

## ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

*Празян Тигран Леонидович*

ведущий инженер

ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»

г. Кемерово, Кемеровская область

### ХАРАКТЕРНЫЕ ОТЛИЧИЯ В МЕТОДАХ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ TNT

*Аннотация:* данная статья посвящена первопринципным расчетам такого известного энергетического материала, как тринитротолуол ( $C_7H_5N_3O_6$ , далее TNT). Целью работы является выявление оптимального метода расчета для дальнейшего его применения к расчету электронных и детонационных свойств.

*Ключевые слова:* взрывчатые вещества, оптимизация геометрии, теория функционала плотности.

В настоящее время большое внимание уделяется разработке взрывчатых веществ, которые в дальнейшем послужат не только в военной промышленности, но и в других областях, таких как горнодобывающая промышленность, строительство, обработка материалов, сейсморазведка. Однако при синтезе и непосредственном использовании данного рода веществ, сталкиваются с проблемой их несанкционированного детонирования. Поэтому, во избежание подобных случаев необходимо обезопасить исследование и использование взрывчатых веществ. Исследование взрывчатых веществ методами компьютерного моделирования позволяет предсказать такие их важные свойства, как давление и скорость детонации, химическая энергия детонации и чувствительность к удару. Прежде всего, в моделировании из первых принципов нужно определить равновесную структуру изучаемого материала. Так, исследуемая молекула TNT [1], состоящая из бензольного кольца, трех нитрогрупп и одной метильной группы.

Все расчеты проводились с использованием пакета CRYSTAL09 [2] и базисными наборами [3]: C\_6-21G\*, H\_3-1p1G, N\_6-31d1G, O\_6-31d1. Исследования

проводились для вещества в газовой фазе (изолированная молекула). На рисунке 1 представлена визуализация данной молекулы.

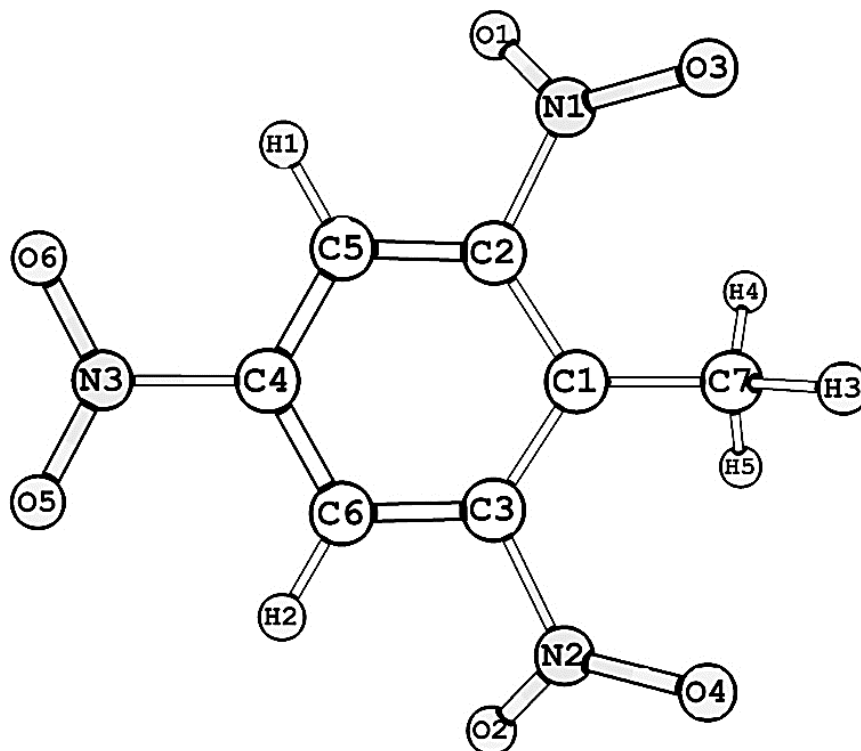


Рис. 1. Визуализация структуры молекулы TNT

Так, оптимизация геометрии представлена в таблице 1. Сравнение проводится с рентгенографическим анализом, проведенным в работе [3], а также с теоретическими данными, полученными в работе [4]. Длины связей приведены в Å, углы – в °.

Таблица 1

Длины связей и углы в молекуле TNT

|          | Theor [4] | Exp [3] | B3LYP  | B3PW   | PBE0   | HF     |
|----------|-----------|---------|--------|--------|--------|--------|
| C2-NO2   | 1.481     | 1.484   | 1.479  | 1.473  | 1.469  | 1.463  |
| C4-NO2   | 1.478     | 1.480   | 1.472  | 1.467  | 1.464  | 1.456  |
| C1-CH3   | 1.505     | 1.510   | 1.504  | 1.499  | 1.497  | 1.512  |
| O1-N1-O3 | 125.69    | ---     | 125.14 | 125.45 | 125.49 | 125.30 |
| O5-N3-O6 | 125.64    | ---     | 125.34 | 125.54 | 125.63 | 125.34 |
| C2-C1-C3 | 114.11    | 113.8   | 113.87 | 113.78 | 113.77 | 113.88 |

Используя формулу среднеквадратичного отклонения, посчитана погрешность теоретических расчетов в настоящей работе и в работе [4]:  $\epsilon_{\text{B3LYP}} \approx 0.38\%$ ,  $\epsilon_{\text{B3PW}} \approx 0.68\%$ ,  $\epsilon_{\text{PBE0}} \approx 0.86\%$ ,  $\epsilon_{\text{HF}} \approx 1.08\%$ ,  $\epsilon_{\text{Theor}[4]} \approx 0.25\%$ . Анализируя полученные результаты в сравнении с экспериментом можно сделать вывод о том, что гибридный функционал B3LYP наиболее приемлем для моделирования взрывчатых веществ. Однако, можно заметить, что теоретическая работа выполнена с большей точностью к эксперименту, что связано с тем, что она выполнялась для кристаллов, в то время как настоящая работа рассчитана для молекулы.

### *Список литературы*

1. Dovesi R. CRYSTAL09 User's Manual / R. Dovesi, V.R. Saunders, R. Roetti [et al.] // University of Torino: Torino, 2009.
2. Crystal Basis Sets Library [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://www.crystal.unito.it/Basis\\_Sets/Ptable.html](http://www.crystal.unito.it/Basis_Sets/Ptable.html) (дата обращения: 27.10.2015).
3. Miller G.R. A Review of the Crystal Structures of Common Explosives Part I: RDX, HMX, TNT, PETN, and Tetryl / G.R. Miller, A.N. Garroway // Materials Chemistry Branch, Chemistry Division, 2001. – P. 1–30.
4. Huang L. THz Dielectric Properties of Molecular Clusters of PETN and TNT Calculated by Density Functional Theory / T.L. Huang, A. Shabaev, S.G. Lambrakos [et al.] // J. of Materials Engineering and Performance. – 2012. – V.21 (8). – P. 1620–1636.