

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВОГО СЖАТИЯ МОНОКРИСТАЛЛА ГЕКСОГЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОГО РЕАКЦИОННОГО СИЛОВОГО ПОЛЯ ReaxFF-Ig

С. А. Козлова¹, С. А. Губин², Ю. А. Богданова³, И. В. Маклашова⁴, А. А. Селезнев⁵

Аннотация: Проведено молекулярно-динамическое моделирование характеристик изотермического сжатия монокристалла гексогена. Получены зависимости давления от степени сжатия монокристалла при постоянной температуре $T = 300$ К в диапазоне давлений $P = 0,05–40$ ГПа. Результаты моделирования показали, что модифицированное реакционное силовое поле ReaxFF-Ig позволяет с удовлетворительной точностью воспроизвести экспериментальные изотермы сжатия монокристалла гексогена. Методом Гюгониостата было проведено молекулярно-динамическое моделирование ударно-волнового (УВ) гидростатического сжатия монокристалла гексогена. В широком диапазоне давлений $P = 1–40$ ГПа были получены расчетные зависимости давления в ударной волне от степени сжатия монокристалла гексогена и зависимости температуры от давления УВ сжатия. Ударная адиабата монокристаллов гексогена, полученная в данной работе, хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Ключевые слова: молекулярная динамика; реакционное силовое поле ReaxFF-Ig; метод Гюгониостата; ударная адиабата

Литература

1. *Van Duin A.* Department of Mechanical & Nuclear Engineering. <http://www.engr.psu.edu/adri/Home.aspx>.
2. *Zhenga M., Li X., Guoa L.* Algorithms of GPU-enabled reactive force field (ReaxFF) molecular dynamics // *J. Mol. Graph. Model.*, 2013. Vol. 41. P. 1–11.
3. *Liu L., Liu Y., Zybin S. V., Sun H., Goddard W. A.* ReaxFF-Ig: Correction of the ReaxFF reactive force field for London dispersion, with applications to the equations of state for energetic materials // *J. Phys. Chem.*, 2011. Vol. 115. P. 11016–11022.
4. *Selezenov A. A., Aleynikov A. Y., Gantchuk N. S., Yermakov P. V., Labanovski J. K., Korkin A. A.* SageMD: Molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // *Comp. Mater. Sci.*, 2003. Vol. 28. P. 107–124.
5. *Орлова Е. Ю.* Химия и технология бризантных взрывчатых веществ / Под ред. Л. Б. Мясниковой. — Л.: Химия, 1973. С. 227–244.
6. *Olinger B., Roof B., Cady H.* Symposium (International) on High Dynamic Pressures Proceedings. — Paris: Commissariat a l'Energie Atomique, 1978. P. 3.
7. *Yoo C. S., Cynn H., Howard W. M., Holmes N.* Equations of state of unreacted high explosives at high pressures // 11th Detonation Symposium (International) Proceedings. — Snowmass Village, CO, USA, 1998. P. 951–957.
8. *Davidson A. J., Oswald I. D. H., Francis D. J., Lennie A. R., Marshall W. G., Millar D. I. A., Pulham C. R., Warren J. E., Cumming A. S.* Explosives under pressure — the crystal structure of c-RDX as determined by high-pressure X-ray and neutron diffraction // *Crystengcomm.*, 2008. Vol. 10. P. 162.
9. *Marsh S. P.* LASL shock Hugoniot data. — Los Angeles, CA, USA: University of California Press, 1980. 674 p.
10. *Munday L. B., Chung P. W., Rice B. M., Solares S. D.* Simulations of high-pressure phases in RDX // *J. Phys. Chem. B*, 2011. Vol. 115. P. 4378–4386.
11. *Bedrov D., Hooper J. B., Smith G. D., Sewell T. D.* Shock-induced transformations in crystalline RDX: A uniaxial constant-stress Hugoniotat molecular dynamics simulation study // *J. Chem. Phys.*, 2009. Vol. 131. P. 034712-10.

Поступила в редакцию 14.02.17

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», sandra969@yandex.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», gubin_sa@mail.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

⁵Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ) sel@soccc.ru