RT_0 \sum_{i=M+1}^{3N} \frac{x_i^0}{\exp(x_i^0) - 1}, \\ x_i^0 &= \theta_i/T_0, \end{aligned}$$

а при определении по формуле (19) описывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta E_T &= C_{VH}(T - T_0) + \\ &+ T_C(C_{VH} - C_V^0)(\exp(-(T - T_0)/T_C) - 1). \end{aligned}$$

В расчетах температуры ударного сжатия использовались полученные по формуле (9) значения давления ударно-волнового сжатия ТАТБ и тэна ( $p_{s1}$ , табл. 2 и 3), соответствующие экспериментальным значениям давления

Таблица 2  
Результаты расчета температур ударно-волнового сжатия ТАТБ

$V/V_0$	$p_t$ [19], ГПа	$p_{s1}$ , ГПа	$T_{s1}$ , К	$T_{s2}$ , К
0.9608 (0.0027)	0.56	0.58	301.4	301.5
0.9498 (0.0032)	0.85	0.87	305.3	305.3
0.9397 (0.0042)	1.2	1.23	309.9	310.0
0.9270 (0.0043)	1.66	1.70	316.0	316.2
0.9148 (0.0044)	1.95	2.00	320.1	320.3
0.9054 (0.0051)	2.42	2.49	326.9	327.4
0.8834 (0.0058)	3.29	3.38	340.8	341.4
0.8580 (0.0071)	4.95	5.10	371.4	372.8
0.8134 (0.0096)	8.18	8.47	445.2	446.6
0.8045 (0.0099)	8.53	8.82	452.7	454.9
0.7943 (0.0110)	9.53	9.88	477.7	480.8
0.7869 (0.0120)	10.17	10.56	495.1	497.9
0.7707 (0.0126)	11.64	12.11	534.9	537.7
0.7579 (0.0152)	13.22	13.80	578.1	582.5

Таблица 3  
Результаты расчета температур ударно-волнового сжатия тэна

$V/V_0$	$p_t$ [12], ГПа	$p_{s1}$ , ГПа	$T_{s1}$ , К	$T_{s2}$ , К
0.9437 (23)	0.68	0.73	313.2	313.5
0.9168 (18)	1.71	1.82	328.0	328.4
0.8763 (34)	3.42	3.65	351.6	352.4
0.8594 (29)	3.53	3.76	368.4	369.4
0.8410 (21)	3.55	3.78	388.9	390.1
0.8175 (11)	3.95	4.21	428.0	429.7
0.8163 (14)	5.80	6.21	428.6	430.3
0.8042 (21)	7.17	7.72	455.5	457.6
0.7956 (19)	7.45	8.03	493.7	496.2
0.7818 (32)	7.65	8.25	508.2	510.9
0.7730 (29)	8.11	8.76	530.8	533.8
0.7671 (24)	9.04	9.80	541.0	544.0
0.7609 (23)	9.16	9.93	567.9	571.2
0.7525 (23)	10.12	11.01	602.7	606.2
0.7505 (24)	10.45	11.39	614.8	618.4

изотермического сжатия  $p_t$  [12, 19]. Значения всех параметров, входящих в формулу пересчета изотермического давления в давление на фронте ударной волны (9), были определены ранее.

Из данных по температуре ударно-волнового сжатия ТАТБ и тэна, приведенных в табл. 2 и 3, видно, что различие температур ударного сжатия  $T_{s1}$  и  $T_{s2}$ , полученных при решении уравнения (17) с определением теплоемкости по формулам (18) и (19) соответственно, не превышает 5 К. Значения внутренней энергии, рассчитанные по уравнению состояния, контролировались значениями внутренней энергии на ударной адиабате.

## ВЫВОДЫ

1. Предложенный в работе алгоритм пересчета экспериментальных данных по изотермическому сжатию на ударную адиабату позволил получить значения давления в ударной волне, хорошо согласующиеся с известными экспериментальными данными для тэна ([13], рисунок).

2. Уравнения состояния [4, 5] позволяют вычислять давление ударного сжатия, не используя экспериментальные данные по изотермическому сжатию (табл. 2 и 3) в диапазоне порядка 10 ГПа, и могут быть полезны при анализе математических моделей образования «горячих» точек при инициировании детонации в гетерогенных ВВ.

3. Анализ температур ударного сжатия, рассчитанных по двум моделям, определяющих температурную зависимость теплоемкости при постоянном давлении, показал, что в диапазоне до 1 000 К целесообразно применять формулу (19), что позволяет избежать необходимости проведения квантово-химических расчетов частот нормальных колебаний сложных молекул.

## ЛИТЕРАТУРА

- Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Фортов В. Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. — М.: Янус-К, 1966.
- Нигматулин Р. И., Болотнова Р. Х. Широкодиапазонные уравнения состояния бензола и тетрадекана в упрощенной форме // ТВТ. — 2017. — Т. 55, № 2. — С. 206–215. — DOI: 10.7868/S004036441701015X. — EDN: YIAAMP.
- Олинджер Б., Кейди Г. Ударная сжимаемость ТЭНА, ТАТБ, CO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O при давлениях до 10 ГПа, рассчитанная на основании экспериментальных данных по гидростатическому сжатию // Детонация и взрывчатые вещества: сб. ст. / под ред. А. А. Борисова. — М.: Мир, 1981. — С. 203–219.
- Ковалев Ю. М. Определение температурной зависимости изобарического коэффициента объемного расширения для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений // Инж.-физ. журн. — 2018. — Т. 91, № 6. — С. 1653–1663. — EDN: YPKD.
- Ковалев Ю. М. Уравнения состояния для описания изотермического сжатия некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений // Инж.-физ. журн. — 2020. — Т. 93, № 1. — С. 229–239. — EDN: QAKPTI.
- Базаров И. П. Термодинамика. — М.: Выш. шк., 1991.
- Ковалев Ю. М. Определение вида коэффициента Грюнайзена для молекулярных кристаллов // Докл. АН. — 2005. — Т. 403, № 4. — С. 475–478. — EDN: OOOHFZ.
- Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела. — М.: Мир, 1975.
- LASL Explosive Property Data / Gibbs T. R., Popolato A. (Eds). — Univ. of California Press, 1980. — (Los Alamos Scient. Lab. Ser. on Dynamic Material Properties, V. 4).
- Dobratz B. M., Crawford P. C. LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants. — Livermore, California: Lawrence Livermore Nat. Lab., Univ. of California, 1985. — UCRL-52997-Chg. 2.
- Щетинин В. Г. Расчет параметров состояния конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах // Физика горения и взрыва. — 1991. — Т. 27, № 4. — С. 39–46.
- Olinger B., Halleck P. M., Cady H. H. The isothermal linear and volume compression of pentaerythritol tetranitrate (PETN) to 10 GPa (100 kbar) and the calculated shock compression // J. Chem. Phys. — 1975. — V. 62, N 11. — P. 4480–4483. — DOI: 10.1063/1.430355.
- LASL Shock Hugoniot Data / Marsh S. P. (Ed.) — Los Angeles: Univ. of California Press, 1980. — (Los Alamos Scient. Lab. Ser. on Dynamic Material Properties, V. 5).
- Ковалев Ю. М. Определение вида «упругой» составляющей уравнений состояния молекулярных кристаллов // Вестн. Южно-Уральского гос. ун-та. Сер.: Математика. Механика. Физика. — 2017. — Т. 9, № 2. — С. 55–63. — DOI: 10.14529/mmp170207. — EDN: YLGJPT.
- Ковалев Ю. М., Куропатенко В. Ф. Определение температурной зависимости теплоемкости для некоторых молекулярных кристаллов нитросоединений // Инж.-физ. журн. — 2018. — Т. 91, № 2. — С. 297–306. — EDN: YSHSHT.

16. Щетинин В. Г. Расчет теплоемкости органических веществ в ударных и детонационных волнах // Хим. физика. — 1999. — Т. 18, № 5. — С. 90–95.
17. Кларк Т. Компьютерная химия. — М: Мир, 1990.
18. Степанов Н. Ф., Новаковская Ю. В. Квантовая химия сегодня // Рос. хим. журн. — 2007. — Т. 51, № 5. — С. 5–17. — EDN: IISQJF.
19. Stevens L. L., Velisavljevic N., Hooks D. E., Dattelbaum D. M. Hydrostatic compression curve for triamino-trinitrobenzene determined to 13.0 GPa with powder X-ray diffraction // Propell., Explos., Pyrotech. — 2008. — V. 33, N 4. — P. 286–295. — DOI: 10.1002/prep.200700270.

*Поступила в редакцию 23.04.2024.*

*После доработки 01.07.2024.*

*Принята к публикации 03.07.2024.*