

فرآیندهای نوین در مهندسی مواد

ma.iaumajlesi.ac.ir

تأثیر نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر خواص ترکیب RDX: شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی

مقاله پژوهشی

اسماعیل ایومن^{۱*}، سید احد هاشمی^{۲*}

۱- پژوهشگر، دانشکده نانوفناوری، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران.

۲- کارشناسی ارشد، مجتمع شیمی و مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، تهران، ایران.

* esmaeilayoman@alum.semnan.ac.ir

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت: ۱۴۰۳/۰۷/۱۱	کامپوزیت‌های بین‌مولکولی فراپایدار مخلوطی از اکسید فلزی و فلز با اندازه نانو هستند که در شرایط عادی پایدار هستند. هدف اصلی در این تحقیق، بررسی اثرات نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ برای اولین بار بر خواص ترکیب هگزژون (RDX) است؛ بنابراین، در این پژوهش اثرات نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر خواص ترکیب RDX، شامل انرژی فعال‌سازی، فشار انفجار، سرعت انفجار و دمای انفجار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطالعه شده است. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ عملکرد کاتالیزوری بالایی بر ترکیب RDX دارد، به‌طوری‌که انرژی فعال‌سازی، فشار انفجار و سرعت انفجار نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ به ترتیب حدود ۴۳/۹۸٪، ۲۰/۴۶٪ و ۱۷/۹۲٪ کمتر از RDX خالص هستند. به‌طور خلاصه، پارامترهای انرژی فعال‌سازی، فشار انفجار، دمای انفجار و سرعت انفجار به‌دست آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای ترکیب RDX خالص از مقادیر ۱۰۰/۷۶ kJ/mol، ۲۸/۹۴ GPa، ۲۷۲۳/۶۲ K و ۷۵۶۰/۱۶ m/s به ترتیب برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به مقادیر ۶۵/۵۰ kJ/mol، ۲۷/۱۴ GPa، ۷۳۸۹/۷۴ m/s و ۳۱۳۸/۵۱ K تغییر می‌کنند.
پذیرش: ۱۴۰۳/۱۱/۱۹	
کلیدواژگان:	
نانوترمیت	
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	
انرژی فعال‌سازی	
چپمن-ژوگت.	

Influence of $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ Nanothermite on the RDX Properties: Molecular Dynamics Simulations

Esmaeil Ayoman^{1*}, Seyed Ahad Hashemi²

1. Researcher, Department of Nanotechnology, Faculty of New Sciences and Technologies, Semnan University, Semnan, Iran

2. M.Sc, Malek Ashtar University of Technology, Faculty of Chemistry & Chemical Engineering, Tehran, Iran.

* esmaeilayoman@alum.semnan.ac.ir

Article Information

Original Research Paper

Doi:

Keywords:

Nanothermite

Molecular Dynamics Simulation

Activation Energy

Chapman-Jouguet.

Abstract

Metastable intermolecular composites are mixtures of nanosized metal oxide/metal that are stable under normal conditions. The main goal of this work is investigated $\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanothermite effects on the properties of RDX, for the first time. Thus, the effects of the $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanothermite on the RDX properties, such as activation energy, detonation pressure, detonation velocity, and detonation temperature were studied in terms of the molecular dynamic simulations, in this work. The results of the molecular dynamic simulation show that the $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanothermite has high catalytic performance on the RDX, while the activation energy, detonation pressure, and detonation velocity of the $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ nanocomposite was 43.98, 20.46, and 17.92% lower than that of the pure RDX, respectively. Generally, The activation energy, detonation pressure, detonation velocity, and detonation temperature parameters obtained from the molecular dynamic simulation for the pure RDX changed from 100.76 kJ/mol, 28.94 GPa, 7560.16 m/s, and 2723.62 K to 56.78 kJ/mol, 23.05 GPa, 3217.52, and 6411.26 m/s for the $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanocomposite, respectively.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:

Esmaeil Ayoman, Seyed Ahad Hashemi, Influence of $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ Nanothermite on the RDX Properties: Molecular Dynamics Simulations, New Process in Material Engineering, 2025, 19(3), 13-24.

۱- مقدمه

سوپر نانوترمیت یک سیستم واکنش‌پذیر از مواد پرنرژ می‌باشد. بر فلز در مقیاس نانو است که با عملیات ترکیبی پودر آلومینیوم و نانو اکسید فلزی (نظیر NiO ، Fe_2O_3 ، Co_3O_4 ، CuO) به دست می‌آید [۱-۴]. این سیستم‌ها به‌عنوان کامپوزیت‌های بین مولکولی فرایدار (MIC) نیز شناخته می‌شوند [۵]. نانوترمیت‌ها می‌توانند محترق یا منفجر شوند و مقدار زیادی گرما را به سرعت از طریق واکنش اکسایش-کاهش آزاد کنند [۶-۷]. واکنش‌های ترکیبی یک فرآیند پیچیده همراه با مقدار زیادی آزاد شدن گرما و سرعت انتشار سریع موج احتراق است [۸-۹]. علاوه بر این، نانوترمیت عملکرد کاتالیزوری خوبی طی فرایند احتراق دارد؛ بنابراین، توسعه نانوترمیت‌های جدید و بهبود واکنش‌پذیری و آزادسازی انرژی آن‌ها مهم است.

واکنش‌پذیری نانوترمیت را می‌توان با انتخاب اجزای مختلف در مقیاس نانو تنظیم کرد [۱۰-۱۱]. در مقایسه با اکسیدهای تک‌فلزی، نانو اکسیدهای فلزی کامپوزیتی نظیر CuCo_2O_4 ، MFe_2O_4 و MCo_2O_4 دارای اجزای مختلفی هستند که در مقیاس نانو ترکیب شده‌اند و می‌توانند اثر هم‌افزایی داشته باشند [۱۲-۱۴]. علاوه بر این، بسیاری از اجزای نانو کاتالیست کامپوزیت چند جزئی با یکدیگر دوپ شده‌اند. این امر به‌راحتی شبکه کریستالی را منحرف می‌کند و به نقص بیشتر در نانو دانه‌ها منجر می‌شود و در نتیجه مراکز فعال را به میزان قابل توجهی افزایش می‌دهد [۱۵]؛ بنابراین، انتظار می‌رود که سیستم نانوترمیت مبتنی بر فلز Al با نانو اکسید فلزی کامپوزیتی به‌عنوان یک اکسیدکننده، واکنش‌پذیری بالاتر، احتراق و عملکرد کاتالیزوری بهتری را نسبت به سیستم تک اکسید فلزی داشته باشد. همچنین، ترکیباتی نظیر CuCo_2O_4 ، MgCo_2O_4 ، ZnCo_2O_4 و NiCo_2O_4 دارای خلوص بالا، مورفولوژی منظم و هزینه کم هستند، بنابراین توجه گسترده‌ای را به خود جلب کردند. علاوه بر این، گزارش‌های اخیر عملکرد کاتالیزوری عالی نانو اکسیدهای فلزی کامپوزیتی را

بر روی مواد پرنرژ نشان دادند [۱۶-۱۷]. نانوترمیت‌های $\text{Al}/\text{Bi}_2\text{WO}_6$ [۱۸] و $\text{Al}/\text{NiCo}_2\text{O}_4$ [۱۹] نیز مورد مطالعه قرار گرفته‌اند و دارای ویژگی‌های آزادسازی انرژی، عملکرد احتراقی عالی در مقایسه با ترمیت حاوی اکسید تک فلزی هستند.

تأثیر اکسید فلزی کامپوزیتی سه فلزی $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ مبتنی بر فلز Al به‌عنوان یک نانوترمیت بر خواص ترکیب هگزژون (RDX) بررسی نشده است؛ بنابراین، در مورد تأثیر این نانوترمیت بر عملکرد ترکیب RDX هیچ درک روشنی وجود ندارد. انتظار می‌رود که با توجه به ماهیت و خواص ویژه نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و تماس اجزای آن با ترکیب RDX، تفاوت قابل ملاحظه‌ای در خواص و عملکرد ترکیب RDX خالص و نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ وجود داشته باشد.

از نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ می‌توان در آغازش مواد پرنرژ قوی و همچنین نازل‌ها استفاده نمود، زیرا گرمای و دمای بالا و همچنین فشار و سرعت انفجار پایینی را ایجاد می‌کند؛ بنابراین، در این پژوهش برای اولین بار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی واکنشی (ReaxFF-MD^1) توسط نرم‌افزار لمپس^۲ تأثیر نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر پارامترهای انرژی فعال‌سازی (E_a^3) و حالت چپن-ژوگت (CJ^4) ترکیب RDX بررسی شده است. نتایج نشان دادند که در مقایسه با ترکیب RDX خالص، پارامتر E_a ترکیب RDX به دلیل فعالیت کاتالیزوری نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ کاهش می‌یابد. علاوه بر این، فشار انفجار (P_{CJ}^5) و سرعت انفجار (D_{CJ}^6) نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ به دلیل تشکیل محصولات گازی کمتر، کاهش می‌یابند و در مقابل دمای انفجار (T_{CJ}^7) به دلیل وجود نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ افزایش پیدا می‌کند.

۲- روش تحقیق

۲-۱- جزئیات روش شبیه‌سازی MD

ساختار مدل‌های اولیه، یعنی ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ با روش MD در نرم‌افزار لمپس شبیه‌سازی شدند [۲۰-۲۱]، همان‌طور که در مرجع [۲۲] شرح داده شده است، به‌طوری‌که در شبیه‌سازی‌های MD، ابتدا ساختارهای ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ برای پایدارسازی ساختارها بهینه‌سازی شدند. سطح انرژی پتانسیل ساختارهای مدنظر با فرایند کمینه‌سازی انرژی با استفاده از الگوریتم افت مداوم (CG^α) به حداقل مقدار ممکن رسید که در آن مقادیر حداقل تحمل انرژی و تلرانس هم‌گرایی نیرو به ترتیب $0.0001 \text{ kcal/mol}/\text{\AA}$ و 0.0001 بودند [۲۰]. این روش به بهینه‌سازی هندسه نمونه‌های مبتنی بر اتم منجر می‌گردد. سپس هنگرد ایزوله یا میکروکنونیکال (NVE، شرایط انرژی، حجم و تعداد ذرات ثابت) برای کاهش تنش بین‌اتمی بر ساختارها انجام شد. برای انجام آن، تغییر جابه‌جایی تدریجی هر اتم به مقدار $10^{-10} \times 1 \text{ nm}$ در هر مرحله زمانی برای ایجاد ثبات فیزیکی محدود شده بود. پس از آن، شبیه‌سازی MD به مدت 10 ns با هنگرد کنونیکال (NVT، شرایط دما، حجم و تعداد ذرات ثابت) ادامه یافت. در این مرحله دمای اولیه نمونه‌ها در مقدار 7 K تنظیم شد؛ بنابراین از هنگرد هم‌دما-هم فشار (NPT، شرایط دما، فشار و تعداد ذرات ثابت) برای متعادل کردن ساختارها در دمای 7 K و فشار 1 atm به مدت 5 ns استفاده شد. متعاقباً، هنگرد NPT پس از هم‌گرایی دما به مقدار هدف در سیستم‌های اتمی مدل‌سازی شده، به هنگرد NVT تبدیل شد. در این مرحله دمای نمونه‌ها به 300 K افزایش یافت و در نهایت، در این وضعیت، با شبیه‌سازی MD انجام‌شده به مدت 5 ns فاز تعادلی سیستم‌ها حاصل شد؛ بنابراین، کل زمان انجام فرایند متعادل کردن سیستم‌ها 20 ns بود و گام زمانی 0.001 fs انتخاب شده بود. این مقدار گام زمانی برای دستیابی به دقت محاسباتی بالا، در این پژوهش انتخاب شده بود.

میدان نیروی‌های UFF و ReaxFF برای تعریف بر همکنش‌های اتمی در نمونه‌های طراحی شده استفاده شدند. پارامترهای ثابت میدان‌های نیرو مانند فاصله، انرژی و غیره در مراجع [۲۳-۲۴] ارائه شده‌اند. مقدار شعاع قطع برهمکنش‌های غیر پیوندی در تمام محاسبات در مقدار $12 \text{ \AA}$ تنظیم شده بود. مدل‌های ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ دارای ابعاد $88.31 \times 95.56 \times 99.00 \text{ \AA}$ بودند. شرایط مرزی متناوب در این مدل‌ها در تمام شبیه‌سازی‌های MD در نظر گرفته شده بود. قطر نانوذرات Al و $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به ترتیب تقریباً $24 \text{ \AA}$ و $14 \text{ \AA}$ بود. علاوه بر این، نانوذرات Al با استفاده از سلول واحد مکعبی با $\alpha = 90^\circ$ و $\beta = \gamma = 90^\circ$ و پارامترهای شبکه $a = b = c = 4.04 \text{ \AA}$ و نانوذرات $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نیز توسط یک سلول واحد مکعبی با $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ و پارامترهای شبکه $a = b = c = 8.60 \text{ \AA}$ و چگالی اولیه (ρ_0) سوپرسلول‌های ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به ترتیب برابر $1/861$ و $1/794 \text{ g/cm}^3$ است که مقدار چگالی ترکیب RDX خالص مطابق با نتایج تجربی و شبیه‌سازی پیشین است [۲۵-۲۶].

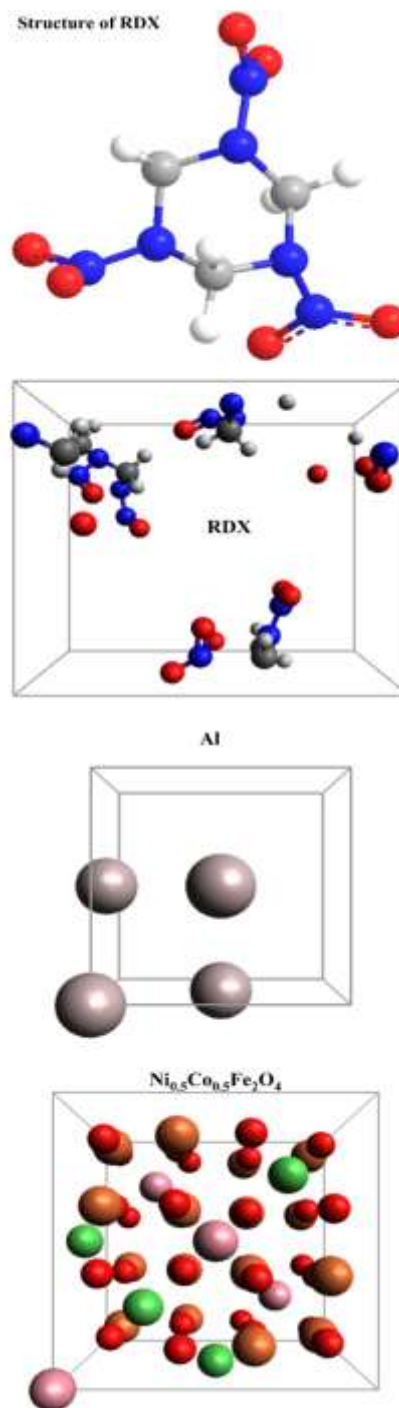
در شکل (۱) ساختار و سلول واحد ترکیب RDX خالص (با فرمول شیمیایی $\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$) و اجزاء نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ارائه شدند. در این شکل اتم‌های کربن، اکسیژن، هیدروژن، آلومینیوم، نیتروژن، نیکل، آهن و کبالت به ترتیب با رنگ‌های خاکستری، قرمز، سفید، آلومینیومی، آبی، سبز، نارنجی و صورتی نمایش داده شدند.

توضیح داده شده است، تمرکز دارد. همان‌طور که در مراجع [۲۹] توضیح داده شده است، پارامترهای سینتیکی، تحولات اتمی، رابطه بین فشار-زمان و انرژی پتانسیل مطالعه شده است. پس از تعیین فاز تعادلی، هنگرد NVT در پنج دمای بالای مختلف (۱۵۰۰، ۲۰۰۰، ۲۵۰۰، ۳۰۰۰ و ۳۵۰۰ K) انجام شد. پارامترهای CJ، شامل P_{CJ} ، T_{CJ} و D_{CJ} همان‌طور که در مرجع [۲۷-۲۸] توضیح داده شد، محاسبه شدند. حالت CJ دقیقاً خواص انفجاری مواد منفجره ثانویه را توصیف می‌کند. در این وضعیت، محصولات واکنش در ناحیه واکنش به تعادل شیمیایی می‌رسند. برای استخراج پارامترهای CJ، ابتدا متراکم‌سازی مدل‌ها توسط هنگرد NVT در نرم‌افزار لمپس انجام شد. در این مرحله، نسبت میرایی دما به‌طور چشمگیری بر پارامترهای خروجی ترمودینامیکی مؤثر است؛ بنابراین، مقادیر H_g به‌عنوان تابعی از V/V_0 در پنج دمای بالای مختلف محاسبه می‌شود. این دماها برای ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ به‌دلیل تفاوت در نمونه‌ها متفاوت هستند. در مرحله بعد، رابطه بین H_g و V/V_0 برای به دست آوردن مقدار V/V_0 که حالت $H=0$ را حاصل می‌کند، برازش می‌گردد. در این مرحله از هنگرد NVE برای تعریف شرایط استفاده می‌شود.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- شبیه‌سازی MD برای پیش‌بینی خواص نمونه‌ها

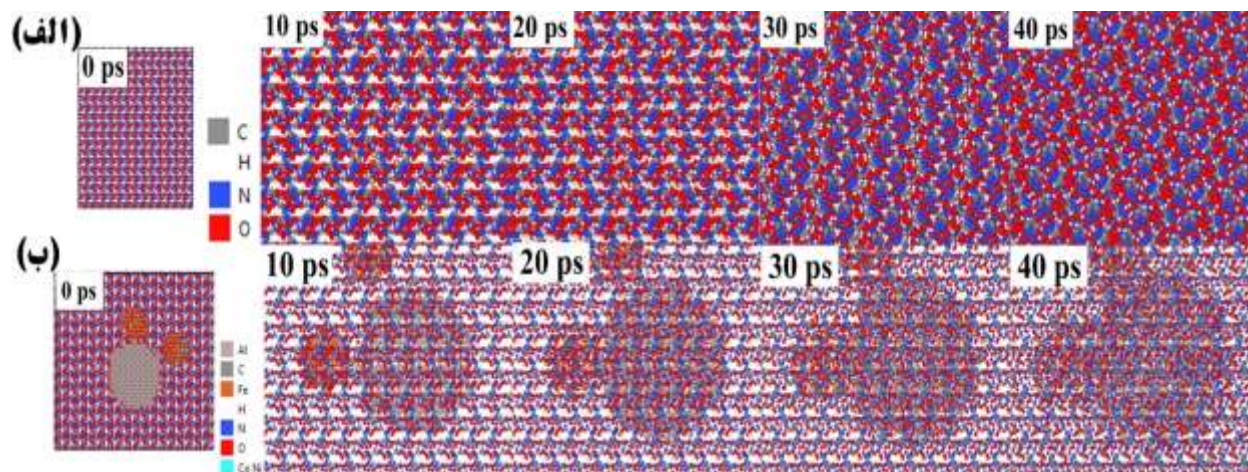
مدل‌های ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ استفاده شده در شبیه‌سازی MD در شکل (۲) نشان داده شده است. در این شکل مجموعه‌ای از تصاویر از زمان صفر تا ۴۰ ps ثانیه برای این مدل‌ها به‌منظور نمایش تغییر شکل ساختاری ارائه شدند. مولکول‌های ترکیب RDX به اندازه کافی با ساختار نانوذرات Al و $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ تماس برقرار می‌کنند؛ بنابراین، واکنش‌های بسیاری در سطح مشترک بین ذرات رخ می‌دهند. تغییر شکل‌هایی در ساختارهای Al، $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و RDX



شکل (۱): ساختار و سلول واحد ترکیب RDX خالص و اجزاء نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$.

این پژوهش بر مطالعه تحولات اتمی، پارامترهای انرژی فعال‌سازی، رابطه فشار و انرژی پتانسیل با زمان و پارامترهای CJ شامل P_{CJ} ، T_{CJ} و D_{CJ} همان‌طور که در مراجع [۲۷-۲۹]

مشاهده می‌شود، جایی که اتم‌ها به سرعت در مولکول‌های RDX پخش می‌شوند، همان‌طور که در شکل (۲) نشان داده شده است؛ بنابراین، تجزیه حرارتی و انفجار مولکول‌های RDX در مراحل اولیه و نهایی به دلیل وجود نانوذرات Al و $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ در مولکول‌های RDX تسریع می‌شود.



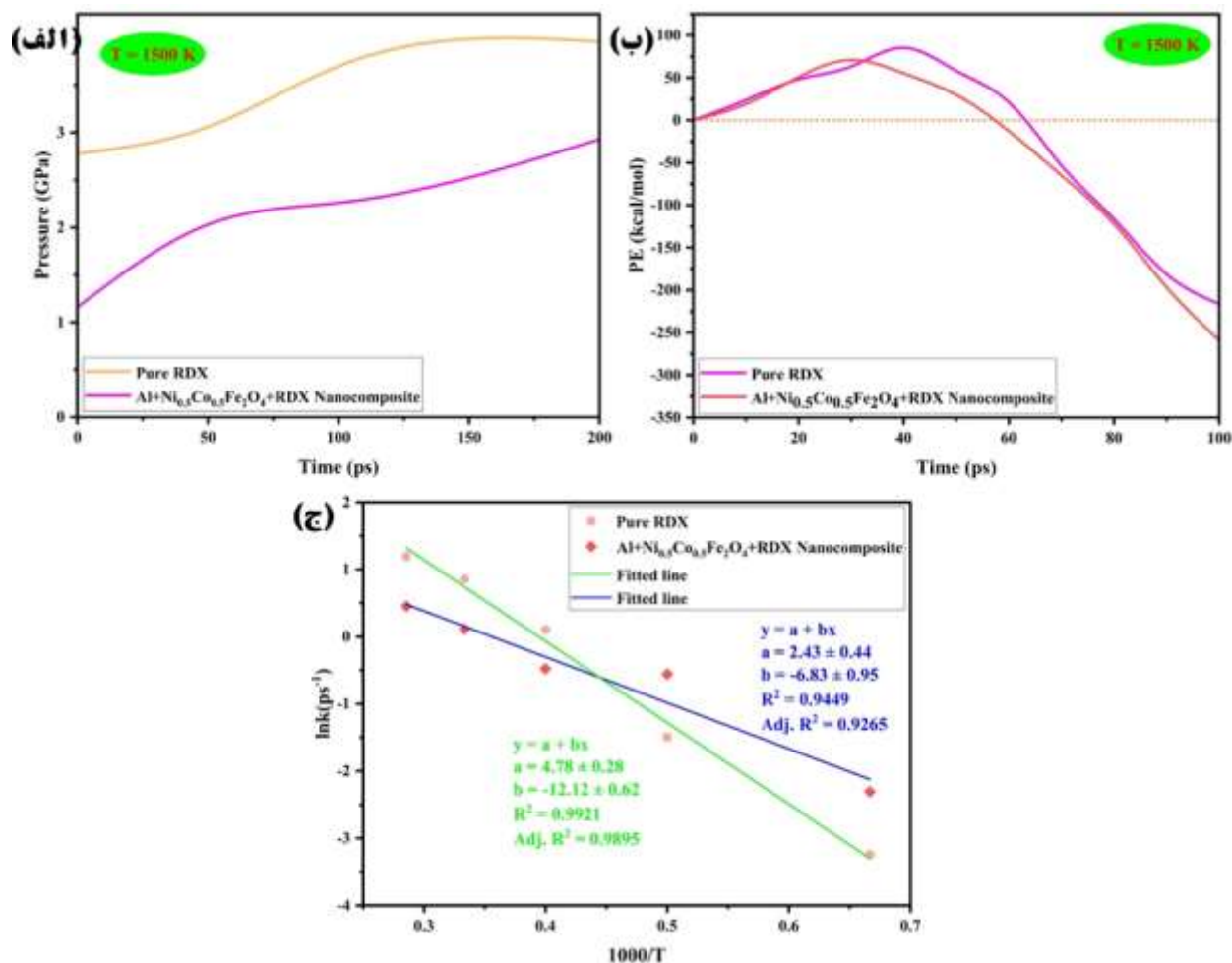
شکل (۲): (الف و ب) تصاویر مدل‌های ترکیب RDX خالص و نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ به ترتیب در زمان‌های ۰، ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۴۰ ps.

دلیل تغییرات در پارامتر PE است [۳۰]. مطابق با شکل (۳-ب)، ابتدا برای هر دو نمونه پارامتر PE به سرعت به دلیل یک فرآیند گرماگیر برای ذوب یا شکستن پیوندهای (مانند N-N) ترکیب RDX به حداکثر مقدار افزایش می‌یابد [۳۰-۳۱]. همان‌طور که در شکل (۳-ب) نشان داده شده است، نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ در مقایسه با ترکیب RDX خالص، مقدار PE کمتری را نشان می‌دهد. همچنین، پارامتر PE نانو کامپوزیت در زمان کمتری نسبت به ترکیب RDX خالص به حداکثر مقدار می‌رسد. همان‌طور که در شکل (۳-ب) نشان داده شده است، مقدار PE به سرعت برای نمونه‌ها کاهش می‌یابد، در این مرحله واکنش‌هایی در حال انجام هستند [۳۰] که در آن مقدار PE نانو کامپوزیت کمتر از ترکیب RDX خالص است. به بیان ساده‌تر، هر چه تمایل به کاهش پارامتر PE بیشتر باشد، گرمای آزاد شده بیشتر می‌شود [۳۲]؛ بنابراین، احتمالاً مقدار گرمای آزاد شده از

شکل (۳-الف) تکامل فشار را در دمای K ۱۵۰۰ طی تجزیه نمونه‌ها نشان می‌دهد. محدوده فشار از ۲/۷۸ تا ۳/۹۶ GPa و از ۱/۱۶ تا ۲/۹۳ GPa به ترتیب برای ترکیب RDX خالص و نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ متغیر است؛ بنابراین، فشار ترکیب RDX با افزودن نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به دلیل تعداد کمتر گونه‌های گازی تولید شده توسط نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ نسبت به ترکیب RDX خالص کاهش می‌یابد. با این حال، نانو کامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4+\text{RDX}$ دارای نرخ افزایش فشار بالاتری نسبت به ترکیب RDX خالص است که این پدیده به دلیل تسریع تجزیه ترکیب RDX در حضور نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به عنوان یک کاتالیز است.

شکل (۳-ب) تکامل انرژی پتانسیل (PE^{a}) را در K ۱۵۰۰ برای نمونه‌ها نشان می‌دهد. تغییرات حرارتی طی فرآیند احتراق به

نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ +RDX در مقایسه با ترکیب خالص بیشتر است و همچنین مقدار پارامتر E_a نانوکامپوزیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ +RDX نسبت به ترکیب RDX خالص، کمتر خواهد بود.



شکل (۳): (الف و ب) تکامل فشار و انرژی پتانسیل طی زمان و (ج) نمودار آرنیوس برای نمونه‌ها.

[۲۹] است. با این حال، مقدار E_a برآورد شده در مطالعات تجربی پیشین نسبت به مقدار E_a تخمین زده شده در این پژوهش بالاتر است [۳۳-۳۶]. به بیان ساده، مقدار E_a تجزیه حرارتی نمونه‌ها به طور چشمگیری تحت تأثیر عوامل مهمی از جمله فشار، دما و فاز (گاز، مایع و جامد) قرار دارد [۳۰]. در این پژوهش، در شبیه‌سازی MD، مقادیر E_a نمونه‌ها با استفاده از روش هم‌دمایی و مرتبه اول محاسبه شده است، در حالی که

یک رابطه خطی مناسب بین $\ln k$ و $1000/T$ برای نمونه‌ها به دست آمده است (شکل ۳-ج). مقدار پارامتر E_a برای ترکیب خالص طی فرایند تجزیه حرارتی برابر $56/78 \text{ kJ/mol}$ $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ +RDX نانوکامپوزیت است که $1/77$ برابر بیشتر از $56/78 \text{ kJ/mol}$ است. مقدار پارامتر E_a برای ترکیب خالص محاسبه شده در این پژوهش مطابق با مطالعه شبیه‌سازی MD پیشین

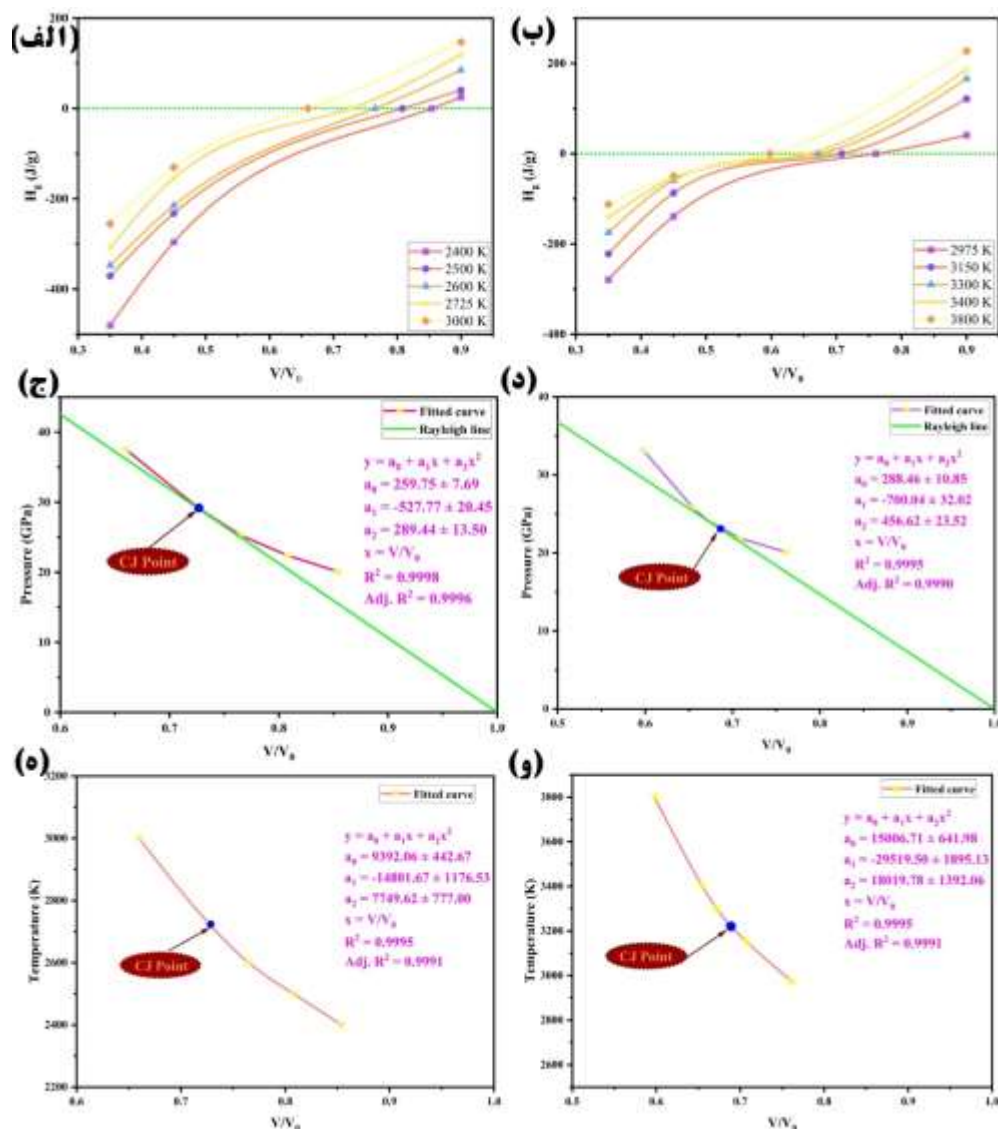
جدول (۱): پارامترهای مهم ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ حاصل از شبیه‌سازی MD.

Parameter	Sample	
	RDX	Nanocomposite
ρ_0 (g/cm ³)	1.861	1.794
E_a (kJ/mol)	100.76	56.78
E_{b1} (kcal/mol)	85.33	70.88
Final of the PE (kcal/mol)	-216.33	-259.09
P_{CJ} (GPa)	28.94	23.05
T_{CJ} (K)	2723.62	3217.52
D_{CJ} (m/s)	7560.16	6411.26

علاوه بر این، مقادیر D_{CJ} نمونه‌ها با توجه به مقادیر V/V_0 و P_{CJ} محاسبه شده است. مقدار D_{CJ} ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به ترتیب 7560.16 و 6411.26 m/s است که در جدول (۱) ذکر شده است؛ بنابراین، مقادیر P_{CJ} و D_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ به ترتیب حدود 20.46% و 15.20% کمتر از ترکیب RDX خالص است. مقدار D_{CJ} کمتر نانوکامپوزیت احتمالاً به دلیل اثرات نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ است [۳۷]. این پدیده می‌تواند به دلیل تولید محصولات گازی نسبتاً کم نانوکامپوزیت باشد که باعث کاهش مقدار P_{CJ} می‌شود. با این حال، ترکیب RDX خالص تمایل به تشکیل تعداد زیادی از محصولات گازی دارد که باعث افزایش مقدار P_{CJ} می‌گردد.

در روش تجربی، این پارامتر از روش غیر هم‌دمایی در نرخ ثابت گرمادهی برآورد شده است.

مطابق شکل (۴-الف و ب) می‌توان برای به دست آوردن نسبت‌های حجم ویژه (V/V_0) مختلف از منحنی‌های ایزوترم در یک دمای خاص استفاده کرد. مقادیر V/V_0 نهایی با استفاده از تقاطع بین محور $H_g = 0$ و منحنی‌های ایزوترم تعیین می‌شود. همان‌طور که در شکل (۴-ج و د) نشان داده شده است، رابطه بین فشار و مقادیر V/V_0 کاملاً واکنش داده شده توسط منحنی انفجار H_g به دست می‌آید. نقطه مماس بین منحنی H_g و خط رایلی برای تعیین نقطه CJ استفاده می‌شود، همان‌طور که با نقاط آبی رنگ در شکل (۴-ج و د) نشان داده شده است؛ بنابراین، نقطه CJ در $P_{CJ} = 28.94$ GPa و $V/V_0 = 0.73$ برای ترکیب RDX خالص و همچنین در $P_{CJ} = 23.05$ GPa و $V/V_0 = 0.69$ برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ حاصل شده است، همان‌طور که در شکل (۴-ج و د) و جدول (۱) نشان داده شده است.



شکل (۴): (الف و ب) ارتباط بین تابع H_g و V/V_0 در پنج دمای مختلف، (ج و د) منحنی H_g برای حالت‌های کاملاً منفجر شده و نقطه P_{CJ} (نقطه آبی) و (ه و و) منحنی H_g برای حالت‌های کاملاً منفجر شده و نقطه T_{CJ} (نقطه آبی) به ترتیب برای ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$.

بنابراین، مقدار T_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ حدود $1/13$ بیشتر از ترکیب RDX خالص تخمین زده شده است. این تفاوت بالا می‌تواند به علت حضور نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ در نانوکامپوزیت باشد زیرا این نانوترمیت ممکن است بر انتقال گرما و جرم تأثیر گذار باشد؛ زیرا این پدیده‌ها به دلیل مقیاس نانومتری Al و $\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ در تماس نزدیک با ترکیب RDX تحت تأثیر قرار می‌گیرند؛ بنابراین، واکنش‌های شدیدی

علاوه بر این، برای تعیین مقدار T_{CJ} یک تابع چند جمله‌ای درجه دوم نیز برای تعیین رابطه بین دما و نسبت حجم ویژه در حالت کاملاً منفجر شده، همان‌طور که در شکل ۹ (e-f) نشان داده شده است، استخراج شده است؛ بنابراین، نقطه CJ در دمای $T_{CJ} = 2723/62 \text{ K}$ برای ترکیب RDX خالص و همچنین در مادی $T_{CJ} = 3217/52 \text{ K}$ برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ حاصل شده است، همان‌طور که در شکل (۴-ه و و) و جدول (۱) نشان داده شده است؛

کم‌تر هستند و پارامتر T_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ ($3079/73 \text{ K}$) بیشتر است.

علاوه بر این، نتایج شبیه‌سازی به‌دست‌آمده در مرجع [۴۰] برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ، با نتایج تحقیق حاضر مقایسه شدند. نتایج نشان می‌دهند که برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ، مشخص است که پارامترهای E_{b1} و E_{a} برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (به ترتیب $65/50 \text{ kJ/mol}$ و $73/15 \text{ kcal/mol}$) کم‌تر هستند که نشان‌دهنده فعالیت کاتالیزوری بالاتر نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر ترکیب RDX است. همچنین، پارامترهای P_{CJ} و D_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نیز نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ (به ترتیب $27/14 \text{ GPa}$ و $7389/74 \text{ kcal/mol}$) کم‌تر هستند و پارامتر T_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($3138/51 \text{ K}$) بیشتر است.

به‌طور کلی، این نتایج نشان می‌دهند که نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت‌های $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ جایگزین شدن به‌جای مواد منفجره اولیه نظیر ترکیب آزید سرب مناسب‌تر است، زیرا مقدار پارامتر D_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و ترکیب آزید سرب مطابقت بیشتری دارند. علاوه بر این، مقدار پارامتر T_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بالاتر است که می‌تواند برای آغازش نازل‌های متصل به کپسول‌های سطحی قابل کاربرد در معادن، شرایط بهتری را فراهم نماید.

به‌دلیل انتقال و انباشت حرارت بالا و همچنین انتقال جرم و فاصله نفوذ کمتر رخ می‌دهند.

نتایج تجربی و شبیه‌سازی به‌دست‌آمده در مراجع [۲۵، ۳۸] برای RDX خالص با پارامترهای CJ برآورد شده در این پژوهش مقایسه شدند. هیچ داده تجربی و شبیه‌سازی برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ وجود ندارد. مقادیر گزارش شده در مرجع [۲۵] برای RDX خالص با چگالی $1/836 \text{ g/cm}^3$ ، برابر $P_{\text{CJ}} = 32/5 \text{ GPa}$ و $D_{\text{CJ}} = 8239$ هستند. مقادیر P_{CJ} و D_{CJ} به‌دست‌آمده از نتایج تجربی، در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی در این پژوهش، کاهش می‌یابند. علاوه بر این، مقادیر $P_{\text{CJ}} = 28/62 \text{ GPa}$ و $D_{\text{CJ}} = 8266$ برای ترکیب RDX خالص با چگالی $1/766 \text{ g/cm}^3$ در مرجع [۲۷] گزارش شده است. نتایج شبیه‌سازی MD در این پژوهش با نتایج شبیه‌سازی به‌دست‌آمده در مرجع [۲۷]، مطابقت نسبتاً خوبی دارند؛ بنابراین، نتایج شبیه‌سازی MD در این پژوهش با داده‌های تجربی و شبیه‌سازی پیشین مطابقت دارد و در نتیجه، نتایج شبیه‌سازی MD در این پژوهش را تأیید می‌کند. لازم به ذکر است که استخراج دقیق پارامترهای CJ تحت شرایط فشار و دمای بالا، برای ناحیه واکنش بسیار پیچیده با معادلات حالت پیچیده برای مواد در فاز متراکم، به‌دلیل عدم قطعیت در داده‌های منتشر شده بسیار دشوار است [۳۹].

با توجه به نتایج حاصل از جدول (۱) برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ و مرجع [۲۲] برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ ، مشخص است که پارامترهای E_{b1} و E_{a} برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ (به ترتیب $62/11 \text{ kJ/mol}$ و $77/92 \text{ kcal/mol}$) کم‌تر هستند که نشان‌دهنده فعالیت کاتالیزوری بالاتر نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر ترکیب RDX است. علاوه بر این، پارامترهای P_{CJ} و D_{CJ} نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نیز نسبت به نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ (به ترتیب $26/12 \text{ GPa}$ و $26/12 \text{ kcal/mol}$) کم‌تر هستند.

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، از روش شبیه‌سازی MD برای بررسی و ارزیابی اثرات نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر عملکرد احتراقی و انفجاری ترکیب RDX استفاده شد. پارامترهایی مانند E_a و حالت CJ برای ترکیب RDX خالص و نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ تحت شرایط مختلف تجزیه و تحلیل شدند. فعالیت کاتالیزوری بالای نانوترمیت $\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر عملکرد ترکیب RDX به خوبی توسط شبیه‌سازی‌های MD مشخص شد. علاوه بر این، مشخص شد که پارامترهای P_{CJ} و D_{CJ} برای نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ کاملاً محترق شده در مقایسه با ترکیب RDX خالص کم‌تر هستند؛ درحالی‌که پارامتر T_{CJ} نانوکامپوزیت‌ها نسبت به ترکیب RDX خالص بالاتر است. این تغییرات احتمالاً به دلیل اثرات نانوترمیت $\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ بر مکانیسم انتقال حرارت و جرم است. با توجه به این نتایج، نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ قابل کاربرد به جای مواد منفجره اولیه نظیر آزید سرب است. علاوه بر این، به‌طور کلی نانوکامپوزیت $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Ni}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ نسبت به نانوکامپوزیت‌های $\text{RDX}+\text{Al}+\text{MoO}_3$ و $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ شرایط بهتری را برای جایگزین شدن به جای ترکیب آزید سرب فراهم می‌نماید.

۵- منابع

- [3] J. Wang, B. Zheng, Z. Qiao, J. Chen, L. Zhang, L. Zhang, Z. Li, X. Zhang & G. Yang, "Construct 3D porous hollow Co_3O_4 micro-sphere: A potential oxidizer of nano-energetic materials with superior reactivity", *Applied Surface Science*, vol. 442, 2018.
- [4] M. B. Poudel & H. J. Kim, "Confinement of Zn-Mg-Al-layered double hydroxide and $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ nanorods on hollow porous carbon nanofibers: A free-standing electrode for solid-state symmetric supercapacitors", *Chemical Engineering Journal*, vol. 429, 2022.
- [5] Y. Wang, F. Li, Y. Shen, C. A. Wang, Z. Zhang, J. Xu, Y. Ye & R. Shen, "Fabrication of high electrostatic safety metastable Al/CuO nanocomposites doped with nitro-functionalized graphene with fast initiation ability and tunable reaction performance", *Combustion and Flame*, vol. 233, 2021.
- [6] C. Rossi, "Two decades of research on nano-energetic materials, Propellants", *Explosives, Pyrotechnics*, vol. 39, no. 3, 2014.
- [7] E. L. Dreizin, "Metal-based reactive nanomaterials", *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 35, no. 2, 2009.
- [8] S. Junghare, S. Kumari, A. Chaudhary, R. Kumar & S. Rayalu, "Thermite reaction driven pyrotechnic formulation with promising functional performance and reduced emissions", *Journal of Hazardous Materials*, vol. 424, 2022.
- [9] Q. Nguyen, C. Huang, M. Schoenitz, K. T. Sullivan & E. L. Dreizin, "Nanocomposite thermite powders with improved flowability prepared by mechanical milling", *Powder Technology*, vol. 327, 2018.
- [10] V. Goetz, P. Gibot & D. Spitzer, "Spark sensitivity and light signature mitigation of an Al/SnO₂ nanothermite by the controlled addition of a conductive polymer", *Chemical Engineering Journal*, vol. 427, 2022.
- [11] M. Comet, C. Martin, F. Schnell & D. Spitzer, "Nanothermites: A short Review. Factsheet for Experimenters, Present and Future Challenges", *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, vol. 44, no. 1, pp. 18-36, 2019.
- [12] Y. Q. Zhao, Y. Zhang & K. Z. Xu, "Effect of precursor on the morphology and supercapacitor
- [1] Y. Gao, W. Ao, L. K. B. Li, S. Zhou, W. He, P. Liu & Q. L. Yan, "Catalyzed combustion of a nanofluid fuel droplet containing polydopamine-coated metastable intermixed composite n-Al/CuO", *Aerospace Science and Technology*, vol. 118, p. 107005, 2021.
- [2] A. Habibi-Yangjeh, S. Asadzadeh-Khaneghah, S. Feizpoor & A. Rouhi, "Review on heterogeneous photocatalytic disinfection of waterborne, airborne, and foodborne viruses: Can we win against pathogenic viruses?", *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 580, pp. 503-514, 2020.

- [22] E. Ayoman & H. Abdoos, "Effect of Al + MoO_3 nanothermite on RDX performance: An experimental, molecular dynamic and numerical investigation", *Chemical Engineering Journal*, vol. 493, 2024.
- [23] Y. Liu, J. Yin, Z. Wang, X. Zhang & G. Bi, "The EFP formation and penetration capability of double-layer shaped charge with wave shaper", *Materials*, vol. 13, no. 20, 2020.
- [24] Z. Mei, Q. An, F. Q. Zhao, S. Y. Xu & X. H. Ju, "Reactive molecular dynamics simulation of thermal decomposition for nano-aluminized explosives", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 20, no. 46, 2018.
- [25] A. K. Rappe, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III & W. M. Skiff, "UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 114, no. 25, pp. 10024-10035, 1992.
- [26] A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant & W. A. Goddard III, "Reax FF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 105, no. 41, 2001.
- [27] D. Guo, S. V. Zybin, Q. An, W. A. Goddard III & F. Huang, "Prediction of the Chapman-Jouguet chemical equilibrium state in a detonation wave from first principles based reactive molecular dynamics", *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, no. 3, 2016.
- [28] D. Guo, D. Guo, F. Huang & Q. An, "Influence of Silicon on the Detonation Performance of Energetic Materials from First-Principles Molecular Dynamics Simulations", *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 122, no. 42, 2018.
- [29] W. Hao, L. Niu, R. Gou & C. Zhang, "Influence of Al and Al_2O_3 Nanoparticles on the Thermal Decay of 1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazinane (RDX): Reactive Molecular Dynamics Simulations", *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 123, no. 22, 2019.
- [30] C. Wang, C. Zhang & X. Xue, "Pressure and Polymorph Dependent Thermal Decomposition Mechanism of Molecular Materials: A Case of 1,3,5-Trinitro-1,3,5-triazine", *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 126, no. 4, 2022.
- [31] L. Xiao, L. Zhao, X. Ke, T. Zhang, G. Hao, Y. Hu, G. Zhang, H. Guo & W. Jiang, "Energetic metastable Al/CuO/PVDF/RDX microspheres with performance of CuCo_2O_4 ", *International Journal of Electrochemical Science*, vol. 14, no. 4, 2019.
- [13] H. Qin, Y. He, P. Xu, D. Huang, Z. Wang, H. Wang, Z. Wang, Y. Zhao, Q. Tian & C. Wang, "Spinel ferrites (MFe_2O_4): Synthesis, improvement and catalytic application in environment and energy field", *Advances in Colloid and Interface Science*, vol. 294, 2021.
- [14] M. Chen, X. Huang, C. Chen, W. Hou & Y. Xu, "M-Dependent activity of MCo_2O_4 spinels for water splitting and H_2 production on $\text{Zn}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{S}$ under visible light", *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 298, 2021.
- [15] J. Chen, B. Huang, Y. Liu, Z. Qiao, X. Li, G. Lv & G. Yang, "3D Hierarchically ordered porous carbon entrapped Ni nanoparticles as a highly active catalyst for the thermal decomposition of ammonium perchlorate", *Energetic Materials Frontiers*, vol. 2, no. 1, 2021.
- [16] J. Wang, X. Lian, S. Chen, H. Li & K. Xu, "Effect of $\text{Bi}_2\text{WO}_6/\text{g-C}_3\text{N}_4$ composite on the combustion and catalytic decomposition of energetic materials: An efficient catalyst with $\text{g-C}_3\text{N}_4$ carrier", *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 610, 2022.
- [17] D. Xu, T. Xia, H. Xu, W. Fan & W. Shi, "Synthesis of ternary spinel MCo_2O_4 ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Zn}$)/ BiVO_4 photoelectrodes for photoelectrochemical water splitting", *Chemical Engineering Journal*, vol. 392, 2020.
- [18] Y. Chen, W. Zhang, C. Yu, D. Ni, K. Ma & J. Ye, "Controllable synthesis of $\text{NiCo}_2\text{O}_4/\text{Al}$ core-shell nanowires thermite film with excellent heat release and short ignition time", *Materials & Design*, vol. 155, 2018.
- [19] F. Xu, B. Hirt, P. Biswas, D. J. Kline, Y. Yang, H. Wang, A. Sehirlioglu & M. R. Zachariah, "Superior reactivity of ferroelectric Bi_2WO_6 /aluminum metastable intermolecular composite", *Chemical Engineering Science*, vol. 247, 2022.
- [20] G. Meurant, "Detection and correction of silent errors in the conjugate gradient algorithm", *Numerical Algorithms*, vol. 92, no. 1, 2023.
- [21] S. Plimpton, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, 1995.

green primary explosive: $\text{Al}/\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{RDX}$ hybrid nanocomposites", Defence Technology, vol. 22, 2023.

[38] D. Guo, S. V. Zybin, Q. An, W. A. Goddard III & F. Huang, "Prediction of the Chapman–Jouguet Chemical Equilibrium State in a Detonation Wave from First Principles Based Reactive Molecular Dynamics", Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 18, 2016.

[39] D. Guo, S. V. Zybin, A. P. Chafin, W. A. Goddard III, "Increasing Oxygen Balance Leads to Enhanced Performance in Environmentally Acceptable High-Energy Density Materials: Predictions from First-Principles Molecular Dynamics Simulations", ACS Applied Materials & Interfaces, vol. 14, no. 4, pp. 5257-5264, 2022.

[40] E. Ayoman, "Detonation performance of $\text{RDX}+\text{Al}+\text{Zn}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ nanocomposite predicted from reactive molecular dynamics simulations", Fuel and Combustion, vol. 17, no. 3, 2024.

۶- پی‌نوشت

- [1] Reactive Force Field-Molecular Dynamics
- [2] Lammmps
- [3] Activation Energy
- [4] Chapman–Jouguet
- [5] Detonation Pressure
- [6] Detonation Velocity
- [7] Detonation Temperature
- [8] Conjugate Gradient
- [9] Potential Energy

enhanced combustion performance", Chemical Engineering Science, vol. 231, 2021.

[32] W. Li, X. Zhang, R. Liu, S. Xu, S. Xu, Y. Lan, Y. Fu, Y. Zhang, Y. Feng & W. Cao, "Thermal decomposition, flame propagation, and combustion reactions behaviours of stearic acid by experiments and molecular dynamic simulation", Chemical Engineering Journal, vol. 461, 2023.

[33] Z. Mei, Q. An, F. Q. Zhao, S. Y. Xu & X. H. Ju, "Reactive Molecular Dynamics Simulation of Thermal Decomposition for Nano-aluminized Explosives", Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 20, 2018.

[34] C. Hou, X. Geng, C. An, J. Wang, W. Xu & X. Li, "Preparation of Al Nanoparticles and Their Influence on the Thermal Decomposition of RDX", Cent. Eur. J. Energ. Mater., vol. 10, 2013.

[35] N. Wang, J. Peng, A. Pang, T. He, F. Du & A. Jaramillo-Botero, "Thermodynamic Simulation of the RDX–Aluminum Interface Using ReaxFF Molecular Dynamics", J. Phys. Chem C, vol. 121, 2017.

[36] L. Xiao, Y. Zhang, X. Wang, G. Hao, J. Liu, X. Ke, T. Chen & W. Jiang, "Preparation of a Superfine RDX/Al Composite as an Energetic Material by Mechanical Ball-Milling Method and the Study of its Thermal Properties", RSC Adv, vol. 8, 2018.

[37] Q. P. Luo, X. P. Long, F. D. Nie, G. X. Liu & C. Wu, "Deflagration to detonation transition in weakly confined conditions for a type of potentially novel