

ПОЛУЧЕНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК, ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ РЕТН МЕТОДАМИ РЕАКЦИОННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ТЕМОДИНАМИКИ*

С. А. Губин¹, С. А. Козлова², И. В. Маклашова³

Аннотация: Методом молекулярной динамики (МД) в программном пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) с использованием реакционного силового поля ReaxFF-Ig были рассчитаны изотермы нереагирующего вещества РЕТН в диапазоне давлений до 30 ГПа. Были получены значения коэффициента модуля всестороннего сжатия $K_0 = 9,6$ ГПа и производной модуля сжатия K_0 по давлению $K'_0 = 8,0$, которые можно использовать как параметры термического уравнения Берча–Мурнагана 3-го порядка. Были подобраны коэффициенты уравнения состояния (УрС) в форме Ми–Грюнаизена, часто используемого для моделирования теплофизических свойств вещества, в том числе при статическом и ударно-волновом сжатии. Для нахождения коэффициентов УрС применялся метод построения изохорно-изотермического потенциала твердых веществ в форме квазигармонического приближения Эйнштейна. Верификация полученных результатов показала хорошее согласие с экспериментальными данными в широком диапазоне изменения давления и температуры, в том числе вдоль ударной адиабаты.

Ключевые слова: молекулярная динамика; эволюция ансамбля частиц; молекулярные кристаллы; диссоциация; экстремальные воздействия; равновесное и неравновесное состояния; ударная адиабата; уравнение состояния

DOI: 10.30826/CE22150212

EDN: YGVWGB

Литература

1. The classical molecular dynamics package LAMMPS, 2004. <http://lammps.sandia.gov>.
2. Van Duin A. Department of Mechanical & Nuclear Engineering. <http://www.engr.psu.edu/adri/Home.aspx>.
3. Budzien J., Thompson A. P., and Zybin S. V. Reactive molecular dynamics simulations of shock through a single crystal of pentaerythritol tetranitrate // J. Phys. Chem. B, 2009. Vol. 113. No. 40. P. 13142–13151. doi: 10.1021/jp9016695.
4. Zybin S. V., Goddard W. I., Xu P., Duin A. V., et al. 2010. Physical mechanism of anisotropic sensitivity in pentaerythritol tetranitrate from compressive-shear reaction dynamics simulations // Appl. Phys. Lett., 2010. Vol. 96. No. 8. P. 081918. 3 p. doi: 10.1063/1.3323103.
5. Landerville A. C., Oleynik I. I., White C. T. Reactive molecular dynamics of hypervelocity collisions of PETN molecules // J. Phys. Chem., 2009. Vol. 113. P. 12094–12104. doi: 10.1021/jp905969y.
6. Shan T. R., Thompson A. P. Shock-induced hotspot formation and chemical reaction initiation in PETN containing a spherical void // J. Phys. Conf. Ser., 2014. Vol. 500. No. 17. P. 172009. doi: 10.1088/1742-6596/500/17/172009.
7. Liu L., Liu Y., Zybin S. V., Sun H., Goddard W. A. 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. No. 40. P. 11016–11022. doi: 10.1021/jp201599t.
8. Strachan A., van Duin A. C. T., Chakraborty D., Dasgupta S., Goddard W. A. Shock waves in high-energy materials: The initial chemical events in nitramine RDX // Phys. Rev., 2003. Vol. 91. P. 098301-1–098301-4. doi: 10.1103/PhysRevLett.91.098301.
9. 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. Vol. 62. No. 11. P. 4480–4483.
10. The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC). <https://www.ccdc.cam.ac.uk>.
11. Yoo C., Choong-Shik H., Howard W. M., Holmes N. Equations of state of unreacted high explosives at high pres-

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект государственного задания № 07232020-0036).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», gubin_sa@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», sandra969@yandex.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

- sures // 11th Detonation Symposium (International) Proceedings. — Aspen, CO, USA, 1998. P. 951–957.
12. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. — М.: Наука, 1968. 312 с.
 13. Молодец А. М., Молодец М. А., Набатов С. С. Термодинамические потенциалы углерода // Физика горения и взрыва, 2000. Т. 36. № 2. С. 88–93.
 14. Burcat A., Ruscic B. Third millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables. — Argonne National Laboratory by The University of Chicago, 2005.
 15. Fan J., Yan F., Zhaoyang Z., Zhao J. Thermal properties of energetic materials from quasi-harmonic first-principles calculations // J. Phys. — Condens. Mat., 2021. Vol. 33. No. 27. P. 275702. doi: 10.1088/1361-648X/abfc11.
 16. Gonzalez J. M., Landerville A. C., Oleynik I. I. Vibrational and thermophysical properties of PETN from first principles // AIP Conf. Proc., 2017. Vol. 1793. P. 070009. doi: 10.1063/1.4971597.
 17. Dobratz B. M. Properties of chemical explosives and explosives stimulants. — Livermore, CA, USA: LLNL, 1976.
 18. Marsh S. P. LASL shock Hugoniot data. — Los Angeles, CA, USA: University of California Press, 1980. 674 p.

Поступила в редакцию 21.02.2022