

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ С РАЗНЫМИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫМИ МАСШТАБАМИ ФАЗ СЖАТИЯ*

С. А. Губин¹, И. В. Маклашова², Ю. А. Богданова³

Аннотация: На основе анализа многочисленных публикаций в научной литературе проведено сравнение экспериментальных и рассчитанных методом молекулярной динамики значений критических параметров ударных волн (УВ) для начала химического разложения жидких органических веществ с различными пространственными и временными масштабами фаз сжатия: миллиметры и микросекунды — обычные УВ; нанометры и пико- и наносекунды — ультракороткие УВ, создаваемые плазменными разрядами лазеров. Показано согласие результатов молекулярно-динамического (МД) моделирования с измеренными значениями критических параметров ультракоротких УВ, генерируемых разрядами лазеров. При этом экспериментальные значения критических параметров обычных УВ, создаваемых традиционными методами взрыва или взрывного метания, оказываются ниже предсказанных МД моделированием. Предложены объяснения для полученных в экспериментах и расчетах различающихся значений критических параметров УВ с разными временными и пространственными масштабами.

Ключевые слова: молекулярная динамика; ударные волны; фазы сжатия; химическое разложение; пространственные и временные масштабы; миллиметры и микросекунды; пико- и наносекунды; взрывное метание; плазменные разряды лазеров

DOI: 10.30826/CE23160412

EDN: XGTEOG

Литература

1. Alder B. J., Wainwright T. E. Studies in molecular dynamics. I. General method // J. Chem. Phys., 1959. Vol. 31. No. 2. P. 459–466. doi: 10.1063/1.1730376.
2. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям / Пер. с англ. — М.: Научный мир, 2013. 559 с. (Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: From algorithms to applications. — 2nd ed. — Academic Press, 2001. 664 p.)
3. Van Duin A. C. T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A., III. ReaxFF: A reactive force field for hydrocarbons // J. Phys. Chem., 2001. Vol. 105. No. 41. P. 9396–9409. doi: 10.1021/jp004368u.
4. Strachan A., van Duin A., Chahroborty D., et al. Shock waves in high energy materials: The initial chemical events in nitramin RDX // Phys. Rev. Lett., 2003. Vol. 91. No. 9. 098301-4. doi: 10.1103/PhysRevLett91.098301.
5. Cawkwell M. J., Niklasson M. N., Dattelbaum D. M. Extended Lagrangian Born–Oppenheimer molecular dynamics simulations of the shock-induced chemistry of phenylacetylene // J. Chem. Phys., 2015. Vol. 142. Article No. 064512. doi: 10.1063/1.4907909.
6. Dlott D. D., Hambir S., Franken J. The new wave in shock waves // J. Phys. Chem. B, 1998. Vol. 102. No. 12. P. 2121–2130. doi: 10.1021/jp973404v.
7. Dlott D. D. New developments in the physical chemistry of shock compression // Annu. Rev. Phys. Chem., 2011. Vol. 62. P. 575–597. doi: 10.1146/annurev-physchem.012809.103514.
8. Воскобойников И. М., Афанасенков А. Н., Богомолов В. М. Обобщенная ударная адиабата органических жидкостей // Физика горения и взрыва, 1967. № 4. С. 585–593.
9. Woolfolk R. W., Cowperthwaite M., Shaw R. A “universal” Hugoniot for liquids // Thermochim. Acta, 1973. Vol. 5. No. 4. P. 409–414. doi: 10.1016/0040-6031(73)80019.
10. Paisley D. L., Swift D. C., Johnson R. P., Kopp R. A., Kyrala G. A. Laser-launched flyer plates and direct laser shocks for dynamic material property measurements // AIP Conf. Proc., 2002. Vol. 620. P. 1343–1346. doi: 10.1063/1.1483787.

* Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект государственного задания FSWU-2023-0031).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова, gubin_sa@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; ivmaklashova@mephi.ru

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

11. *Armstrong M. R., Zaug J. M., Goldman N., Kuo I.-F. W., Crowhurst J. C., Howard W. M., Carter J. A., Kashgarian M., Chesser J. M., Barbee T. W., Bastea S.* Ultrafast shock initiation of exothermic chemistry in hydrogen peroxide // *J. Phys. Chem.*, 2013. Vol. 117. No. 49. P. 13051–13058. doi: 10.1021/jp407595u.
12. *Dick R. D.* Shock wave compression of benzene, carbon disulfide, carbon tetrachloride, and liquid nitrogen // *J. Chem. Phys.*, 1970. Vol. 52. No. 12. P. 6021–6032. doi: 10.1063/1.1672902.
13. *Van Thiel M., Shaner J., Salinas E.* Compendium of shock wave data. Livermore: Lawrence Livermore Laboratory, 1977. Report UCRL-50108. 499 p.
14. *Marsh S. P.* LASL shock Hugoniot data. — Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1980. 658 p.
15. *Moore D. S., Schmidt S. C.* Time-resolved coherent anti-Stokes Raman spectroscopy and the measurement of vibrational spectra in shock-compressed molecular materials // *Proc. SPIE*, 1990. Vol. 1318. P. 61–67. doi: 10.1117/12.22091.
16. *Diott D. D.* Ultrafast spectroscopy of shock waves in molecular materials // *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 1999. Vol. 50. P. 251–278. doi: 10.1146/annurev.physchem.50.1.251.
17. *Bolme C. A., McGrane S. D., Moore D. S., Funk D. J.* Single shot measurements of laser driven shock waves using ultrafast dynamic ellipsometry // *J. Appl. Phys.*, 2007. Vol. 102. No. 3. P. 03351. doi: 10.1063/1.2767376.
18. *Brown K. E., McGrane S. D., Bolme C. A., Moore D. S.* Ultrafast chemical reactions in shocked nitromethane probed with dynamic ellipsometry and transient absorption spectroscopy // *J. Phys. Chem. A*, 2014. Vol. 118. No. 14. P. 2559–2567. doi: 10.1021/jp4125793.
19. *Gahagan K. T., Moore D. S., Funk D. J., Reho J. H., Rabie R. L.* Ultrafast interferometric microscopy for laser-driven shock wave characterization // *J. Appl. Phys.*, 2002. Vol. 92. P. 3679–3682. doi: 10.1063/1.1505976.
20. *Dang N. C., Bolme C. A., Moore D. S., McGrane S. D.* Shock induced chemistry in liquids studied with ultrafast dynamic ellipsometry and visible transient absorption spectroscopy // *J. Phys. Chem. A*, 2012. Vol. 116. No. 42. P. 10301–10309. doi: 10.1021/jp307464w.
21. *Brown K. E., Bolme C. A., McGrane S. D., Moore D. S.* Ultrafast shock-induced chemistry in carbon disulfide probed with dynamic ellipsometry and transient absorption spectroscopy // *J. Appl. Phys.*, 2015. Vol. 117. No. 8. P. 085903. doi: 10.1063/1.4913488.
22. *Lysne P. C., Hardesty D. R.* Fundamental equation of state of liquid nitromethane to 100 kbar // *J. Chem. Phys.*, 1973. Vol. 59. No. 12. P. 6512–6523. doi: 10.1063/1.1680031.
23. *Якушев В. В., Набатов С. С., Якушева О. Б.* Физические свойства и превращение акрилонитрила при высоких динамических давлениях // *Физика горения и взрыва*, 1974. Т. 10. № 4. С. 583–594.
24. *Hardesty D. R.* An investigation of the shock initiation of liquid nitromethane // *Combust. Flame*, 1976. Vol. 27. P. 229–251. doi: 10.1016/0010-2180(76)90026-2.
25. *Dattelbaum D. M., Sheffield S. A., Coe J. D., Margevicius M. A.* Shock-induced chemistry of phenylacetylene // *J. Phys. Conf. Ser.*, 2014. Vol. 500. P. 022004. doi: 10.1088/1742-6596/500/2/022004.
26. *Dattelbaum D. M., Stephen A. Sheffield S. A., Coe J. D.* Shock-driven chemistry and reactive wave dynamics in liquid benzene // *AIP Conf. Proc.*, 2017. Vol. 1793. No. 1. P. 040020. doi: 10.1063/1.4971514.
27. *Martínez E., Perriot R., Kober E. M.* Parallel replica dynamics simulations of reactions in shock compressed liquid benzene // *J. Chem. Phys.*, 2019. Vol. 150. No. 24. P. 244108. doi: 10.1063/1.5092209.
28. *Nellis W. I., Ree F. H., Trainor R. J., Mitchell A. C., Boslough M. B.* Equation of state and optical luminosity of benzene, polybutene, and polyethylene shocked to 210 GPa (2.1 Mbar) // *J. Chem. Phys.*, 1984. Vol. 80. No. 6. P. 2789–2799. doi: 10.1063/1.447027.
29. *Трунин Р. Ф., Жерноклетов М. В., Кузнецов Н. Ф., Сутулов Ю. Н.* Динамическая сжимаемость насыщенных и ароматических углеводородов // *Хим. физика*, 1989. Т. 8. № 4. С. 539–545.
30. *Maillet J.-B., Pineau N.* Thermodynamic properties of benzene under shock conditions // *J. Chem. Phys.*, 2008. Vol. 128. No. 22. P. 224502. doi: 10.1063/1.2917335.
31. *Rom N., Zybin S. V., van Duin A. C. T., Goddard W. A., Zeiri Y., Katz G., Kosloff R.* Density-dependent liquid nitromethane decomposition: Molecular dynamics simulations based on ReaxFF // *J. Phys. Chem. A*, 2011. Vol. 115. No. 36. P. 10181. doi: 10.1021/jp202059v.
32. *Mahbulul I., Strachan A.* Decomposition and reaction of polyvinyl nitrate under shock and thermal loading: A REAXFF reactive molecular dynamics study // *J. Phys. Chem. C*, 2017. Vol. 121. No. 40. P. 22452–22464. doi: 10.1021/acs.jpcc.7b06154.
33. *Moore D. S., McGrane S. D., Funk D. J.* Ultrafast spectroscopic investigation of shock compressed energetic polymer films // *AIP Conf. Proc.*, 2004. Vol. 706. No. 1. P. 1285–1288. doi: 10.1063/1.1780473.
34. *Moore D. S., McGrane S. D., Funk D. J.* Ultrashort laser shock dynamics // *Shock wave science and technology reference library* / Ed. Y. Horie. — Berlin—Heidelberg: Springer, 2007. Vol. 2. P. 47–104. doi: 10.1007/978-3-540-68408-4_2.
35. *Селезнев А. А., Алейников А. Ю., Бригинас И. В.* Молекулярно-динамическое моделирование разрушения молекул взрывчатых веществ при высокоскоростных столкновениях // *Хим. физика*, 2008. Т. 27. № 3. С. 5–15. EDN: IJKENZ.

Поступила в редакцию 25.09.2023