

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ\*

А. В. Кудинов<sup>1</sup>, Ю. А. Богданова<sup>2</sup>, С. А. Губин<sup>3</sup>

**Аннотация:** Выполнено молекулярно-динамическое (МД) моделирование термического разложения органического вещества на примере молекулы, содержащей триазиновое кольцо, в условиях постоянного объема при мгновенном подъеме температуры до 4000 К. Исследованы возможные механизмы разложения, описанные в литературе, выполнено сравнение результатов расчетов с доступными данными по росту и убыли количества молекул из экспериментальных и теоретических исследований. Проведено исследование состава продуктов разложения для определения кинетического механизма быстропротекающих реакций по существующим моделям разложения, представлено относительное содержание молекул, составляющих основную долю в системе, после выхода на равновесие основных продуктов разложения исследуемого органического вещества.

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование; термическое разложение; кинетический механизм; органические вещества

**DOI:** 10.30826/CE19120216

### Литература

1. Allen M. P., Tildesley D. J. Computer simulation of liquids. — Oxford: Clarendon Press, 1989. 385 p.
2. Filinov V., Bonitz M., Fortov V., Levashov P. Quantum generalization of molecular dynamics method. Wigner approach // Computational science and its applications / Eds. A. Laganà, M. L. Gavrilova, V. Kumar, et al. — Lecture notes in computer science ser. — Springer, 2004. Vol. 3044. P. 402–411. doi: 10.1007/978-3-540-24709-8\_43.
3. Melker A. I. Potentials of interatomic interaction in molecular dynamics // Rev. Adv. Mater. Sci., 2009. Vol. 20. P. 1–13.
4. Sandia National Labs. [http://lammps.sandia.gov/doc/Section\\_intro.html](http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html).
5. Mueller J. E., van Duin A. C. T., Goddard III W. A. ReaxFF potential functions. Supporting information for the manuscript Development and Validation of ReaxFF Reactive Force Field for Hydrocarbon Chemistry Catalyzed by Nickel // J. Phys. Chem. C, 2010. Vol. 114. P. 4939–4949. doi: 10.1021/jp9035056.
6. Liu L., Liu Y., Zybin S. V., Sun H., Goddard III 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. A, 2011. Vol. 115. P. 11016–11022. doi: 10.1021/jp201599t.
7. Hanwell M. D., Curtis D. E., Lonie D. C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G. R. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform // J. Cheminformatics, 2012. Vol. 4. P. 17. doi: 10.1186/1758-2946-4-17.
8. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sc., 2009. Vol. 18. No. 1. P. 015012. doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
9. Selezenev 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. No. 28. P. 107–124. doi: 10.1016/S0927-0256(03)00101-0.
10. Melius C., Binkley J. Thermochemistry of the decomposition of nitramines in the gas phase // 21st Symposium (International) on Combustion Proceedings. — Germany, 1986. P. 1953–1963. doi: 10.1016/S0082-0784(88)80432-6.
11. Zhao X., Hints E. J., Lee Y. T. Infrared multiphoton dissociation of RDX in a molecular beam // J. Chem. Phys., 1988. Vol. 2. No. 15. P. 801–810. doi: 10.1063/1.454158.
12. Botcher T. R., Wight C. A. Explosive thermal decomposition mechanism of RDX // J. Phys. Chem., 1994. Vol. 98. No. 21. P. 5441–5444. doi: 10.1021/j100072a009.
13. Kuo Kenneth Kuan-yun, Acharya Ragini. Applications of turbulent and multi-phase combustion. — New York, NY, USA: Wiley, 2012. 448 p. doi: 10.1002/9781118127575.

Поступила в редакцию 18.01.19

\*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-19-00188).

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», swen379@gmail.com

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», gubin\_sa@mail.ru