

# **KINETICS AND MECHANISMS OF SOLID PHASE BRANCHED CHAIN REACTIONS IN THE ENERGETIC MATERIALS**

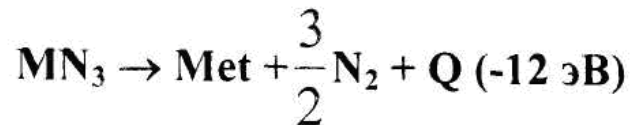
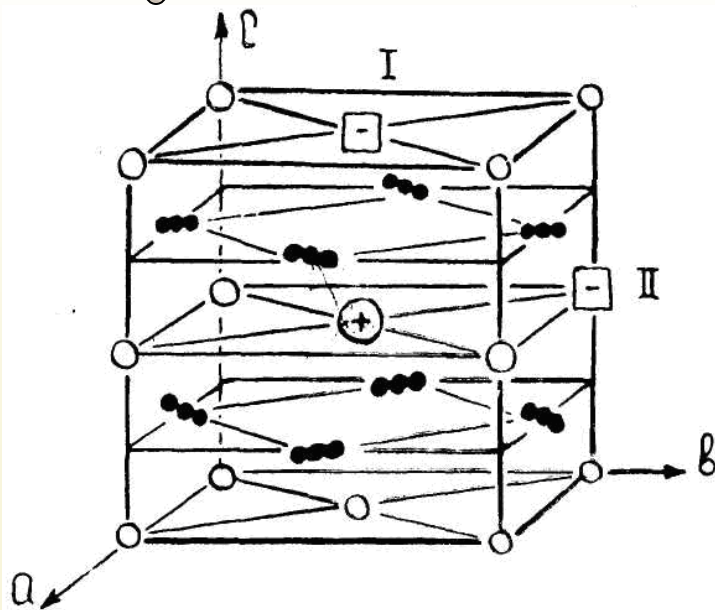
*V.G. KRIGER, A.V. KALENSKII, A.A. ZVEKOV, P.G. ZHURAVLEV,*

*A.P. BOROVIKOVA*

*Kemerovo State University, Krasnaya st., 6, Kemerovo, 650043, Russian Federation,  
kriger@kemsu.ru, +7(3842)580591*

Kemerovo, 2014

# Твердофазные реакции в АТМ

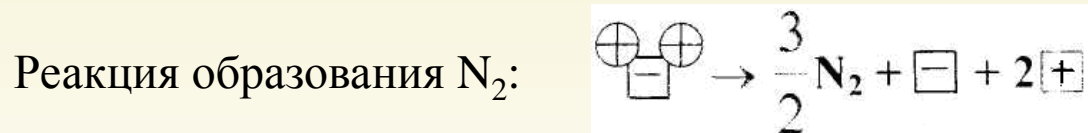


Основная стадия энерговыделения  
 $a=5,94\text{Å}; b=5,56 \text{ Å}; c=6,03\text{Å}$  ( $\text{AgN}_3$ )

Ионно-ковалентная связь п/п р-типа:  
 $\mu_p \sim 5 \div 10 \text{ см}^2/\text{Вс}$

Учет поляризации решетки:  $R_p \sim 9\text{Å} \Rightarrow p \neq \text{N}_3^0$ ;  
 $\mu_p \sim 5 \div 10 \text{ см}^2/\text{Вс}$

Выгодна локализация  $V_k$  с образованием  $V_F$  ( $\ominus \oplus$ ) и  $V_{F'}$  ( $\oplus \ominus$ )



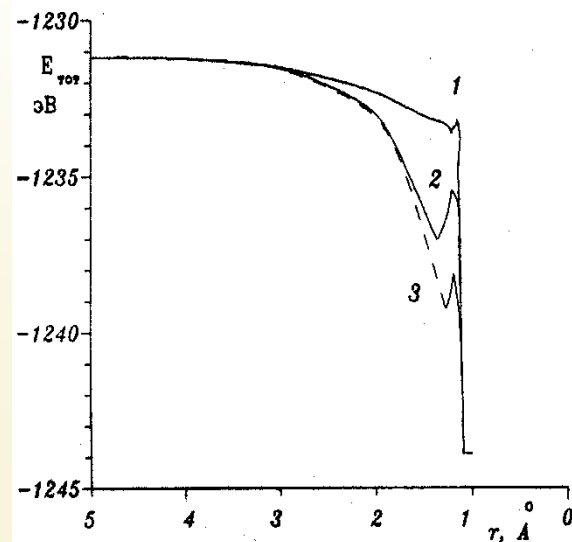
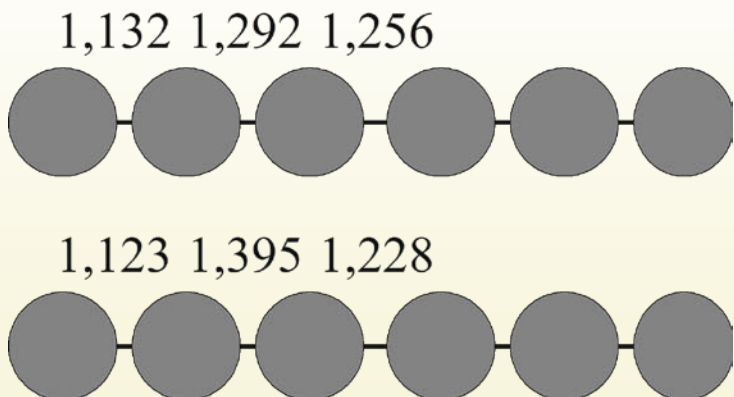
Процессы: термо-, фото-, радиационного разложения.

$V_{\text{мет}}, V_{\text{газа}} \rightarrow +$  легко измеримы. Обратная связь:

$\ominus$  - автоингибирование процесса разложения растущими ядрами металла  
 (Фотоусталость, автоколебательный режим)

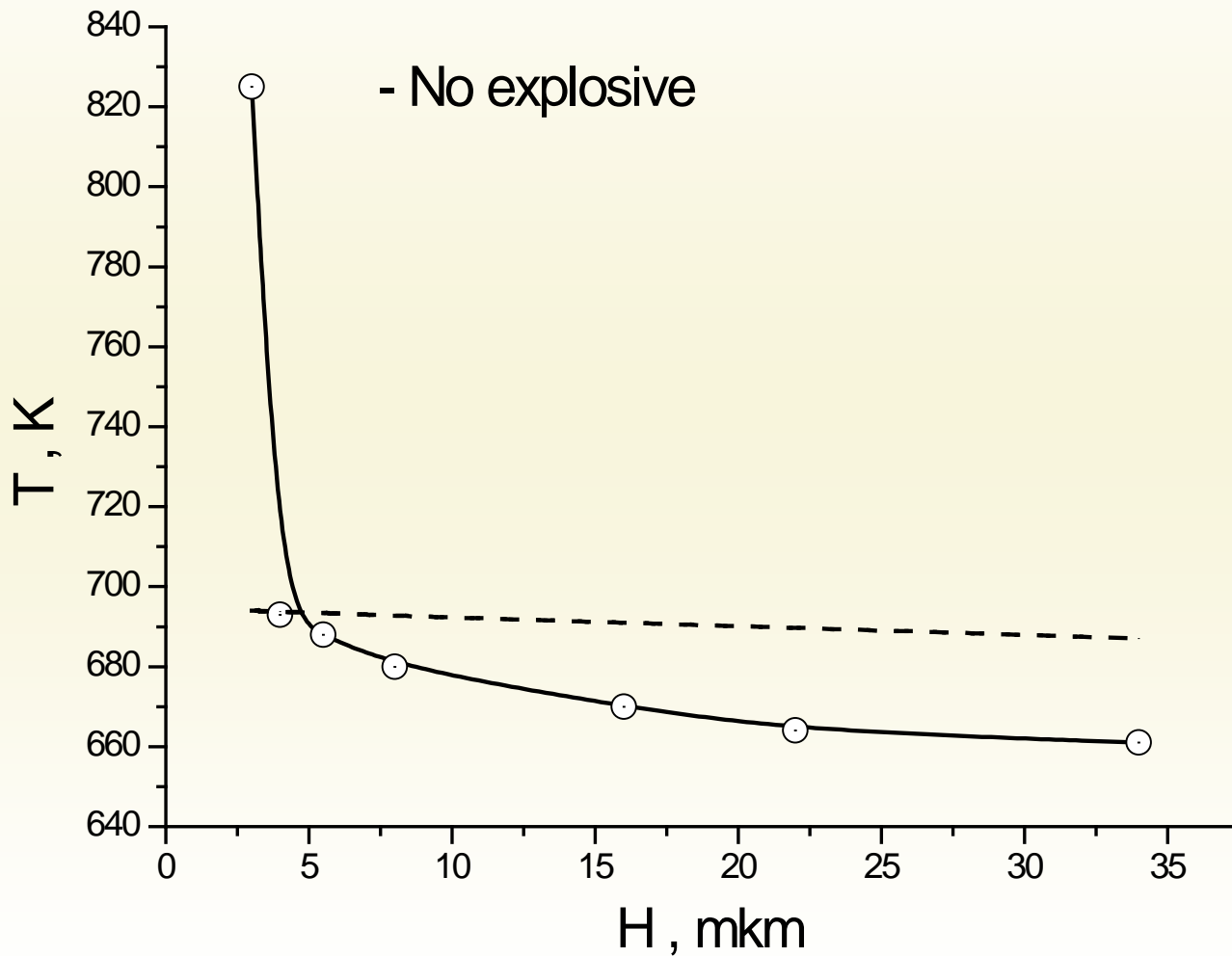
$\oplus$  - размножение реагентов за счет энергии химической реакции (Твердофазные цепные реакции, взрывное разложение АТМ)

# Моделирование реакции $2\text{N}_3 \rightarrow 3\text{N}_2$

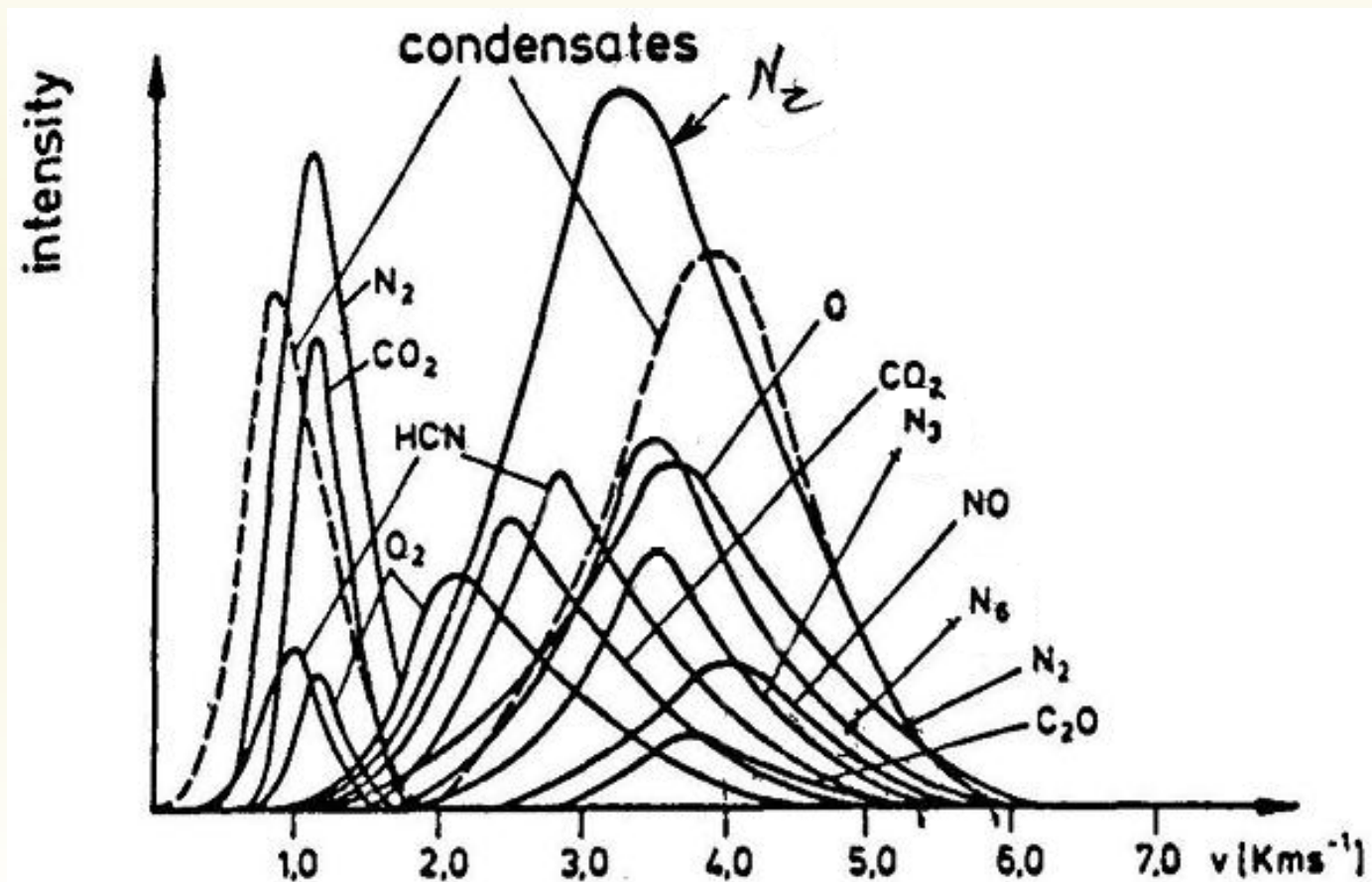


	$E_{\text{ин}}, \text{эВ}$	$l, \text{А}$	$U, \text{эВ}$	$k, \text{с}^{-1}$
Лин.	-2,4	0,1	0,45	$10^7 \div 10^8$
Плос.	-5,85	0,28	1,65	$10^2 \div 10^3$
Цикл.	-8,03	0,35	1,1	$10^2 \div 10^3$

# Зависимость температуры вспышки от размера образца

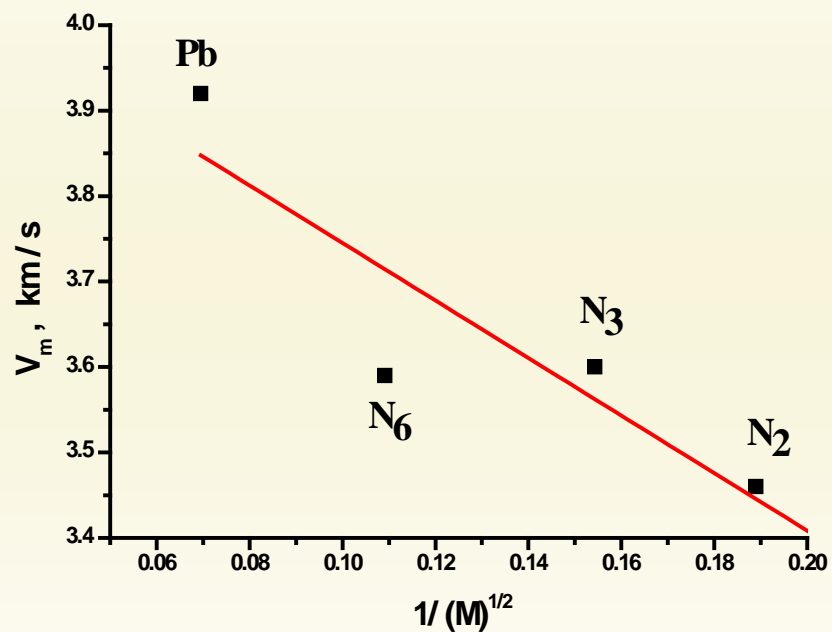
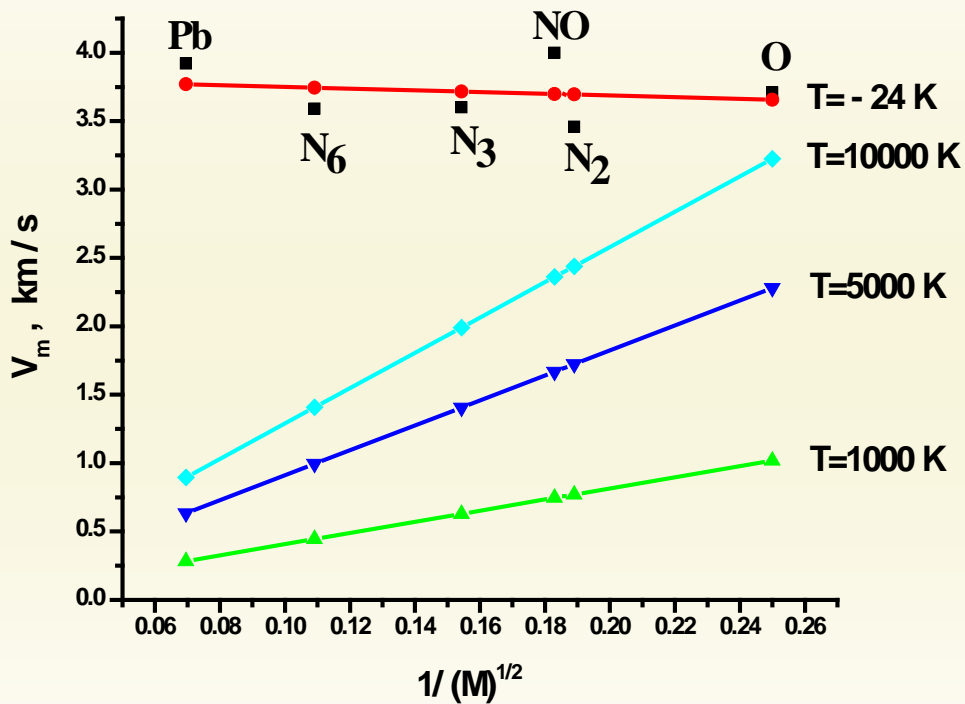


# Распределение продуктов взрыва смеси азида и стифната свинца по скоростям



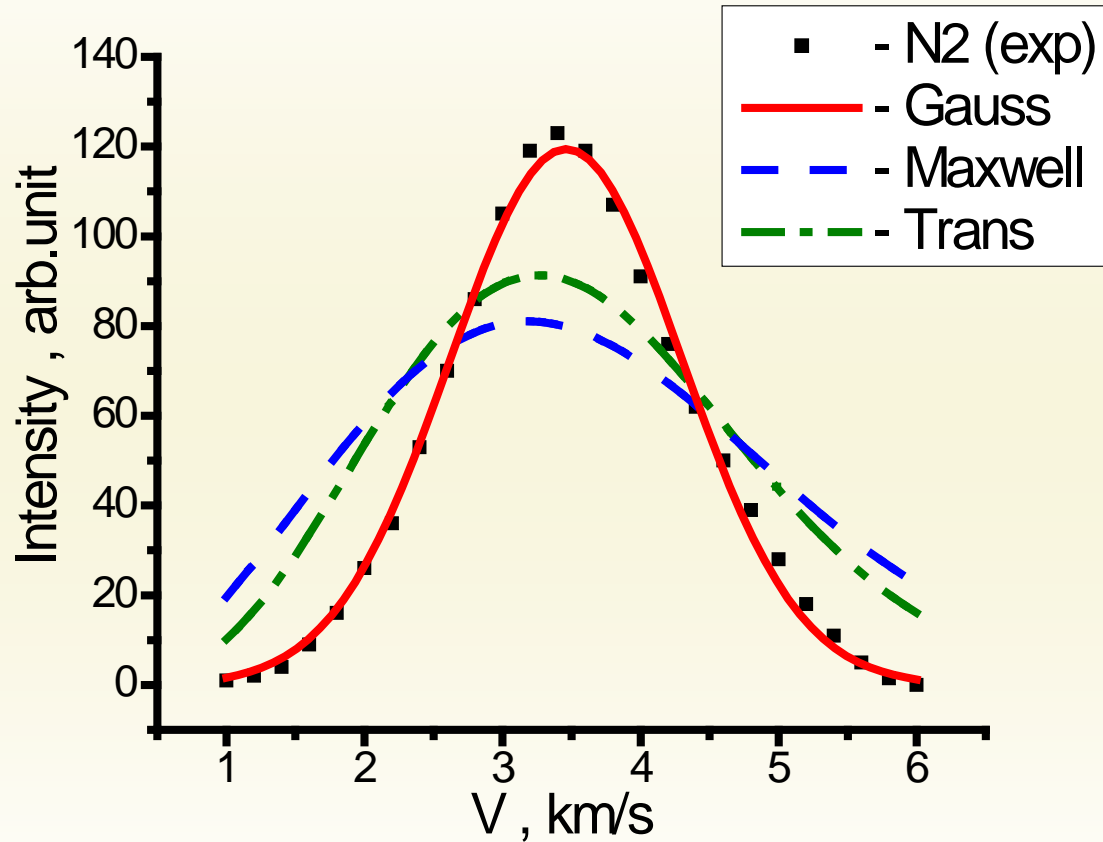
<sup>5</sup>Trinks H., Schilf N. //Gasdyn., Detonation and explosion tech. New-York, 1981, N9, pp. 242 – 252.

# Зависимость скорости разлета от массы продуктов

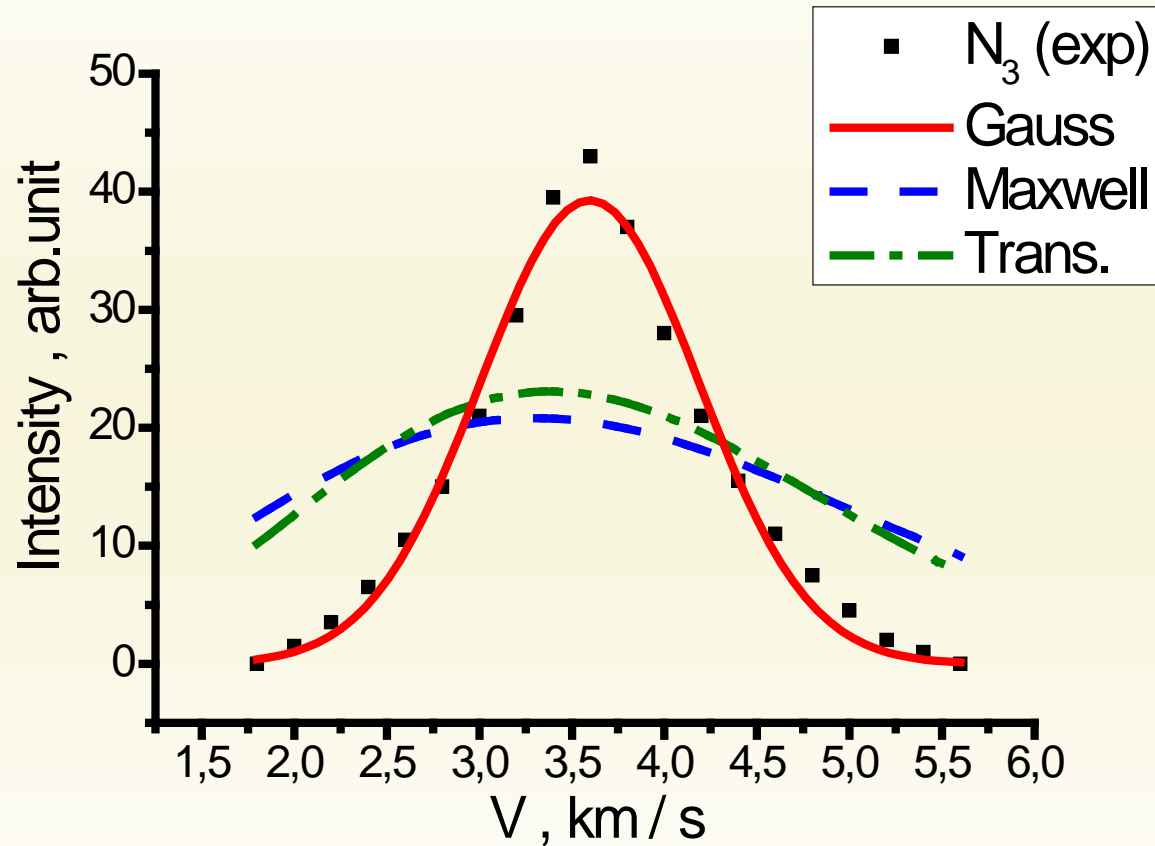


<sup>5</sup>Trinks H., Schilf N. //Gasdyn., Detonation and explosion tech. New-York, 1981, N9, pp. 242 – 252.

# Распределение скоростей разлета $N_2$

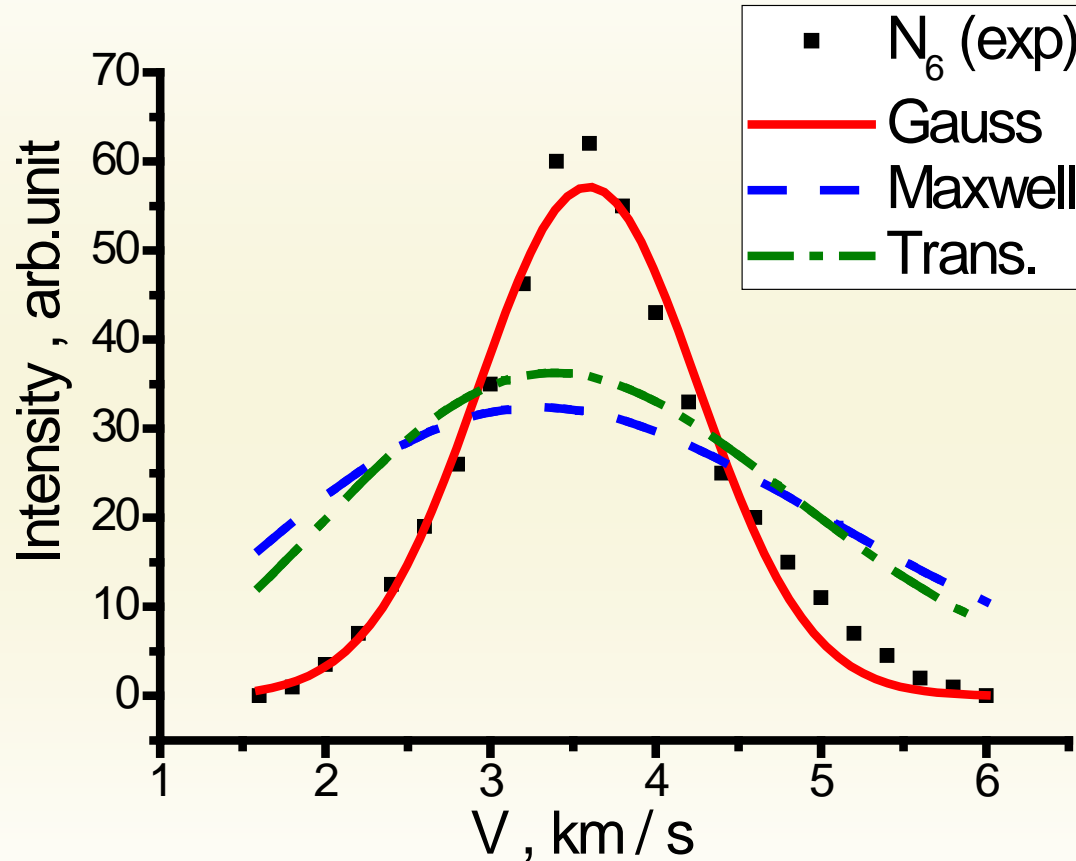


# Распределение скоростей разлета $N_3$

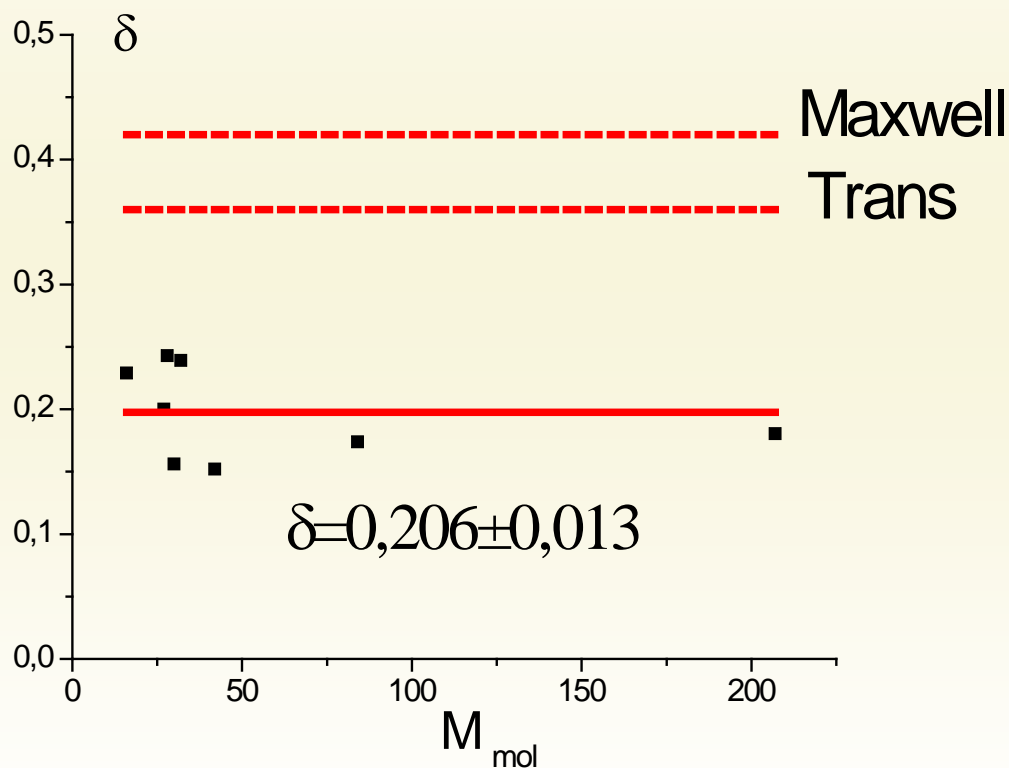




# Распределение скоростей разлета $N_6$



# Дисперсии скорости для распределений Максвелла



## Распределение Максвелла:

$$\langle(\Delta v)^2\rangle = \overline{v^2} - (\overline{v})^2 = \frac{kT}{M} \left( 3 - \frac{8}{\pi} \right);$$

$$(\overline{v})^2 = \frac{kT}{M} \left( \frac{8}{\pi} \right);$$

$$\delta_M = \sqrt{\frac{\langle(\Delta v)^2\rangle}{(\overline{v})^2}} = \sqrt{\frac{3\pi}{8} - 1} = 0.42$$

## Трансмиссионное Распределение Максвелла:

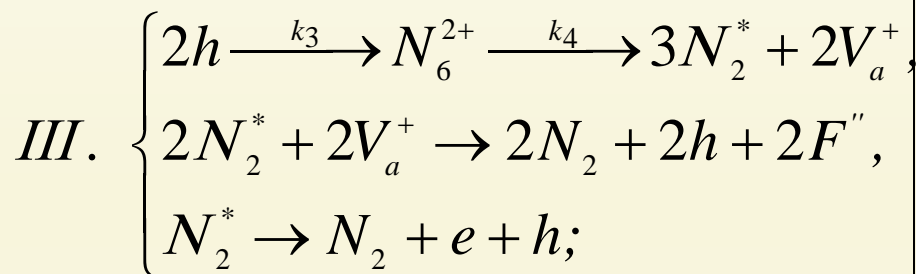
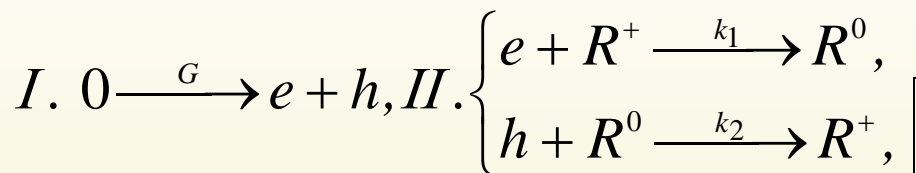
$$\langle(\Delta v)^2\rangle = \overline{v^2} - (\overline{v})^2 = \frac{kT}{M} \left( 4 - \frac{9}{8} \pi \right);$$

$$(\overline{v})^2 = \frac{kT}{M} \left( \frac{9}{8} \pi \right);$$

$$\delta_T = \sqrt{\frac{\langle(\Delta v)^2\rangle}{(\overline{v})^2}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 8}{9\pi} - 1} = 0.36$$

# Бимолекулярная модель

Схема элементарных стадий модели:



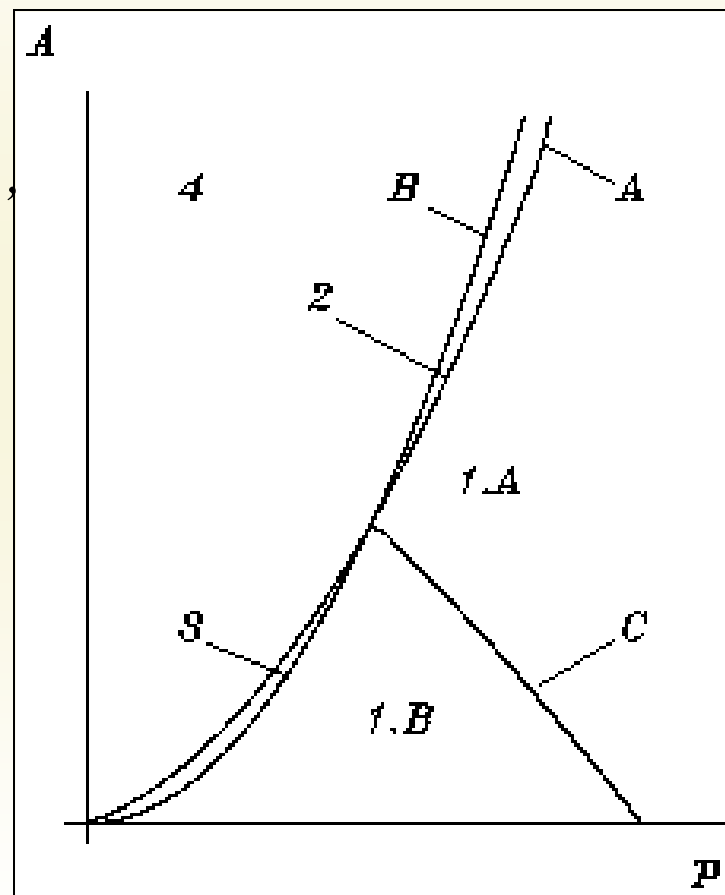
Фазовый портрет.

Координаты

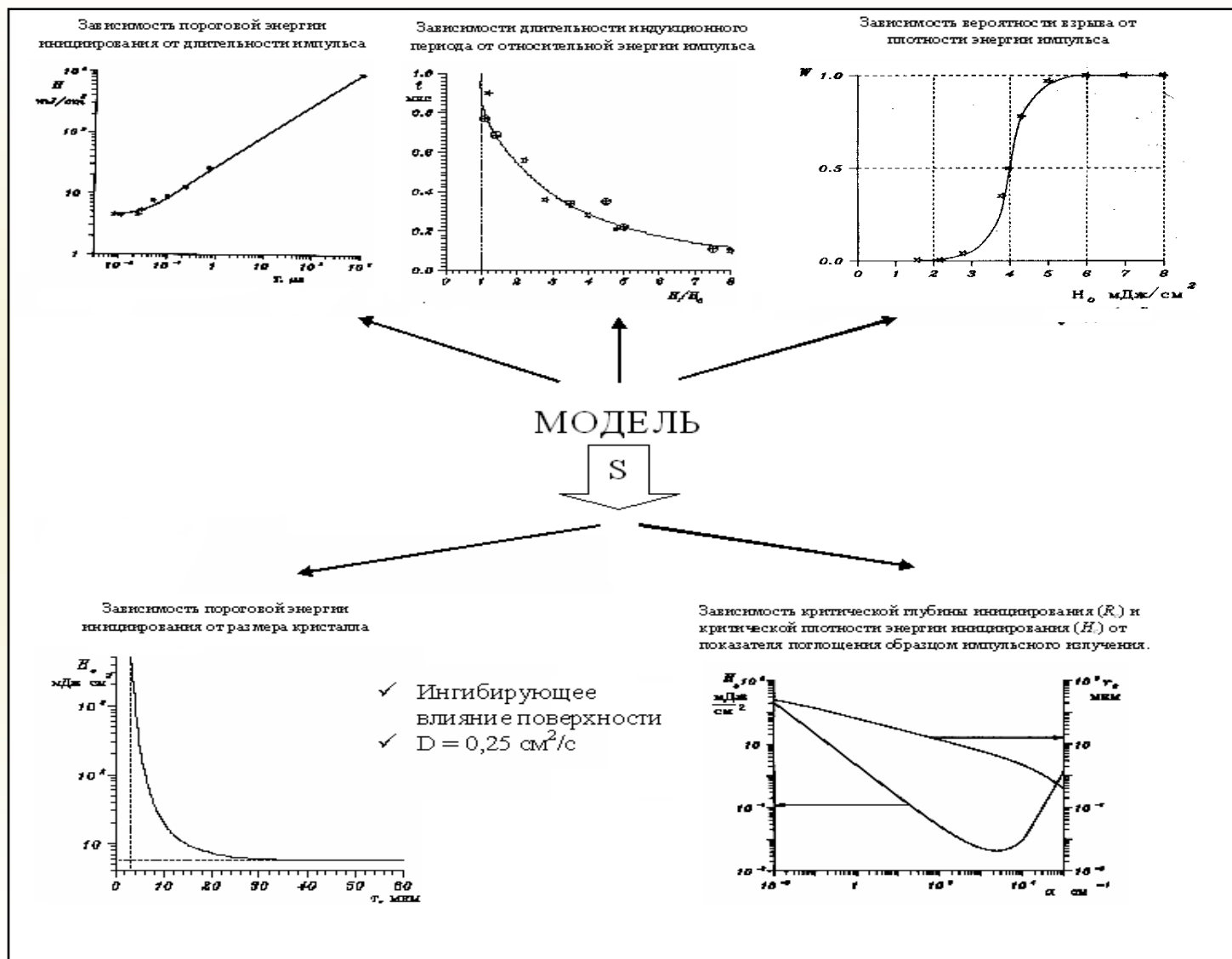
критической точки:

$$A_k = k_r^2 / k_3 k_4,$$

$$p_k = k_r / k_3.$$



# Результаты расчета по модели



# Учет поверхностной рекомбинации

$r \downarrow \rightarrow H_c \uparrow$  Повышенная скорость рекомбинации на поверхности

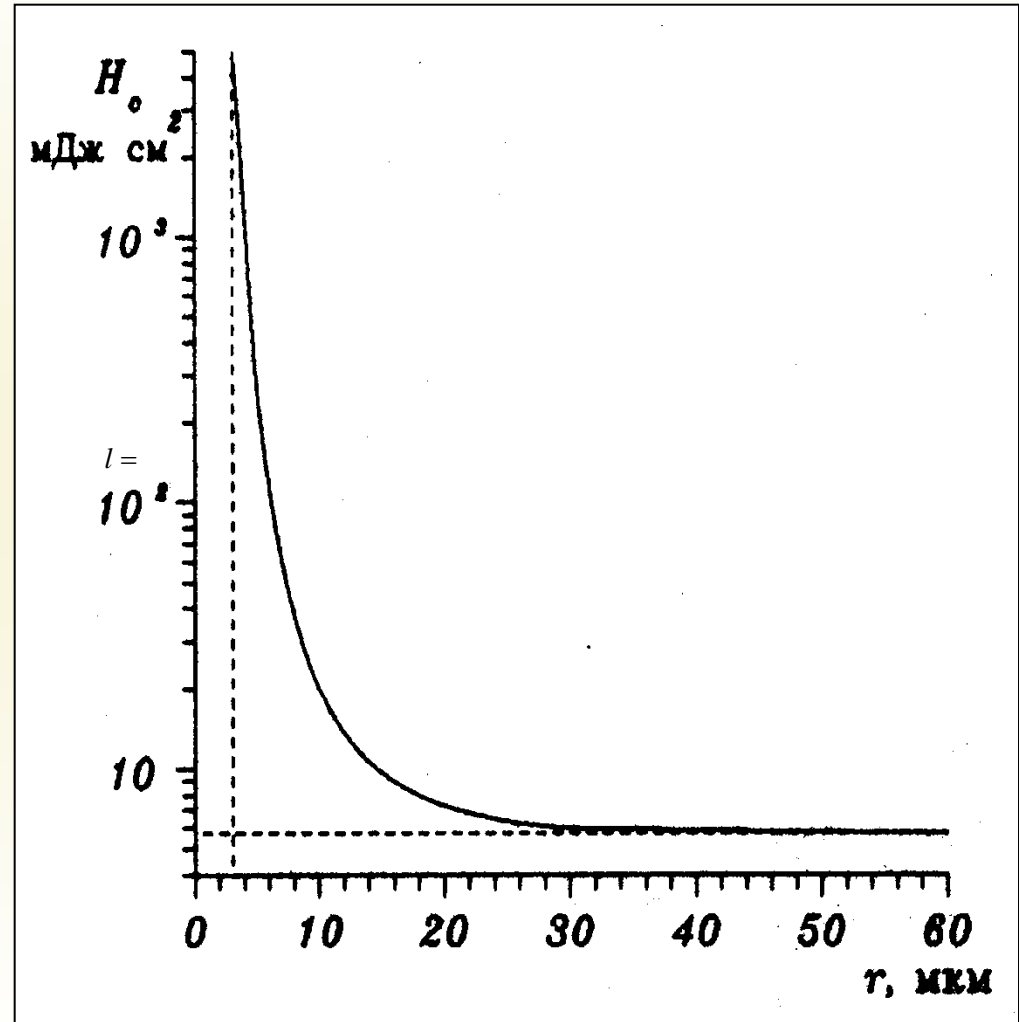
$$H_c(r) = \left[ \frac{k_r^*}{k_3} + \frac{2(k_r^*)^2}{k_3 k_4} \right] \cdot \frac{E}{\alpha}$$

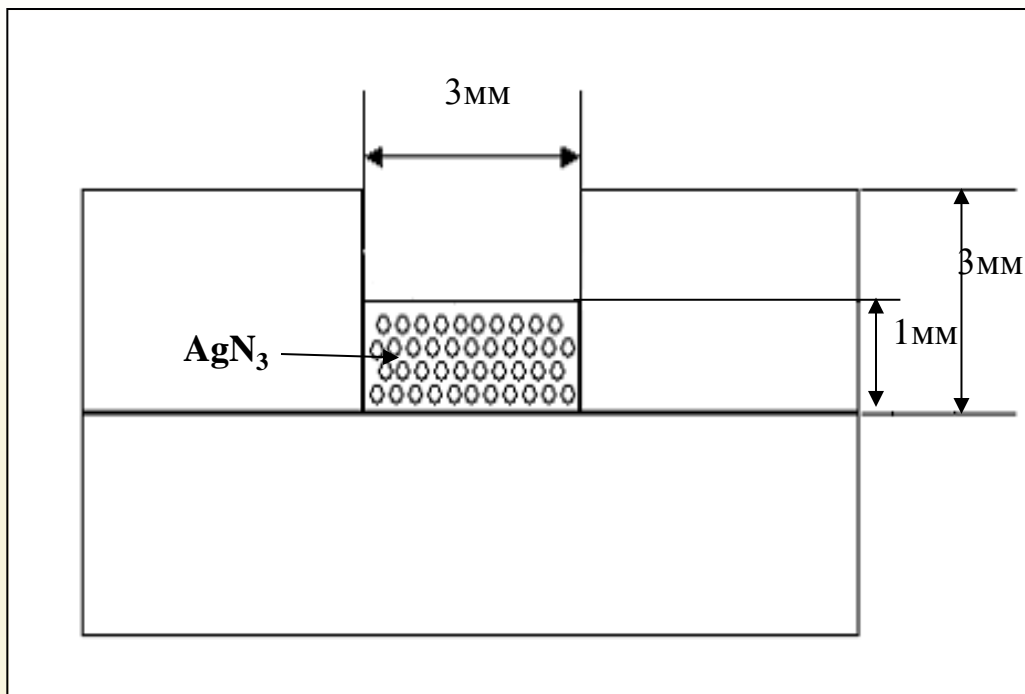
$$k_r^* = k_r + \frac{\zeta \pi^2 D}{r^2}$$

$D = 0.25 \text{ см}^2/\text{с}$  — коэффициент диффузии дырок, соответствующий значению  $\mu \sim 10 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ .

При размерах кристалла соизмеримых с длиной свободного пробега дырок  $\sim 10 \text{ мкм}$   $H_c$  возрастает.

$$l = \sqrt{D\tau}$$



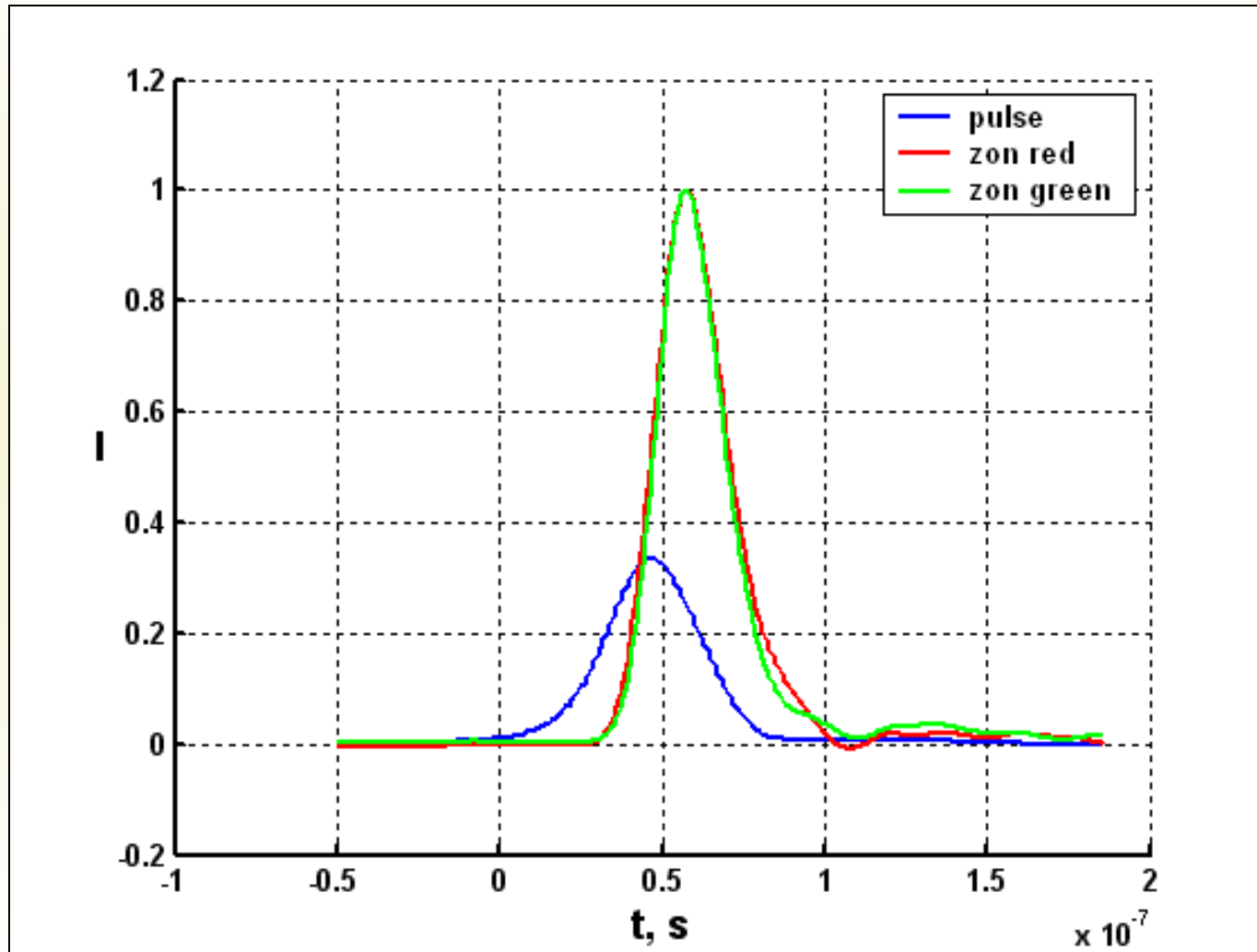


1. Диаметр лазерного пучка  $d_{\text{imp}} = 200 \text{ мкм}$ ;
2. Диаметр облучаемого образца  $d_m = 3 \text{ мм}$ ;
3. Масса образца  $m = 5 \text{ мг}$ ;
4. Размер кристаллов  $r = 5 \div 7 \text{ мкм}$ .

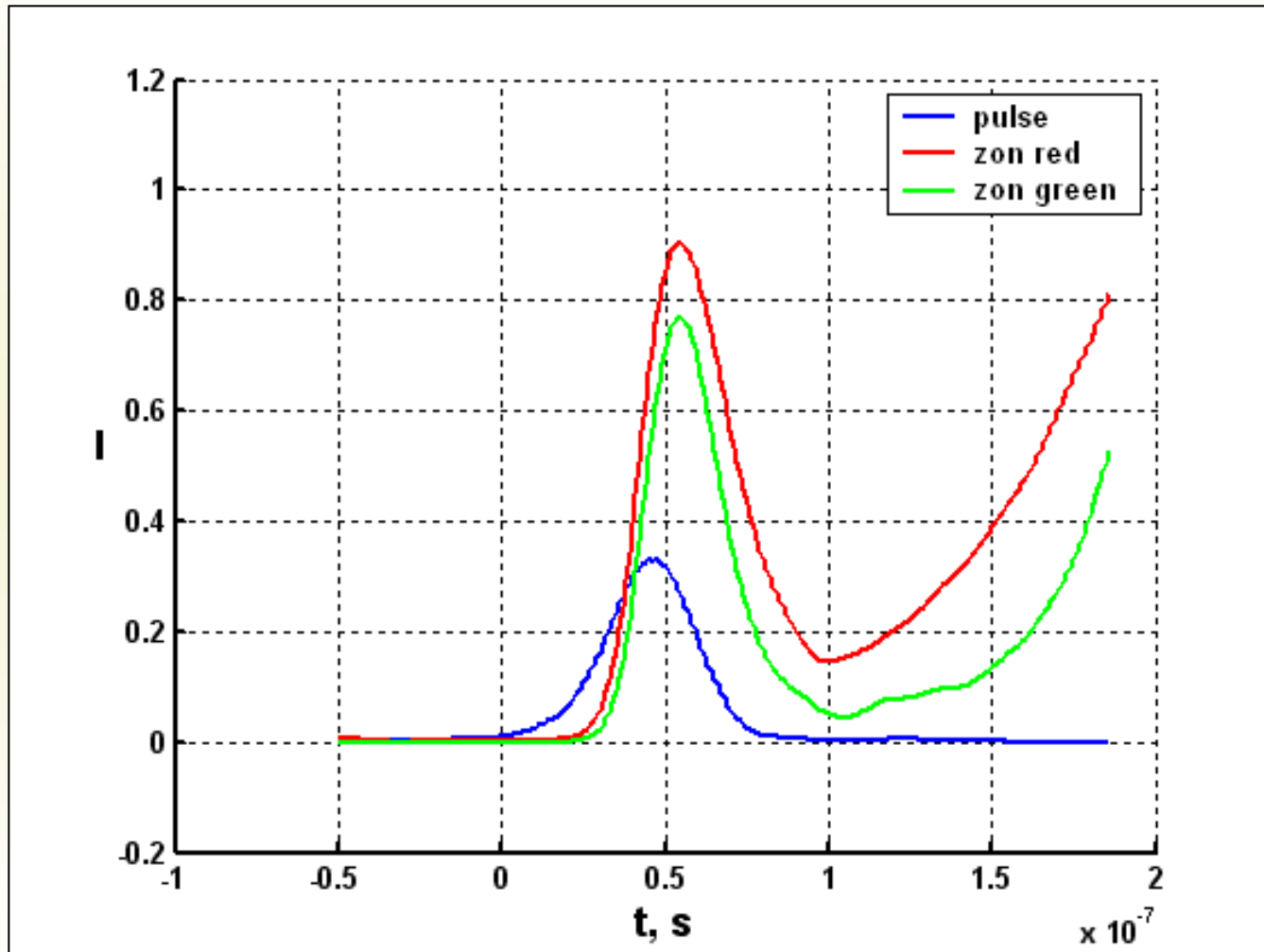
$H < H_c(r)$  – вспышка свечения, изменение положения подложки и повторное воздействие лазерным импульсом с большей плотностью энергии.

$H > H_c(r)$  – взрыв всего образца.

# Осциллограмма свечения микрокристалла азида серебра при воздействии лазерного импульса с $H/H_c=0.93$

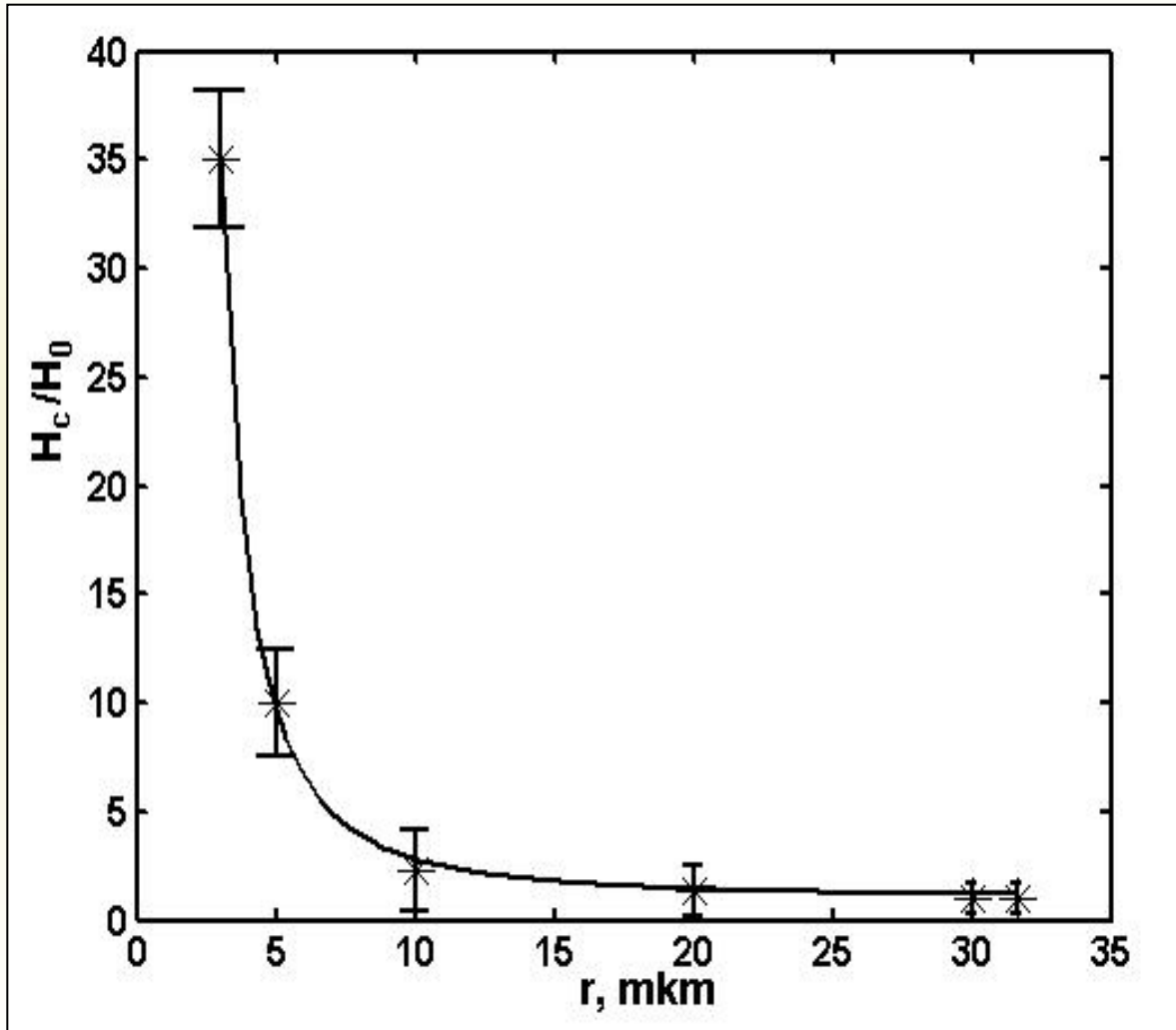


# Осциллограмма свечения микрокристалла азида серебра при воздействии лазерного импульса с $H/H_c=1$





# Экспериментальная зависимость $H_c$ от $r$



Точки – эксперимент;  
Линия – расчет по формуле:

$$\frac{H_c(r)}{H_0} = \frac{k_r^* \left( 1 + 2 \cdot \frac{k_r^*}{k_1} \right)}{k_r \left( 1 + 2 \cdot \frac{k_r^*}{k_1} \right)}$$

$$k_r = 4,5 \pm 0,4 \text{ c}^{-1}$$

$$D = 0,25 \text{ cm}^2/\text{c}$$

# Константа скорости обрыва цепи

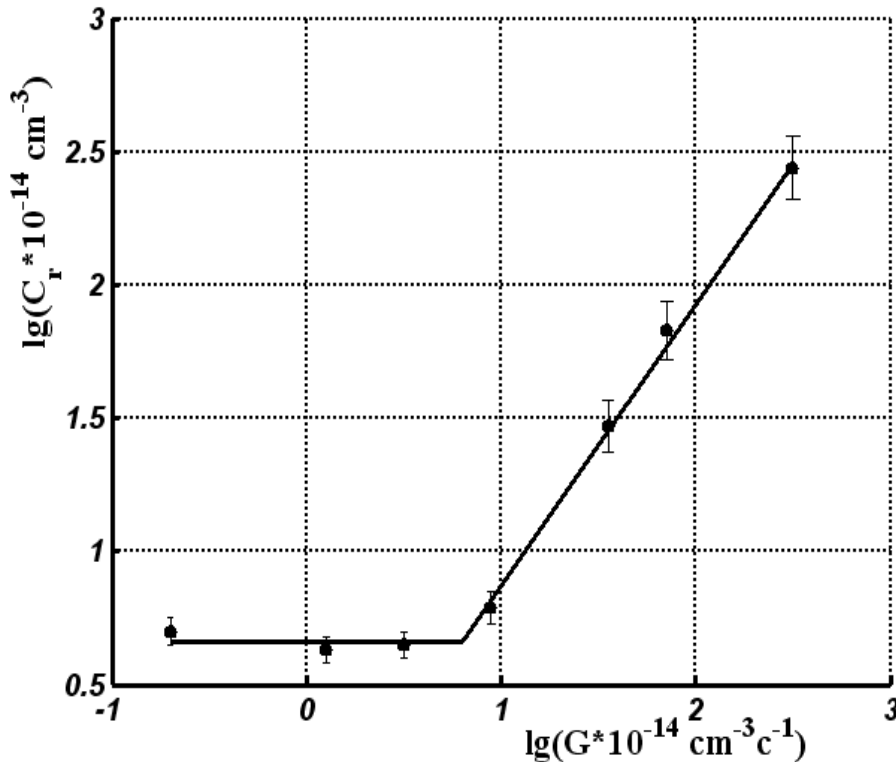
Способ определения	$H(r)$	фотопроводимость [7]	$H(t_{\text{имп}})$ [8]	$t_{\text{инд}}(H/H_0)$ [8]
$k_r \cdot 10^{-6}, \text{с}^{-1}$	$4,5 \pm 0,4$	$4,0 \pm 1,0$	$9.0 \pm 0.8$	$2.8 \pm 0.3$
Образец	Микрокристаллы	Монокристаллы	Прессованные таблетки	
		$\text{AgN}_3$	$\text{Pb}(\text{N}_3)_2$	

Впервые определен коэффициент диффузии дырок в условиях взрывного разложения:  $D \sim 0,2 \div 0,3 \text{ см}^2/\text{с}$ ,  $\mu \sim 10 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ . Величина подвижности дырок в условиях взрывного разложения совпадает с определенной ранее при исследовании эффекта Холла.

<sup>7</sup>Кригер В.Г., Каленский А.В., Захаров Ю.А. Единый механизм фото- и радиационно-стимулированного разложения азидов тяжелых металлов. // Материаловедение. 2005. № 7. С.10-15.

<sup>8</sup>Кригер В. Г. Иницирование азидов тяжелых металлов импульсным излучением / В. Г. Кригер, А. В. Каленский // Химическая физика. 1995. № 4. С. 152–160.

# Рост концентрации центров рекомбинации



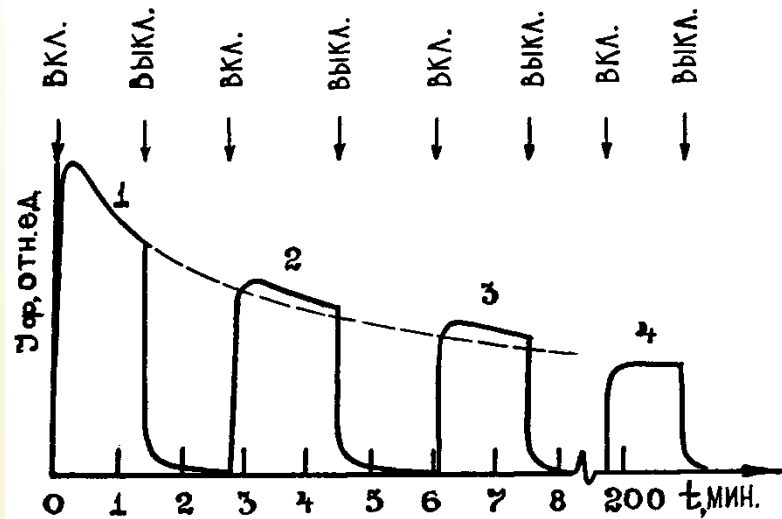
Облучение кристаллов АС способно приводить к увеличению (при  $\lambda < 400$  нм) и отжигу (уменьшению) концентрации центров рекомбинации (при  $\lambda > 500$  нм)<sup>1</sup>

Зависимость концентрации центров рекомбинации от интенсивности излучения ( $\lambda \sim 380$  нм) точки – эксперимент [2], линия – расчет [3].

<sup>2</sup>Диамант Г. М. Неравновесная проводимость в процессе фотохимической реакции в азиде серебра. Дис. канд. физ. мат. наук. Кемерово. 1988.164с.

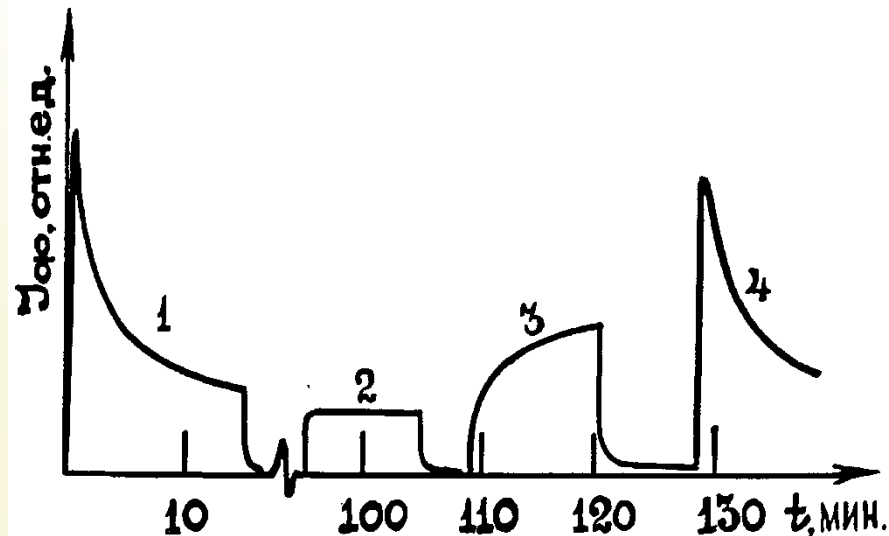
<sup>3</sup>Кригер В.Г., Каленский А.В., Захаров Ю.А. // Материаловедение. 2005.№ 7.С.10-15.

# Кинетика фототока в режиме освещения с темновыми паузами



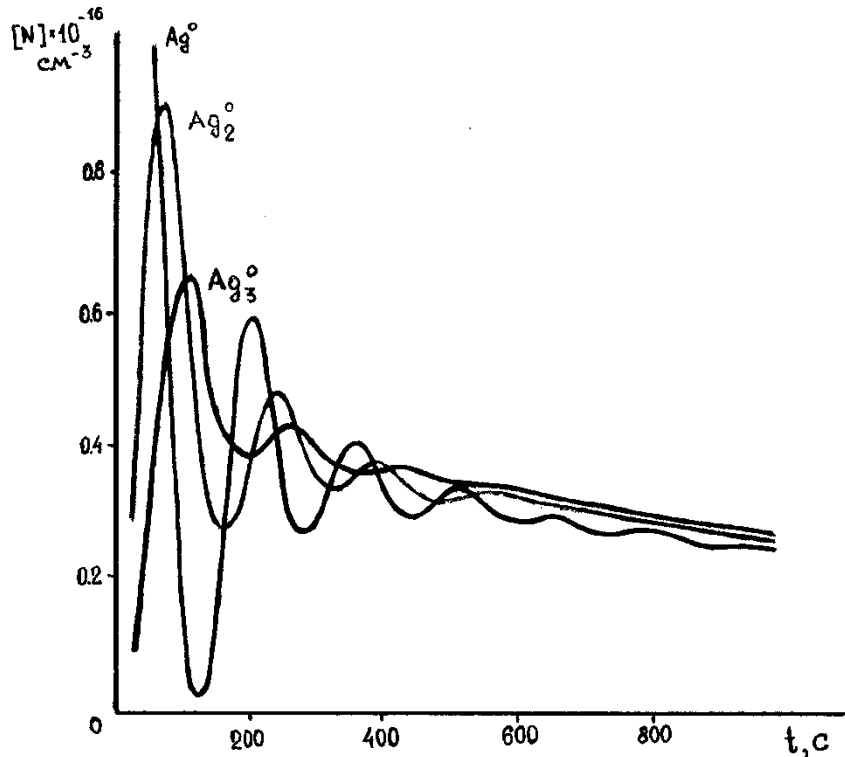
Восстановление вида кинетики для длины волны 370 нм и интенсивности  $10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$  светом:

- 1-первоначальная засветка (370 нм);
- 2-повторная засветка после выдержки в темноте (370 нм);
- 3-засветка длинноволновым светом (500 нм);
- 4-последующее освещение (370 нм)

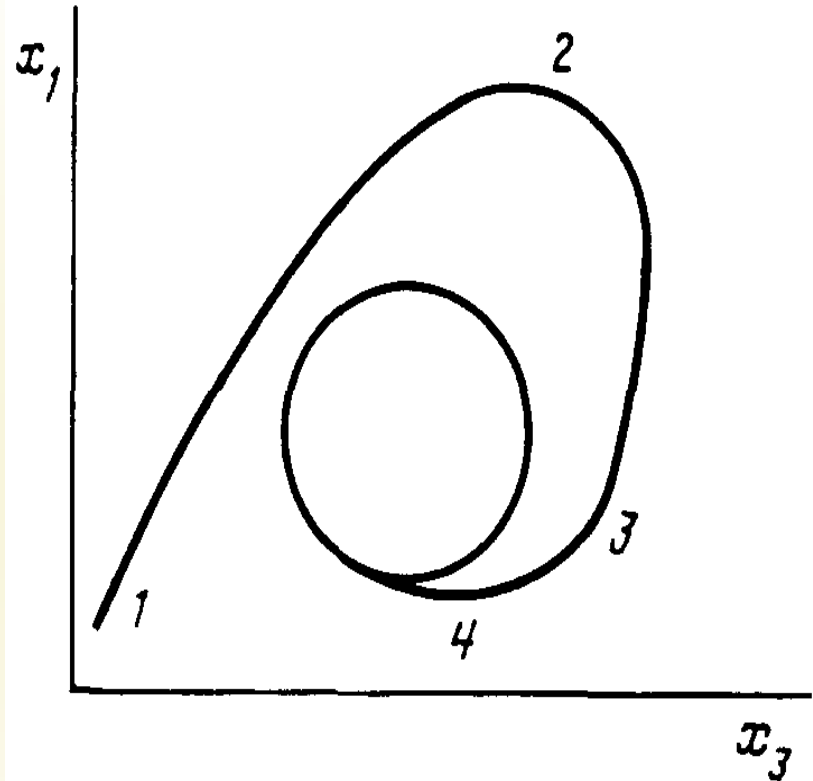


Кинетика фототока для 380 нм и интенсивности света  $10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$  в случае непрерывной (пунктир) и прерывистой (сплошная линия) засветки

# Автоколебания концентраций промежуточных продуктов



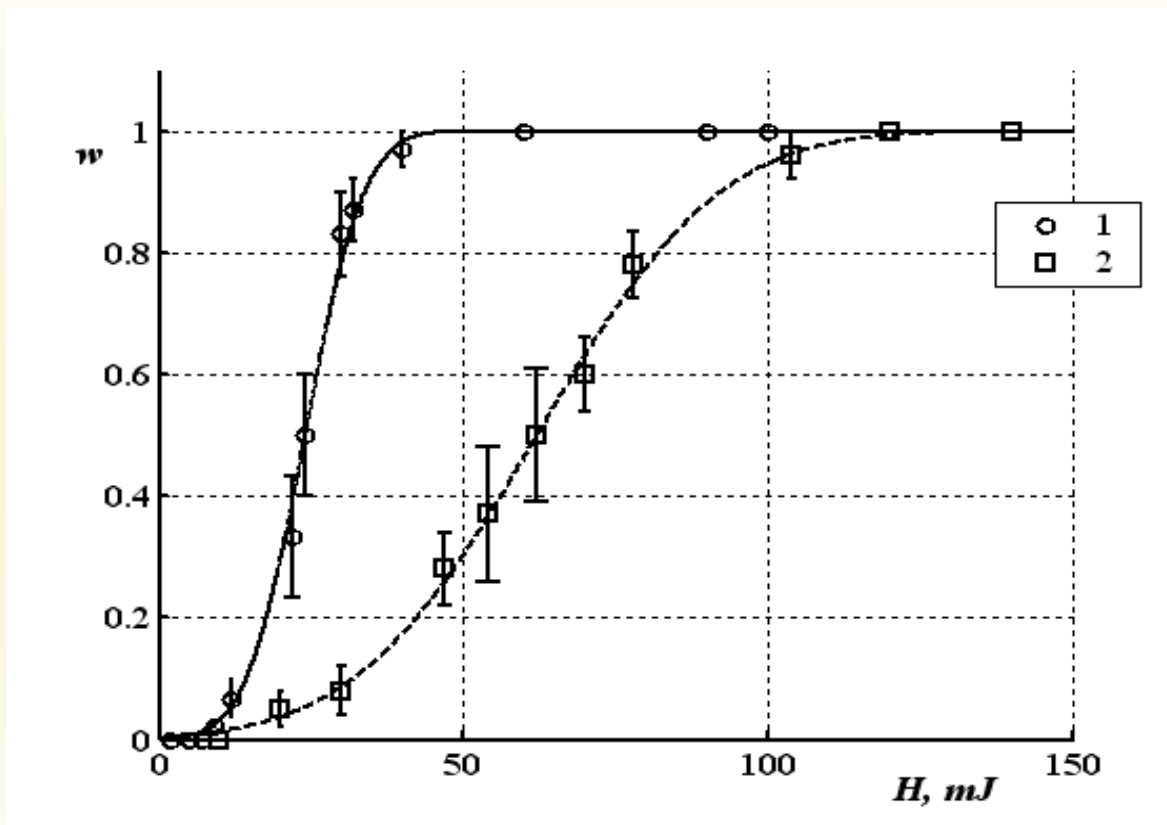
Затухающие колебания концентраций  $Ag_1, Ag_2, Ag_3$



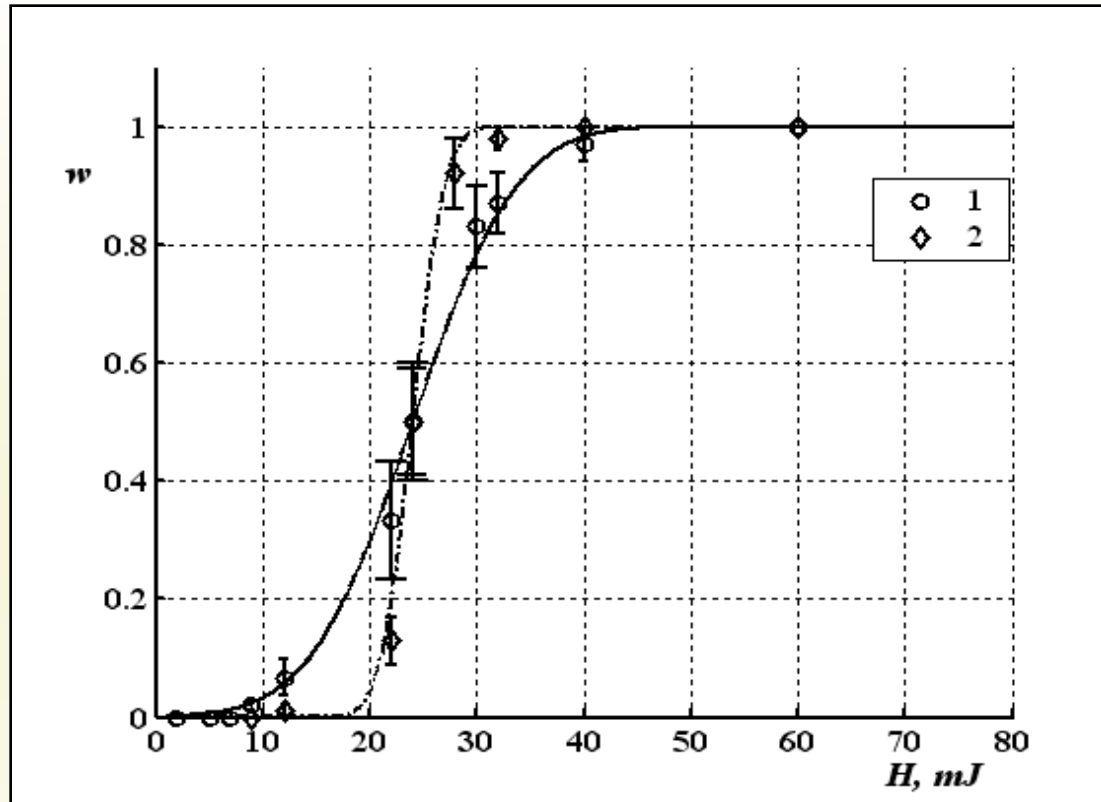
Фазовый портрет в режиме установившихся колебаний

$$T = 2\pi\tau_u / \sqrt{6} \approx 5 \text{ мин}$$

# Влияние созданных центров рекомбинации на вероятностную кривую взрыва

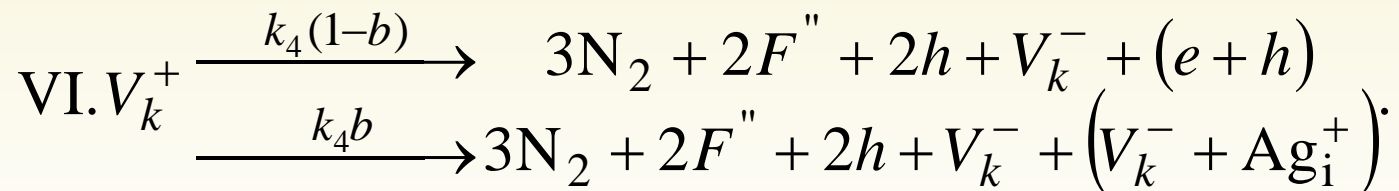
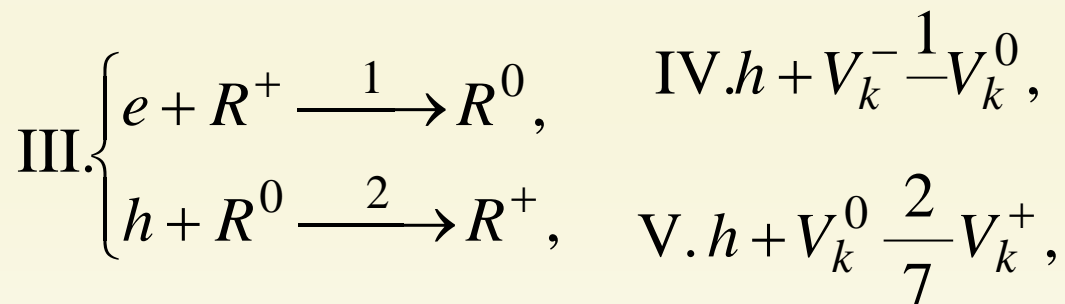


Вероятностная кривая взрыва монокристаллов  $\text{AgN}_3$  (1) и облученных светом с длиной волны 380 нм и интенсивностью  $2 \cdot 10^{14}$  квант/(с·см<sup>2</sup>) в течении 20 минут (2).



Вероятностные кривые взрыва монокристаллов кристаллов  $\text{AgN}_3$  (1) и кристаллов  $\text{AgN}_3$ , облученных светом с  $\lambda = 380$  нм в течении 20 минут, затем светом с  $\lambda = 550$  нм и интенсивностью  $10^{14}$  квант/(с·см<sup>2</sup>) в течении 20 минут (2).

# Собственно-дефектная модель твёрдофазной цепной реакции





При учёте рассеяния на продольных оптических фононах выражения для  $\mu_p$ ,  $\mu_n$  в азиде серебра, как функции эффективной массы, имеют вид [17]:

$$\mu_p = \frac{1,744 \cdot 10^4}{(M_p/m_0)^{1/2}} \cdot \left(\frac{T}{304}\right)^{1/2} (CGSE)$$

$$\mu_n = \frac{9,885 \cdot 10^3}{a(M_n/m_0)} \left(\frac{304}{T}\right)^{1/2} (CGSE)$$

Величины подвижностей при  $m_p=3m_0$ ,  $m_n=0,5m_0$  и  $T=300K$  составляют:

$$\mu_p=7-8 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$$

$$\mu_n=10-12 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$$

<sup>17</sup>Кригер В.Г. Поляронный характер носителей заряда в азиде серебра. - Изв. АН СССР, сер. Неорг. м-лы, 1982, № 6. С. 960.

Константы захвата электронов и дырок зависят от сечения захвата  $S_i$  на данном типе ловушек и средней тепловой скорости носителей  $V_{n,p}$ :

$$\gamma_{in,p} = V_{n,p} \cdot S_i$$

Где  $V_{n,p} = \sqrt{8kT / \pi M_{n,p}}$ ;  $M_{n,p}$  – эффективная масса полярона

Константы скоростей и сечения захвата электронов и дырок заряженными и нейтральными центрами в азиде серебра приведены в таблице 3.

Таблица 3. Константы скоростей и сечения захвата

Центр	$\gamma_p, \text{см}^3\text{с}^{-1}$	$S_p, \text{см}^2$	$\gamma_n, \text{см}^3\text{с}^{-1}$	$S_n, \text{см}^2$
$V_k^-$	$1,54 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-12}$	—	—
$V_k^0$	$4,8 \cdot 10^{-8}$	$3,4 \cdot 10^{-14}$	$2,9 \cdot 10^{-7}$	$2,23 \cdot 10^{-14}$
$Ag^+$	—	—	$2,3 \cdot 10^{-6}$	$1,77 \cdot 10^{-13}$

# Оценка параметров ионного разупорядочения и констант скоростей ионных стадий в азиде серебра

Модель упругих напряжений Зинера устанавливает связь между активационными объемами образования  $\Delta V_F$  и миграции  $\Delta V_M$  дефектов и термодинамическими параметрами процесса : энергией Гиббса  $\Delta G$ , энтальпией  $\Delta H$  и энтропией  $\Delta S$ .

$$\Delta V = 2 \left( \gamma - \frac{1}{3} \right) \chi \Delta G \quad \Delta G = \Delta H - T \Delta S \quad \Delta S = \frac{\beta}{\chi} \Delta V$$
$$\Delta V = \frac{2(\gamma - 1/3)\chi}{1 + 2(\gamma - 1/3)\beta T} \Delta H$$

где  $\beta = 1,71 \cdot 10^{-4}$  1/К [23] – коэффициент объемного термического расширения

$\chi = 3,8 \cdot 10^{-11}$  м<sup>2</sup>/Н [24] – изотермическая сжимаемость

$$\gamma = \frac{\beta}{\chi C_v - \beta^2 T} \quad \text{– постоянная Грюнайзена}$$

при T=300 К  $\gamma=1,97$   
при T=400 К  $\gamma=2,05$

<sup>23</sup>Боуден Ф., Иоффе А. Быстрые реакции в твердых веществах. -М.: Мир, 1962. - 247 с.

<sup>24</sup>Energetic Materials. vol. 1. Physics and chemistry of the inorganic azides. Ed. Fair H.D., Walker R.F. New-York-London, Plenum Press, 1977, 382 pp.

# Значения активационных объемов образования и миграции собственных дефектов в азиде серебра

Исследование проводимости азиды серебра в условиях высокого гидростатического сжатия  $P \sim 0,8$  Гбар позволило определить активационные объемы миграции и образования дефектов.

Образец	$\Delta V_f,$ $\text{см}^3 \text{моль}^{-1}$	$\Delta V_m,$ $\text{см}^3 \text{моль}^{-1}$	Лит-ра
Прес. Табл.	$14,6 \pm 1,0$	$2,8 \pm 0,3$	[20]
Монокристалл	12,8	3,8	[21]
Игольчатый кристалл	$12,6 \pm 2,4$	$6,8 \pm 0,2$	[22]

$V(\text{AgN}_3) = 31,2 \text{ см}^3/\text{моль} > V_f, V_m \Rightarrow \text{AgN}_3$  разупорядочен по Френкелю.

<sup>20</sup> Reis C.S., Chaundri M.M. The electrical conductivity of silver azide ( $\text{AgN}_3$ ) at high hydrostatic pressure// J. Phys. C: Solid State Phys. – 1987. – V.20, №26. – P.4097-4104.

<sup>21</sup> А.Е. Saprykin, G.M. Diamant and Yu.N. Sukhushin. Non-equilibrium silver azide conductivity at high hydrostatic pressure// Reactivity of Solids, 7 (1989) 289-292.

<sup>22</sup> G.M. Diamant, A.E. Saprykin and Yu. Yu. Sidorin. The effect of high hydrostatic pressure on silver azide electrical conductivity // Reactivity of Solids, 7 (1989) 375-381.

# Термодинамические параметры процесса дефектообразования

	$\Delta V,$ см <sup>3</sup> /моль	$\Delta H,$ эВ	$\Delta S \cdot 10^{-4},$ эВ/К	$\Delta G,$ эВ
Образование	12,6	1,12	5,88	1,03
Миграция в плоскости [110]	3,8	0,34	1,77	0,31
Миграция в плоскости [001]	6,8	0,6	3,18	0,56

# Оценка параметров ионной разупорядоченности и токопереноса в азиде серебра

$$\mu_i = \frac{Aevr^2}{kT} \exp\left(\frac{\Delta S_m}{k}\right) \exp\left(\frac{\Delta H_m}{kT}\right)$$

$$n_i = (N' N)^{1/2} \exp\left(\frac{\Delta S_f}{2k}\right) \exp\left(\frac{\Delta H_f}{2kT}\right)$$

$$A=1$$

- Геометрический фактор

$$\nu=4,1 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$$

- Частота колебаний иона

$$r=6,02 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

- Постоянная решетки в направлении [001]

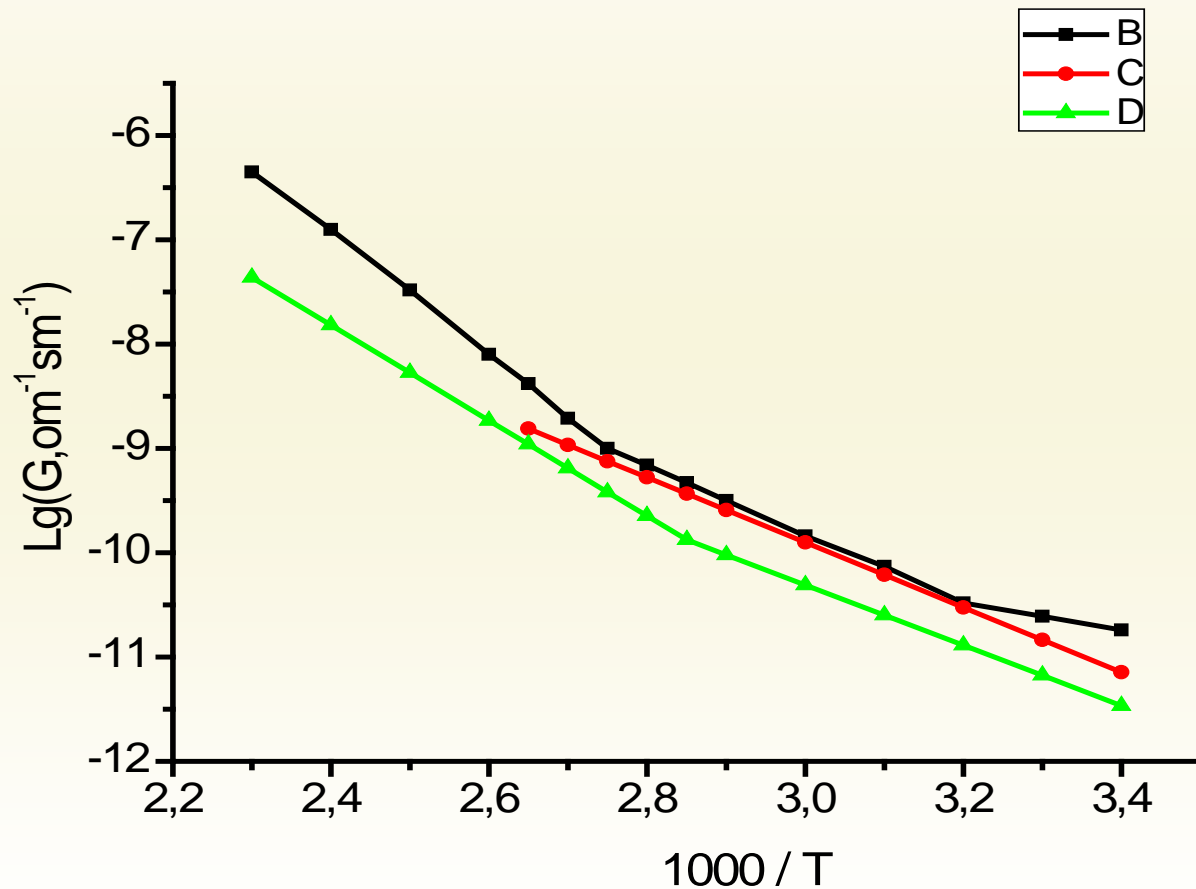
$$\sigma = e \mu n$$

При  $T=300 \text{ К}$

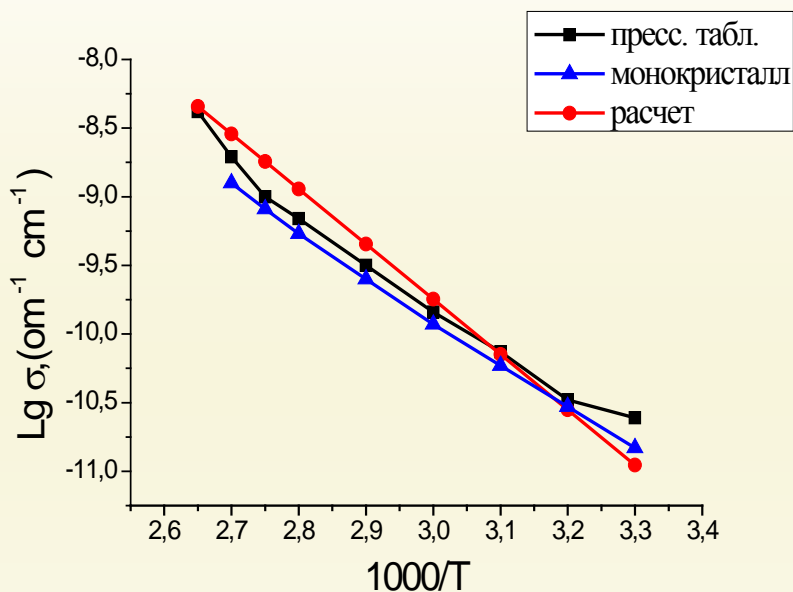
Для монокристаллов:

$$n_i = 8,28 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3} \quad \mu_i = 9,83 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с} \quad \sigma = 1,3 \cdot 10^{-11} \text{ ом}^{-1} \text{с}^{-1}$$

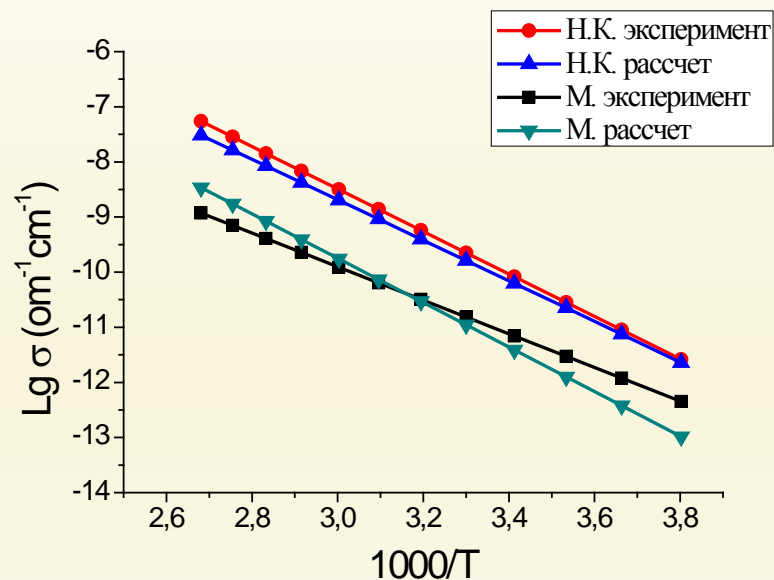
# Температурная зависимость проводимости AgN3 при нормальном давлении



# Зависимости ионной проводимости от температуры для различных типов кристаллов азидата серебра



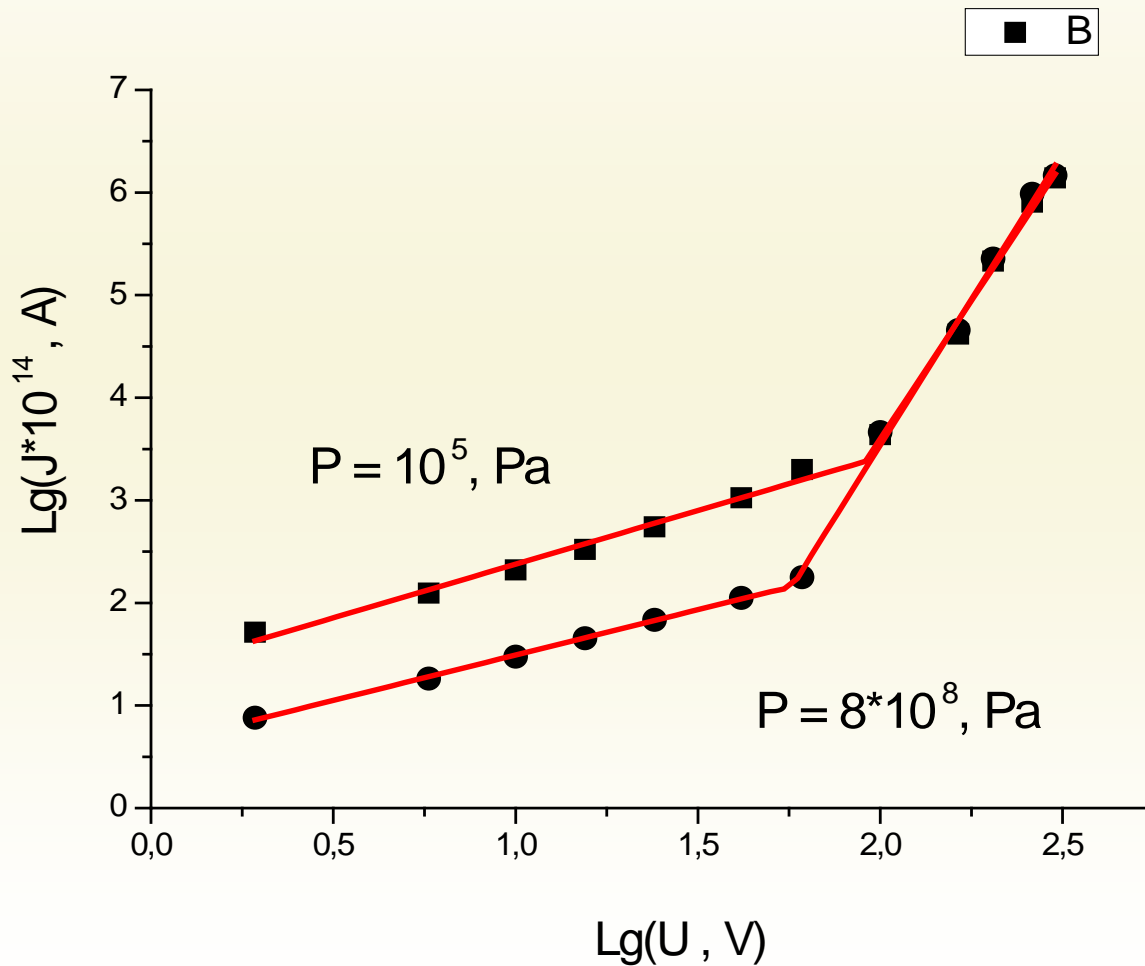
Зависимость ионной проводимости  $\sigma$  от температуры для моно- и поликристаллов азидата серебра



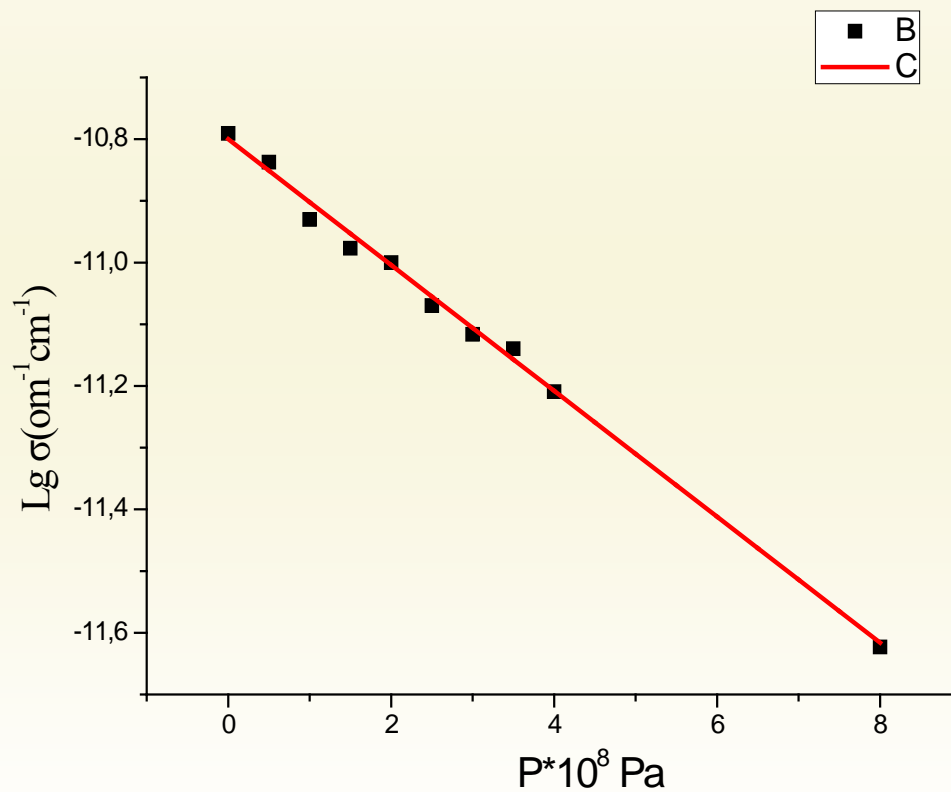
Зависимость ионной проводимости  $\sigma$  от температуры для моно- (м.) и нитевидных кристаллов (н.к.) азидата серебра



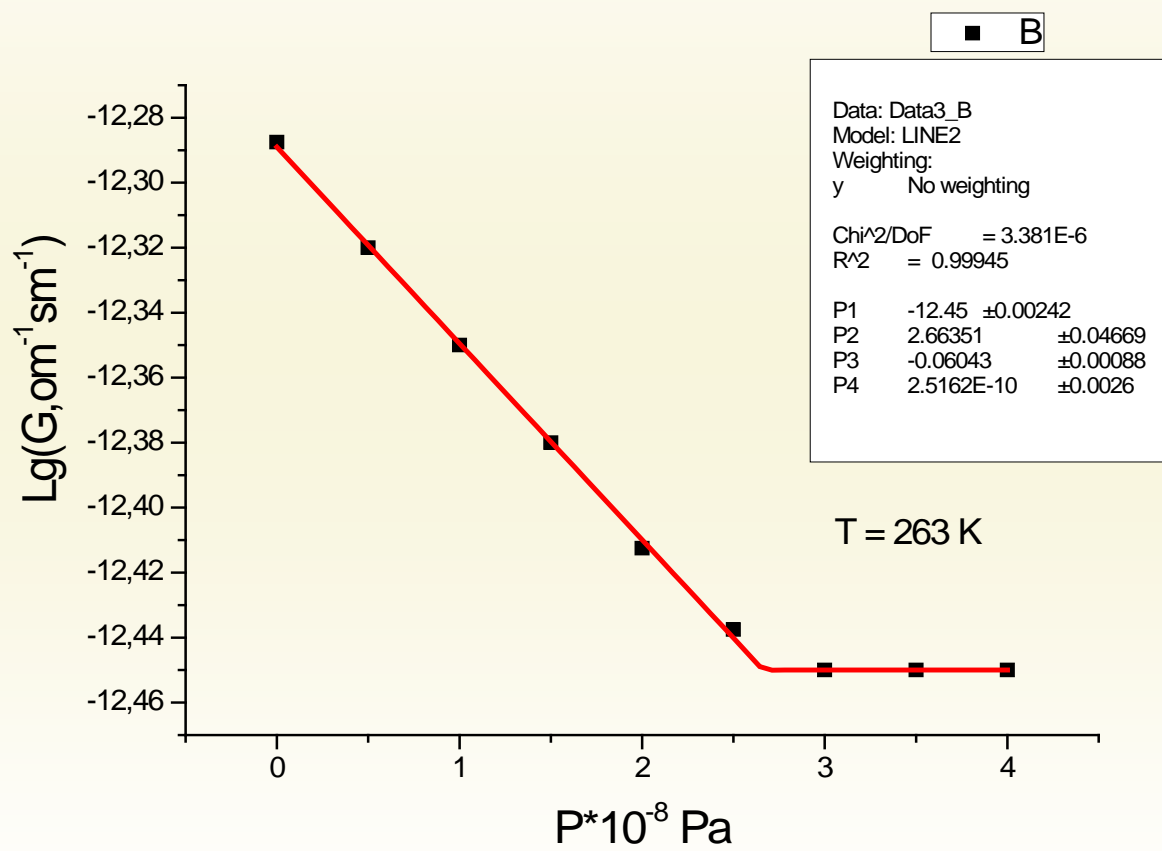
# Вольт-амперная зависимость протимости НК AgN3 при нормальном и повышенном давлении



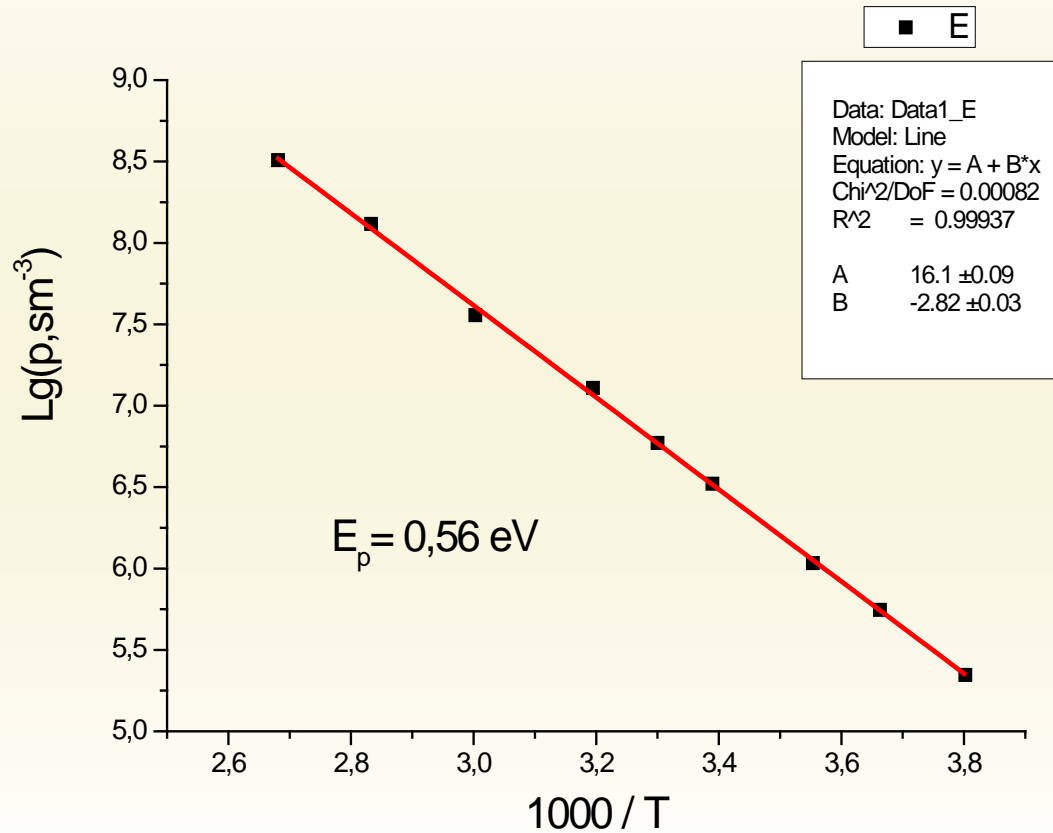
# Зависимость ионной проводимости $\text{AgN}_3$ от давления



# Зависимость проводимости AgN3 от давления



# Температурная зависимость электронной проводимости AgN3



# Оценка констант стадий ионного разупорядочения в азиде серебра

Константа скорости дрейфовой стадии:

$$k_{\text{др}} = \frac{4\pi e}{\varepsilon_{\text{ст}}} \mu_i(\text{CGSE}) = 1,91 \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$$

Константа скорости диффузионной стадии:

$$k_{\text{диф}} = \frac{akT}{e} \mu_i(\text{CGSE}) = 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$$

Время релаксации рекомбинации дефектов:

$$\tau_n = (k_{\text{др}} n_i)^{-1} = 6,32 \cdot 10^{-2} \text{ с}$$

# Константы скоростей стадий химических превращений

Таблица 4. Константы скоростей стадий

Константы скоростей стадий химических превращений	
Образование комплекса $N_6^+$ [25]	$k_{12}=1 \cdot 10^9$ [с <sup>-1</sup> ]
Распад комплекса $N_6$ [26]	$k_5=1 \cdot 10^7$ [с <sup>-1</sup> ]
Дезактивация возбужденной молекулы $N_2^*$ [25]	$k_{10}=1 \cdot 10^8$ [с <sup>-1</sup> ]

<sup>25</sup>Кригер В.Г., Каленский А. В., Булушева Л.Г. Квантово-химическое моделирование реакции  $2N_3 \rightarrow 3N_2$ //9 Межд. конф. по радиационной физике и химии неорганических материалов: Тез. Докл. — Томск, 1996. - С.224-225.

<sup>26</sup>В. Г. Кригер\*, А. В. Каленский, А. А. Звекон Релаксация электронновозбужденных продуктов твердофазной цепной реакции в кристаллической решетке //Хим. Физика, 2012, том 31, № 1, с. 18–22

# Критическое условие и критерий взрывного разложения АТМ

$$\frac{dp}{dt} = G + k_7 R^+ + k_3 p (z V_k^0 - R^0)$$

$G$  – Генерация e.h. пар внешним воздействием

$k_7 R^+$  – Термическое возбуждение дырки с ц.р.

$z k_3 p V_k^0$  – Стадия ветвления цепи

$k_3 p R^0$  – Стадия обрыва цепи

$z = k_{12} / (k_4 + k_{12})$  – Вероятность образования комплекса  $N_6^+$  при локализации двух дырок на катионной вакансии.

Поведение системы определяется выражением:  $\varphi = k_3 (zV_k^0 - R^0)$

При  $\varphi < 0$  ( $zV_k^0 < R^0$ ) концентрация дырок стремится к стационарному значению:

$$\tilde{p} = \frac{G + k_7 R^+}{k_3 (R^0 - zV_k^0)}$$

При  $\varphi > 0$  ( $zV_k^0 > R^0$ ) концентрация дырок неограниченно возрастает:

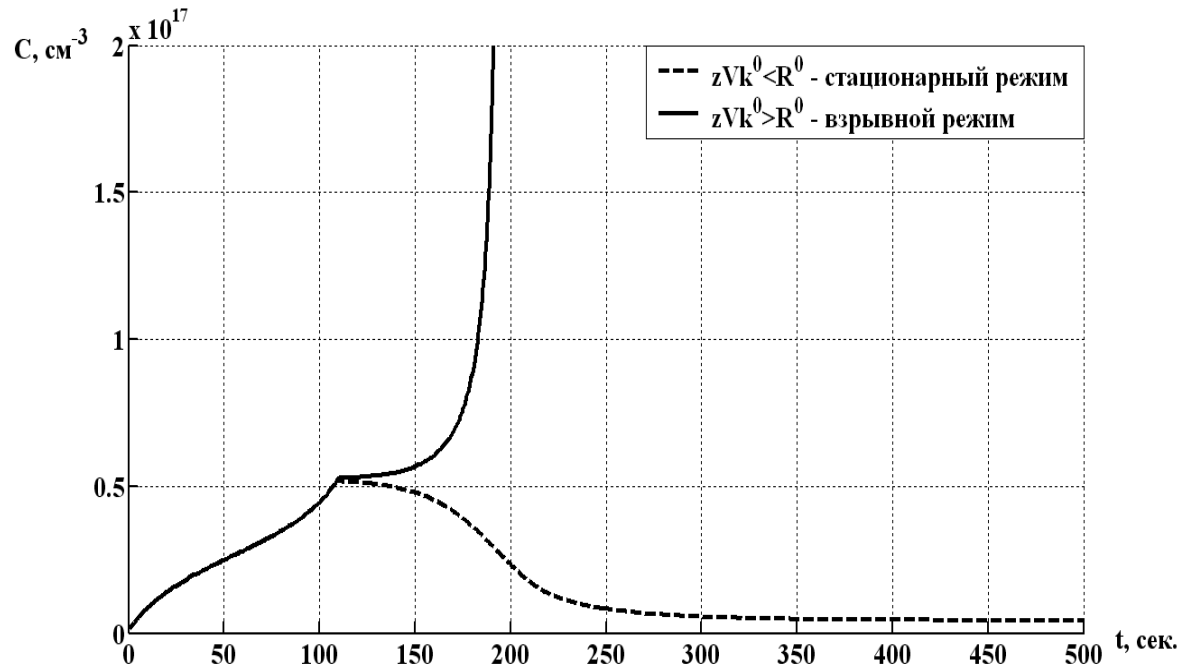
$$p \sim \exp(\varphi \cdot t)$$

Таким образом выражение  $\varphi = 0$  ( $zV_k^0 = R^0$ ) является критическим условием реализации цепного взрыва:

$$V_{k \text{ крит}}^0 = \frac{R^0}{z}$$



# Взрывной и стационарный режимы протекания реакции

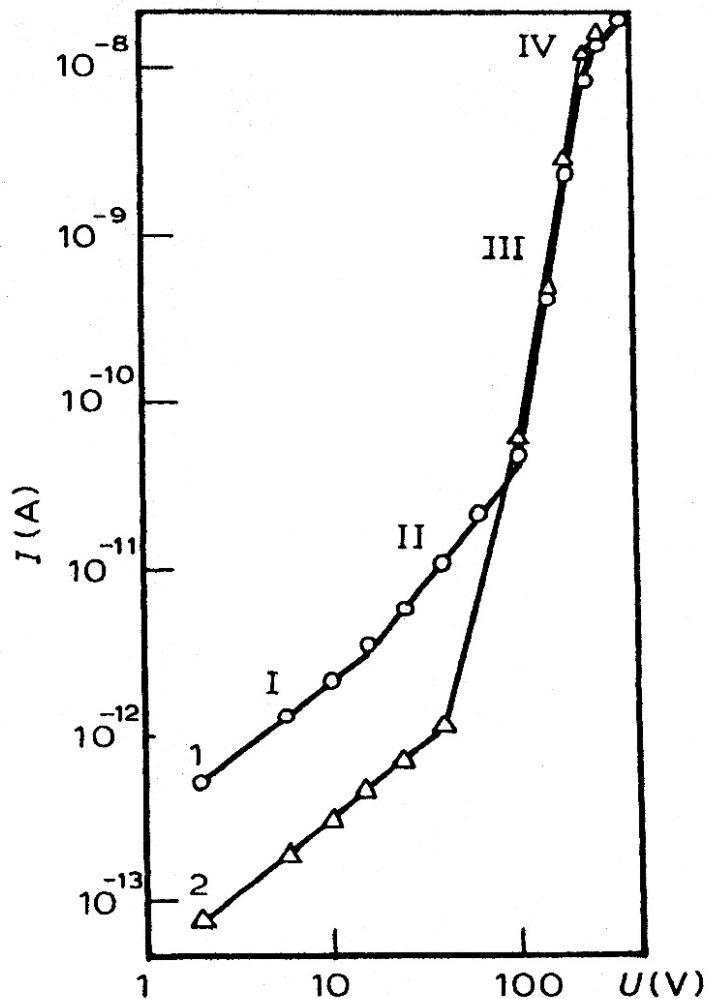


Концентрации  $V_k^0$  при  $G=10^{15}$ .  $t_{\text{обл}}=109$  с. --- и 110 с. —

Если во время воздействия критическая концентрация  $V_k^0$  не достигнута – система релаксирует до стационарного состояния (пунктирная линия).

При достижении  $V_k^0$  критического значения система переходит во взрывной режим.

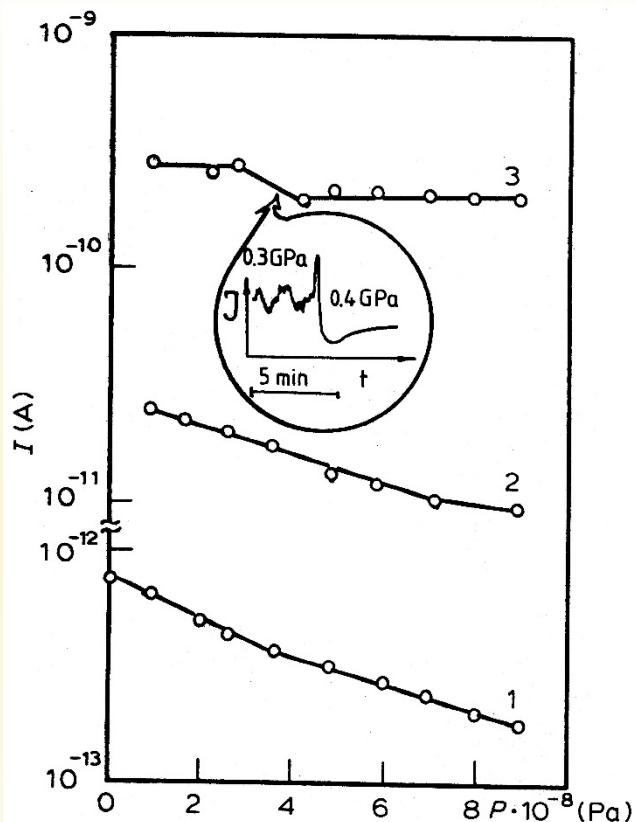
# Вольт-амперная характеристика



Вольт-амперные характеристики в азиде серебра при атмосферном давлении (1) при давлении  $8 \cdot 10^8$  Pa (2).

<sup>4</sup>По данным А.Е. Saprykin, G.M. Diamant and Yu.N. Sukhushin. // Reactivity of Solids, 7 (1989) 289-292.

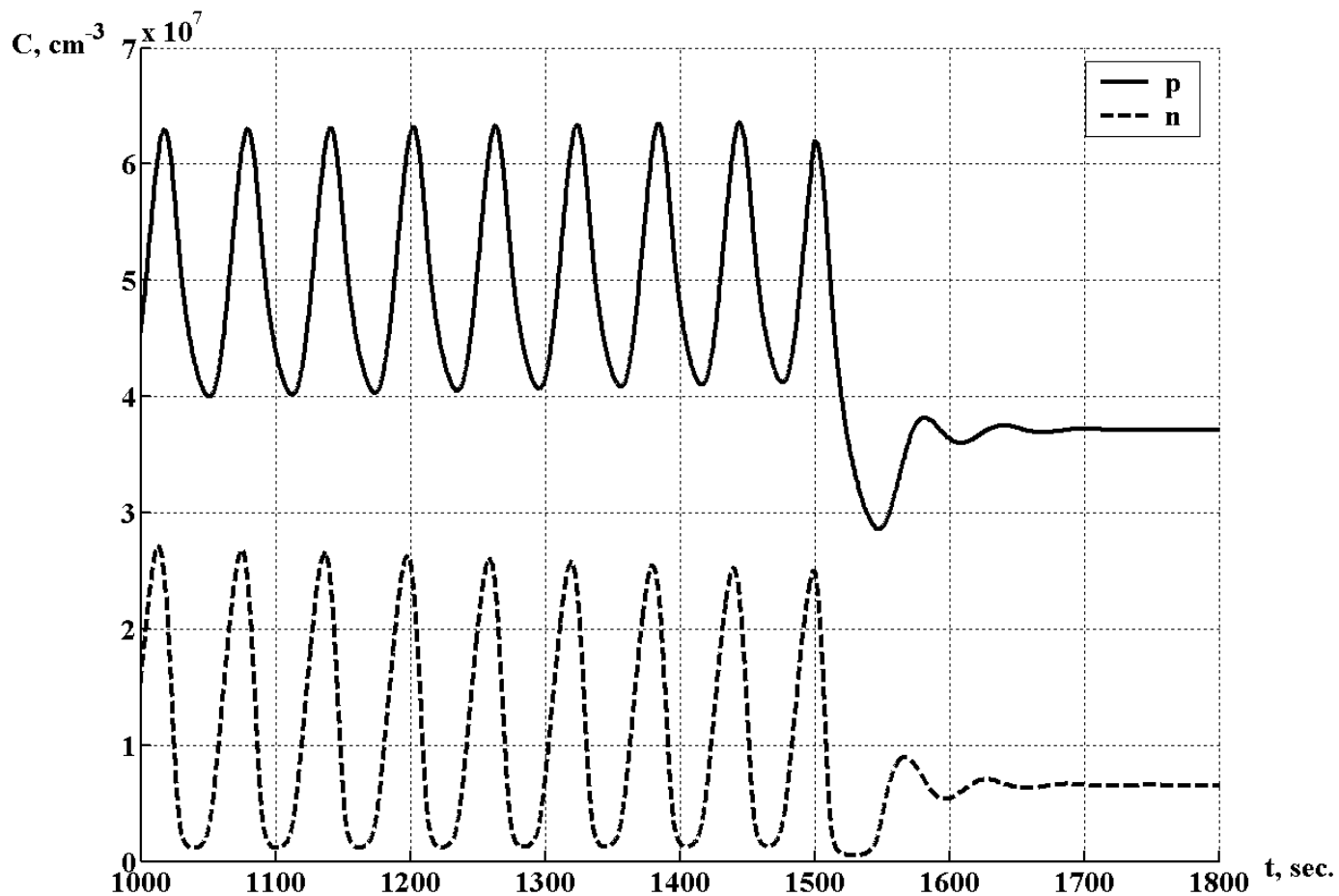
# Автоколебания дырочной проводимости



Из эксперимента видно, что при напряжении 190 В, при давлении 0,3 ГПа наблюдаются колебания тока, с периодом порядка 2-2,5 минут. При увеличении давления до 0,4 ГПа колебания отсутствуют, при понижении давления колебания восстанавливаются.

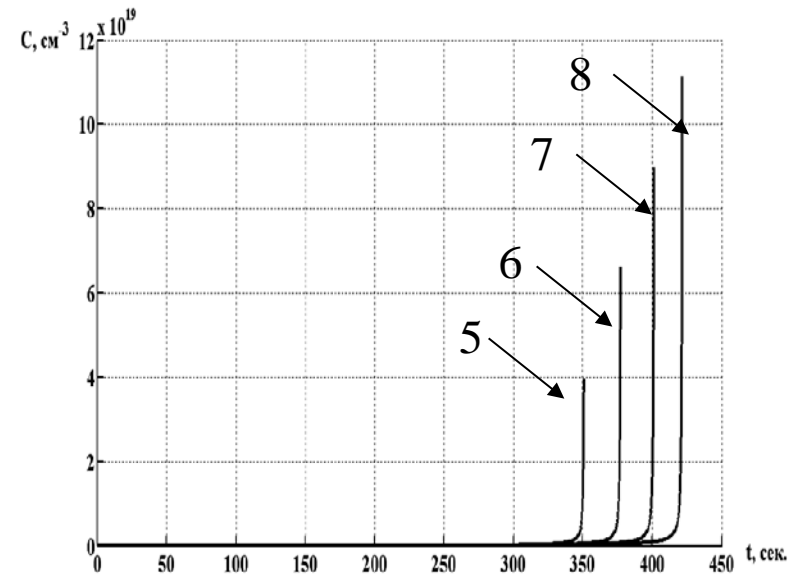
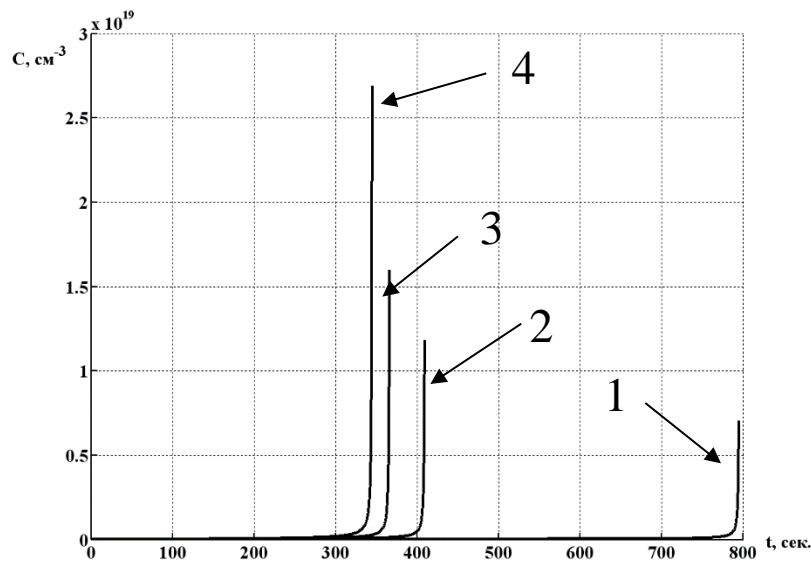
Зависимость тока в азиде серебра от гидростатического давления при различных напряжениях: 6 В (1), 100 В (2), 190 В (3). Отдельно показаны колебаний тока при  $P < 0,4 \text{ ГПа}$ .

<sup>4</sup>По данным А.Е. Saprykin, G.M. Diamant and Yu.N. Sukhushin. // Reactivity of Solids, 7 (1989) 289-292.



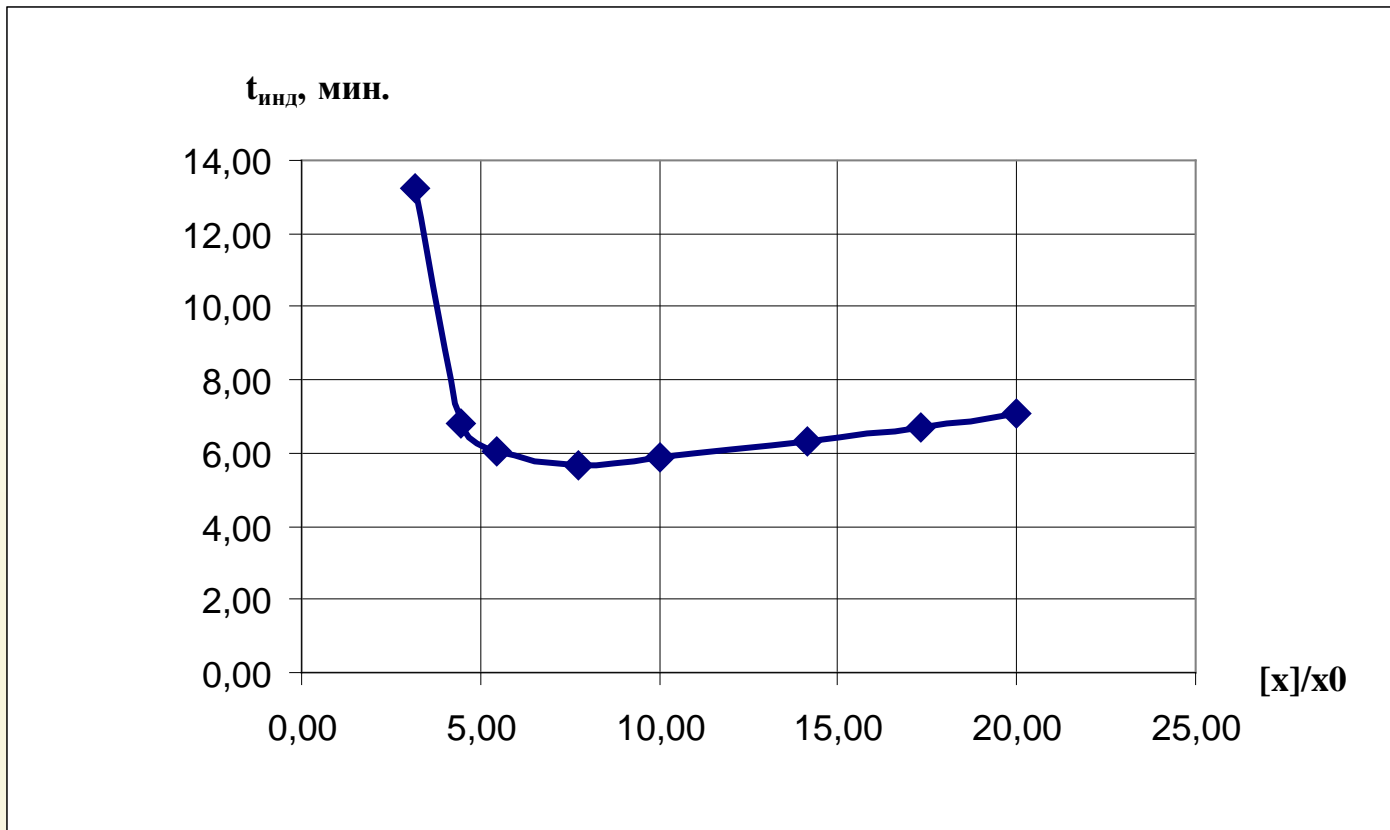
Колебания концентраций электронов и дырок при константе скорости  $k_{12}=50 \cdot 10^9$  и уровне дефектов  $E_R=0,9$  эВ. Время облучения 1500 сек.

Увеличение локальной концентрации дефектов [x] моделировалось увеличением константы Френкеля. Определялось время задержки взрыва при заданной концентрации дефектов



Концентрации  $V_k^0$  при  $G=0$ .  $x_0 = \sqrt{KF} = 8 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$

$[x]=1 - 3,16x_0;$	$2 - 4,47x_0;$	$3 - 5,48x_0;$	$4 - 7,75x_0.$
$5 - 10x_0;$	$6 - 14,14x_0;$	$7 - 17,3x_0;$	$8 - 20x_0.$



При  $[x] \approx x_0$  локальные концентрации дефектов близки к равновесной и время задержки взрыва стремится к бесконечности.

При небольших увеличениях локальной концентрации дефектов  $[x]$  время задержки взрыва резко падает.

Минимум индукционного периода наблюдается при  $[x] \sim 7 - 8x_0$

Минимальный индукционный период составил  $t \approx 6$  мин.

# Выводы

1. Проведен сравнительный анализ моделей цепных реакций в азиде серебра при внешних воздействиях различной природы.
2. Показано, что при высоких плотностях возбуждения (лазерное и электронное импульсное излучение) предпочтительной является модель с квадратичным взаимодействием цепей.
3. При воздействиях низкой интенсивности (нагревание, облучение электрическое поле) предпочтительной является собственно-дефектная модель, роль активных частиц, в которой, наряду с электронными возбуждениями играют собственные дефекты кристаллической решетки.
4. Для собственно дефектной модели:
  - а) Рассчитаны подвижности электронов и дырок в  $AgN_3$ , при  $m_p=3m_0$ ,  $m_n=0,5m_0$ ,  $T=300K$ :  $\mu_p=7-8 \text{ см}^2/V\cdot\text{с}$   $\mu_n=10-12 \text{ см}^2/V\cdot\text{с}$ .
  - б) Рассчитаны константы скоростей и сечения захватов электронов и дырок на локальных центрах. Оценены положения локальных уровней дефектов в запрещенной зоне  $AgN_3$ .
  - в) Рассчитаны температурные зависимости концентраций, подвижностей и проводимостей для моно- и нитевидных кристаллов азида серебра. Проведено сравнение рассчитанных значений проводимости с экспериментальными.

5. Для собственно-дефектной модели определены критические параметры перехода стационарного режима разложения во взрывной. Показано, что к взрывному режиму разложения приводят как увеличение концентрации электронных возбуждений, так и увеличение локальной концентрации дефектов во внешних полях.



***Спасибо за внимание.***