

Модель деструкции полимеров под действием сверхтепловых атомов кислорода

Н.П. Чирская^{1,*}, Е.Н. Воронина^{1,2,†}, Л.С. Новиков^{1,‡}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 22.12.2023; подписана в печать 29.01.2024)

В работе рассмотрены существующие подходы к моделированию процессов разрушения полимерных материалов под действием сверхтепловых атомов кислорода в условиях эксплуатации материалов в околоземном космическом пространстве. Методами DFTB и молекулярной динамики рассчитаны параметры реакций взаимодействия сверхтепловых атомов кислорода с полиимидом, сопровождающихся образованием летучих продуктов CO₂, CO, OH, проведено сравнение полученных параметров.

PACS: 94.05.-a; 07.05.Tr.

УДК: 533.924; 539.12.04.

Ключевые слова: атомарный кислород, математическое моделирование, полимерные материалы, взаимодействие, эрозия.

ВВЕДЕНИЕ

Атомарный кислород (АК) является основным компонентом атмосферы Земли в интервале высот $\sim(200-700)$ км [1]. По отношению к искусственному спутнику Земли (ИСЗ), движущемуся со скоростью ~ 8 км/с, кинетическая энергия атомов O набегающего потока составляет около 5 эВ, что усиливает окислительную способность АК. В результате при взаимодействии атомов O с материалами происходит образование летучих окислов, уходящих в окружающее пространство, и в конечном итоге — эрозия поверхности материалов и потеря ими массы [2]. В наибольшей степени подвержены разрушающему воздействию сверхтепловых атомов O полимерные материалы, широко используемые на поверхности ИСЗ [3]. Поэтому требуется тщательное изучение механизмов разрушения полимеров потоком АК. Численное моделирование с использованием многомасштабного подхода позволяет исследовать указанные механизмы и выявлять наиболее важные из них, а также оценивать и прогнозировать степень повреждения полимеров [4].

Одним из классов полимеров, проявляющих высокую устойчивость к экстремальным условиям космического пространства, являются ароматические полиимиды [5], на основе которых создаются, например, терморегулирующие покрытия космических аппаратов [6, 7].

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ–КАРЛО

1.1. Метод Монте–Карло

Метод Монте–Карло (МК) [8] активно применяется при изучении химических реакций на поверхности материалов, которые можно рассматривать как случайные процессы. Благодаря многократным расчетам состояния системы с последующим усреднением полученных результатов метод МК позволяет эффективно исследовать динамику сложных систем, в том числе на основе полимеров. Главной задачей при разработке физико-математической модели процессов эрозии полимеров является выявление наиболее важных элементарных процессов и определение их вероятностей. В простых моделях вероятности процессов могут быть получены из экспериментальных данных, а при более строгом анализе — на основе атомистического моделирования. Для сложных неупорядоченных структур, подобных полимерам, используются «огрубленные» модели, в которых качестве элементарной ячейки моделирования выбираются характерные фрагменты мономеров, сами мономеры или их объединения. В тех случаях, когда степень детализации не является критической (как, например, при исследовании эрозии полимерных покрытий), можно использовать модели с достаточно крупными ячейками.

1.2. Двумерная модель эрозии полимера

Ранее в НИИЯФ МГУ была разработана двумерная модель для расчета эрозии полимеров методом Монте–Карло, в которой материал разбивался на ячейки размером 0.05–1.0 мкм (рис. 1, а), соответствующие либо полимеру, либо материалу, стойкому к воздействию АК (защитному покрытию). Данная модель является феноменологической, т.е. ее параметры выбирались на основании экспериментальных данных [9]. Учитывались

* chirskaia.sinp@yandex.ru

† voroninaen@nsrd.sinp.msu.ru

‡ novikov@sinp.msu.ru

следующие каналы взаимодействия частиц с веществом: химическая реакция, приводящая к удалению ячейки полимера из модели; зеркальное отражение частиц от поверхности полимера без изменения энергии частицы кислорода; диффузионное рассеяние, сопровождающееся потерей частицей части энергии в каждом акте рассеяния. Более подробно параметры расчетной модели, выбранные на основе экспериментальных данных и работы [10], представлены в таблице.

1.3. Результаты моделирования методом Монте–Карло

Построение используемой математической модели таково (рис. 1, а), что она может эффективно применяться для расчетов в поперечном сечении структур с продольной симметрией. В качестве примера на рис. 1, б, в приведены рассчитанный (б) и полученный экспериментально (в) профили каверны, возникшей в полимерном образце в результате воздействия атомов О. В данном случае верхний защитный слой имеет дефект, сквозь который на полимерный материал могут попадать атомы кислорода. На рис. 1, в хорошо видна характерная слоистая структура полимера, обуславливающая различия в профилях каверны в разных срезах.

Создание трехмерной модели эрозии связано с рядом трудностей, главными из которых являются анизотропия свойств полимерных материалов, которую достаточно трудно учесть в математической модели, и ограниченное количество экспериментальных данных для калибровки модели. Данные наземных и натурных экспериментов обычно получены в условиях, близких к двумерному случаю (узкая щель-дефект в защитном покрытии, плоскопараллельный пучок АК).

Дальнейшее развитие существующей модели эрозии полимерного материала предполагает более высокий уровень детализации процессов, протекающих при взаимодействии атомов О с полимерными звеньями. Подробное рассмотрение процессов взаимодействия АК с молекулами полимера позволит определить вероятности образования различных продуктов реакций и приблизиться к созданию трехмерной модели.

2. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Для выбора оптимального метода решения задачи моделирования взаимодействия сверхтепловых атомов кислорода с полимером были рассмотрены существующие методы моделирования процессов на разных пространственно-временных масштабах [4, 11].

2.1. Полуэмпирический метод DFTB

Квантовомеханические методы или методы «из первых принципов» (*ab initio*), основанные на численном

интегрировании уравнений квантовой механики и не требующие для использования каких-либо эмпирических предположений, могут применяться для моделирования взаимодействий в системах из нескольких десятков атомов. С целью упростить подобное интегрирование в методе теории функционала плотности (density functional theory, DFT) [12] используется концепцию электронной плотности, что позволяет рассчитывать свойства молекул и периодических структур с относительно большим числом атомов (100–300). Однако для проведения расчетов для систем, содержащих более нескольких десятков атомов указанные методы требуют значительных вычислительных ресурсов.

Метод DFT в схеме сильной связи (density functional based tight-binding, DFTB), который относится к классу менее точных полуэмпирических методов, позволяет обеспечивать хорошую точность расчетов при высокой вычислительной эффективности, достигаемой за счет использования параметров, рассчитанных с помощью DFT [13]. В обычном методе DFTB не учитывается изменение зарядов на атомах в процессе моделирования, но метод DFTB с самосогласованием зарядов (self-consistent charge DFTB, SCC DFTB) дает возможность существенно повысить точность расчетов для систем, содержащих гетерогенные ковалентные и ионные связи.

2.2. Эмпирический метод молекулярной динамики

В случае систем большого размера решение квантовомеханических уравнений даже со значительными упрощениями крайне затруднено, поэтому для перехода к большим пространственно-временным диапазонам требуется понизить число степеней свободы моделируемых объектов. Среди методов данного пространственно-временного диапазона наиболее часто применяется метод молекулярной динамики (МД) [14], который позволяет исследовать эволюцию системы во времени с учетом термодинамических условий. В традиционном методе МД электронные степени свободы исчезают, а атомы представляются в виде твердых шариков, взаимодействующих друг с другом посредством эффективных потенциалов [14, 15]. Такой подход позволяет существенно увеличить размеры системы и число частиц в ней (до 10^6 – 10^7 частиц), но приводит к появлению ряда ограничений, включая сложности с исследованием химических реакций [14].

Первоначально разработанные силовые поля являлись в основном парными, т.е. описывали взаимодействие в системе посредством функций, зависящих только от расстояния между двумя атомами R . Позднее появились более сложные виды силовых полей (функционалы), такие как модель Терсоффа (Tersoff), а также потенциалы Бреннера для углеродных материалов, REBO, AIREBO, EDIP [16], которые позволяют описывать более сложные процессы, включая разрыв и образование химических связей между отдельными

Таблица. Параметры двумерной расчетной модели

Параметр модели	Значение
Вероятность химической реакции взаимодействия АК с полимером при однократном рассеянии	$P = 0.5$
Вероятность химической реакции взаимодействия АК с полимером при многократном рассеянии	$P = k\Delta \exp(E_0/E)$
Исходная энергия АК	$E = 5 \text{ эВ}$
Энергия активации E_0	$E_0 = 0.26 \text{ эВ}$
k	$k = 0.1165$
Вероятность зеркального отражения АК	$R = 0.3$
Вероятность диффузного рассеяния АК	$D = 0.5$
Снижение энергии АК при диффузном рассеянии	$E_{i+1} = 0.28\Delta E_i$
Минимальная энергия АК	$E_{min} = 0.025 \text{ эВ}$

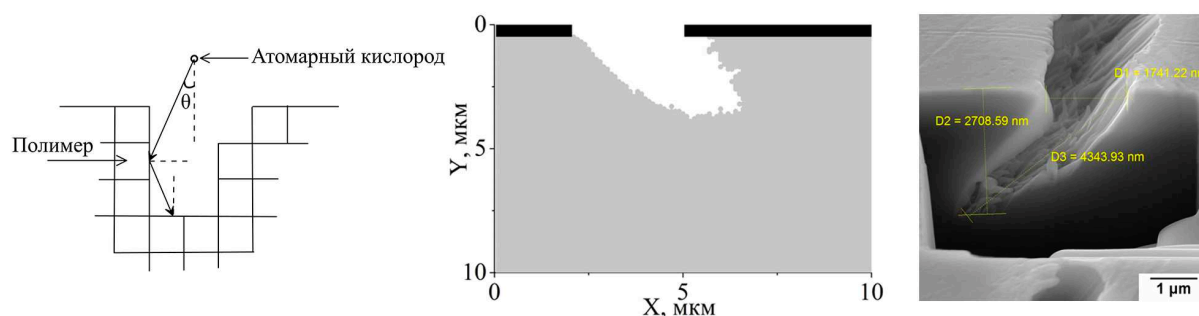


Рис. 1. Расчетная модель полимера (слева), результаты моделирования эрозии образца полимера (серый цвет) с защитным покрытием (черный цвет) (в центре) и полученное с помощью растрового электронного микроскопа изображение профиля каверны в полимере при облучении потоком сверхтепловых атомов О (флюенс $1.6 \times 10^{20} \text{ см}^{-2}$ при угле падения 30°) (справа)

атомами (например, потенциал AIREBO используется для углеводородных материалов, содержащих атомы С и Н).

В последние годы активно развивается силовое поле ReaxFF (*Reactive ForceField*) [17, 18], предназначенное для моделирования широкого класса материалов, содержащих довольно большое число различных атомов (например, атомы С, Н, О, N). Данная модель строится в предположении, что кратность связей является ключевым параметром при определении энергии взаимодействия между атомами и может быть определена на основании межатомного расстояния. Силовое поле позволяет описывать особенности химических связей, электростатические силы и силы Ван-дер-Ваальса. Число параметров, входящих в ReaxFF, составляет несколько десятков для отдельного атома, и параметризации обычно производится на основе DFT расчетов. В процессе моделирования предполагается вычисление кратности различных связей, корректировку полученных величин с учетом валентности каждого атома и расчет частичных зарядов атомов [17], в результате чего вычислительные затраты резко возрастают. Поэтому в настоящее время модели для ReaxFF содержат только несколько тысяч атомов.

2.3 Методика атомистического моделирования

Первой задачей выполняемого моделирования было обнаружение так называемых прямых реакций, т.е. быстрых процессов, которые происходят при воздействии сверхтепловых атомов О на полимерные звенья. Для этого были проведены расчеты с использованием методов атомистического моделирования (полуэмпирический метод DFTB и метод МД), что позволило выявить основные прямые реакции сверхтепловых атомов О с полиимидом, приводящие к образованию летучих продуктов (Н, ОН, СО, СО₂) и сделать предварительные оценки вероятностей реакций. В данной работе применялся метод SCC DFTB с набором mio, содержащим параметры для атомов С, Н, О, N [13]. При этом моделирование эволюции системы во времени производилось с использованием алгоритмов молекулярной динамики с временным шагом 0.2 фс в течение 1000–2000 фс. При проведении расчетов методом DFTB использовалась модель полиимида из двух последовательно соединенных мономеров (рис. 2, а), которая содержала 80 атомов.

Для расчетов методом молекулярной динамики был использован пакет LAMMPS [19] с реакционным по-

тенциалом взаимодействия ReaxFF [18]. При этом использовалась модель мономера полиимида, состоящая из 40 атомов (рис. 2, б), с тремя зафиксированными крайними атомами Н, что позволило предотвратить излишнее смещение модели при воздействии сверхтепловых атомов О. Моделирование проводилось с временным шагом 0.01 фс в течение 900 фс, при необходимости для отдельных реакций моделируемое время увеличивалось.

Однако помимо прямых реакций при взаимодействии атомов О с полимером большое значение имеют цепочки вторичных реакций, которые идут через процессы адсорбции налетающих атомов О с их последующей термализацией и также могут приводить к уносу массы. Для анализа этих процессов уже недостаточно моделей отдельных мономеров, расчеты необходимо проводить на более масштабных моделях. Для проведения таких расчетов с помощью пакета LAMMPS/ReaxFF была создана модель кубической ячейки полимера с размером грани 30 нм (рис. 3), содержащая 1139 атомов (рис. 3, б). Для обеспечения теплообмена к нижней части модели был применен термостат с фиксированной температурой T . Облучение ячейки полимера атомами О производилось сверху. Однако прежде, чем переходить к рассмотрению и первичных, и вторичных реакций, необходимо подробнее остановиться на сравнении результатов моделирования методами DFTB и молекулярной динамики с целью проверки точности МД расчетов.

2.4. Результаты моделирования

При проведении расчетов методом DFTB было рассмотрено 600 случаев попадания атомов О с исходной энергией 5 эВ в различные пространственные области расчетной модели. Из полученных расчетных данных следует, что для прямых реакций, сопровождающихся образованием летучих продуктов, характерны определенные области взаимодействия налетающих сверхтепловых атомов О с полимером, показанные на рис. 4, а, где пунктирной линией ограничена найденная общая зона иницирования реакций.

При проведении расчетов методом молекулярной динамики было рассмотрено 2200 случаев попадания атомов О в модель. Как и в предыдущем случае, общая зона иницирования реакций показана пунктирной линией (рис. 4, б). В этом случае тепловое движение модели и фиксация крайних атомов Н приводят к менее симметричной картине, области иницирования различных реакций перекрываются.

Перейдем к более подробному рассмотрению реакций с образованием летучих продуктов ОН, СО, СО₂ и сравнению результатов расчета методами DFTB и МД. Полученные результаты продемонстрировали хорошее согласование расчетов, выполненных этими методами. Критически важным является наблюдавшееся сходство механизмов прямых реакций, выявлен-

ных в рассчитанных траекториях при DFTB и МД-моделировании. Особенности этих механизмов могут быть проиллюстрированы временными зависимостями кинетической энергии вылетающих радикалов и молекул, которая рассчитывалась как суммарная кинетическая энергия атомов, входящих в их состав.

Основные стадии реакции с образованием радикала ОН показаны на рис. 5, а. Воздействие налетающего атома О приводит к его внедрению в С–Н связь, ее разрыву и образованию летучего радикала ОН и атома С с разорванной связью. Реакция образования радикала ОН является достаточно быстрой: взаимодействие налетающего атома О с молекулой начинается в момент времени ~ 50 фс, а в момент времени ~ 110 фс радикал отрывается от полиимидного звена. Кинетическая энергия вылетающего радикала ОН (рис. 5, б, кривая 2) оказывается несколько ниже (~ 3.5 эВ) энергии налетающего атома О (рис. 5, б, кривая 1). Характерное время реакции образования радикала ОН при DFTB моделировании составляет 50–100 фс, энергия радикала ОН 4.5–4.9 эВ [11].

В случае образования молекулы СО (рис. 6), формирующейся из карбонильной группы С=О (рис. 2, а) картина взаимодействия оказывается иной. Налетающий атом О присоединяется к ароматической С–С связи рядом с карбонильной группой, что приводит к значительному усилению колебаний соседней С–С связи и ее разрыву, сопровождающемуся отделением карбонильной группы от полиимидного звена (рис. 6, а). Отметим, что длительность такого процесса может заметно различаться: например, для случаев, показанных на рис. 6, б, она составила 100 и 200 фс.

Характерные зависимости кинетической энергии образующейся молекулы СО заметно отличаются от зависимостей, рассчитанных для радикала ОН (рис. 5, б): в начальных моментах времени энергии входящих к карбонильную группу атомов С и О низкие, но затем в результате воздействия сверхтеплого атома О они резко возрастают, достигая ~ 1.8 эВ (кривая 1) и ~ 1.5 эВ (кривая 2). Отметим, что быстрые осцилляции кинетической энергии, хорошо различимые для кривой 2, свидетельствуют о высоковозбужденном колебательном состоянии вылетающей молекулы СО. Длительность процесса образования молекулы СО при расчетах методом DFTB составила 150–500 фс, а среднее значение кинетической энергии молекулы СО — 0.6–1.0 эВ.

Благодаря применению метода МД выявляются более медленные процессы (непрямые реакции), которые не удалось обнаружить с помощью DFTB моделирования. Пример такой реакции с образованием молекулы СО показан на рис. 7. В этом случае налетающий атом также присоединяется к полимерному звену вблизи С=О группы и постепенно теряет энергию, передавая ее полимеру. В течение ~ 1000 фс происходит заметная перестройка связей вблизи него, которая в итоге приводит к образованию молекулы СО. Отметим, что в отличие от реакций, показанных на рис. 6,

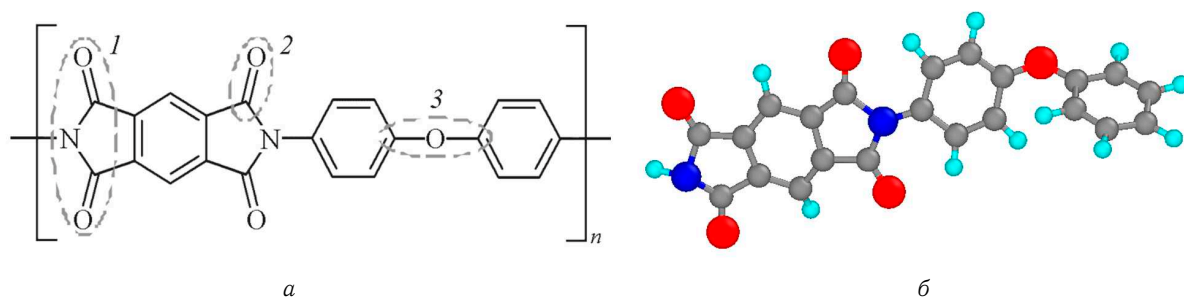


Рис. 2. Расчетная модель: *a* — мономер полиимида Картон НН с функциональными группами трех видов: 1 — имидная; 2 — карбонильная; 3 — эфирная; *б* — модель аналогичного мономера при расчетах методом молекулярной динамики (здесь и далее красным цветом обозначены атомы О, синим — N, серым — С, голубым — Н)

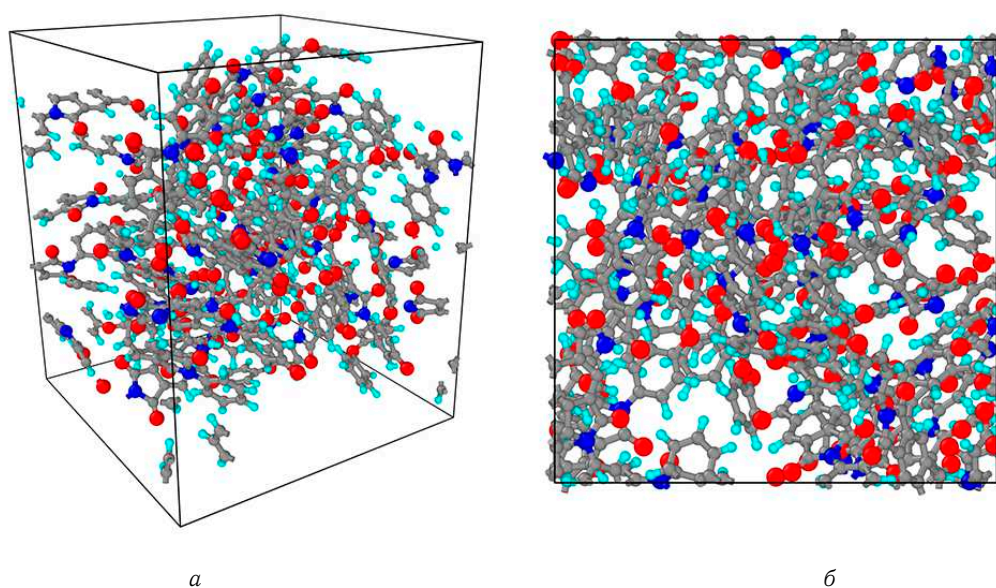


Рис. 3. Модель кубической ячейки полиимида: *a* — общий вид, *б* — вид на ячейку сверху

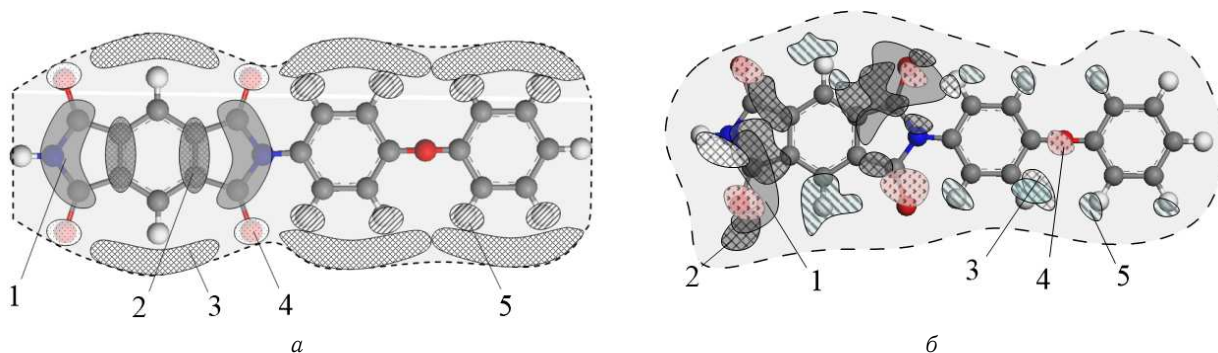


Рис. 4. Пространственные области, характерные для реакций с образованием летучих продуктов при расчетах методом DFTB (*a*) и LAMMPS/ReaxFF (*б*): 1 — CO₂; 2 — CO; 3 — OH; 4 — O; 5 — H

эта молекула образуется из налетающего атома О, поэтому ее итоговая энергия оказалась заметно меньше. Длительность процесса образования и отделения молекулы СО в этом случае составила ~ 1000 фс, а ее

средняя кинетическая энергия ~ 0.5 эВ.

На рис. 8 показаны аналогичные зависимости для реакции образования молекулы CO₂. Большая длительность протекания данной реакции свидетельству-

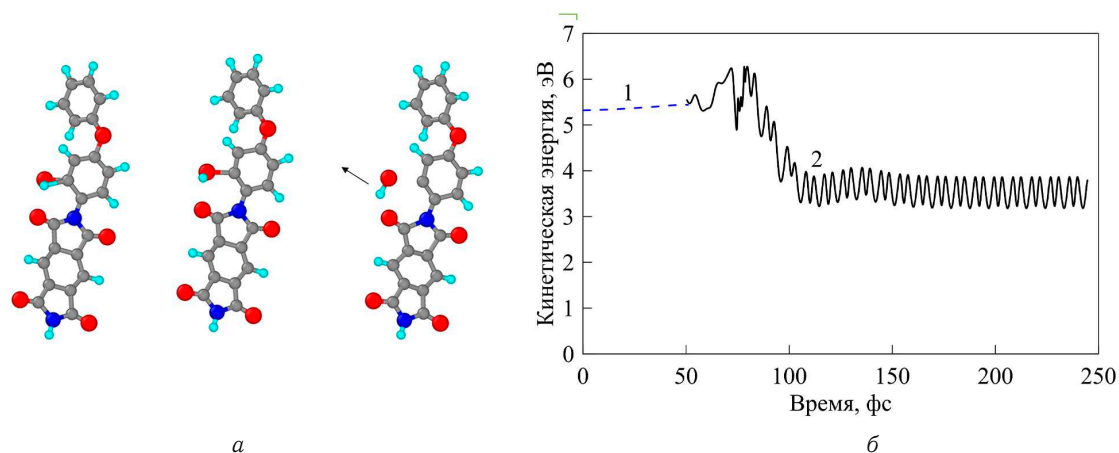


Рис. 5. Реакция с образованием радикала OH: *a* -различные стадии реакции; *б* - зависимость кинетической энергии от времени: 1 - налетающий атом O; 2 — радикал OH

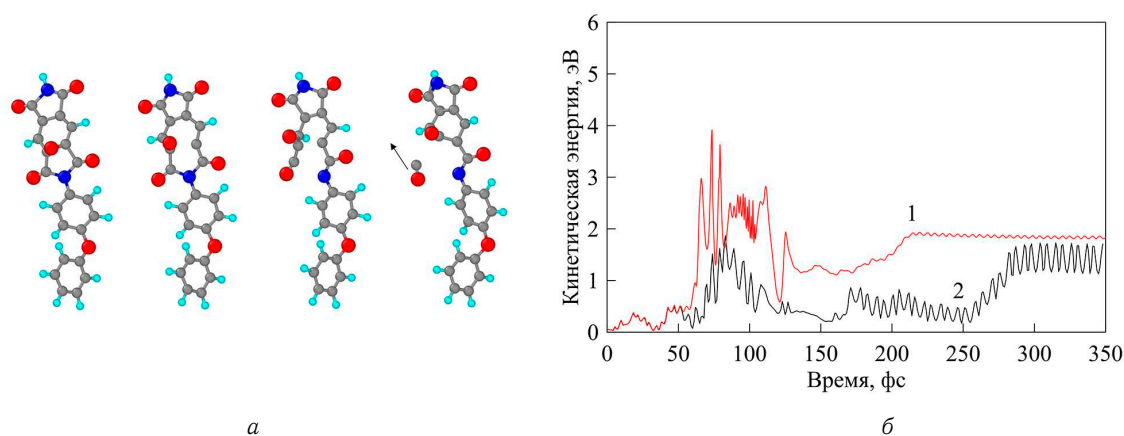


Рис. 6. Реакция с образованием молекулы CO: *a* — различные стадии реакции; *б* — зависимость полной кинетической энергии молекулы CO от времени в двух вариантах реакции

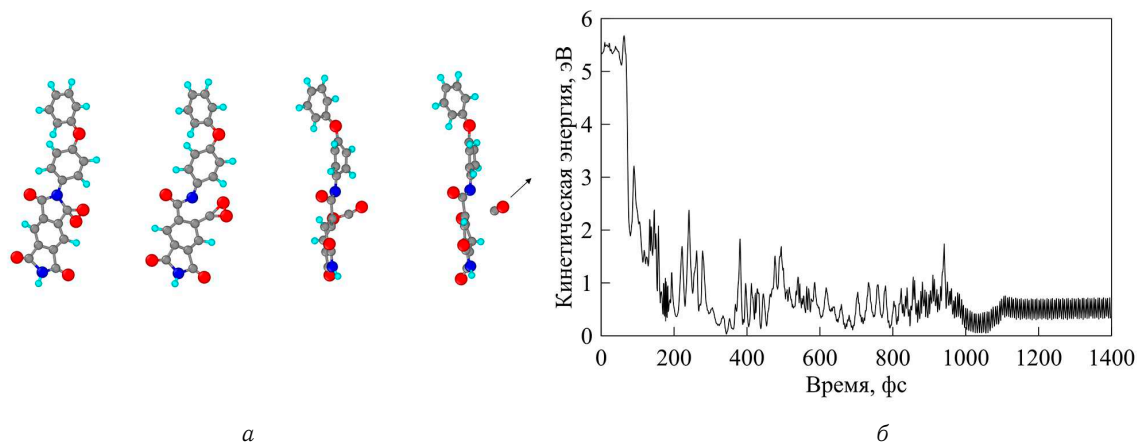


Рис. 7. Реакция с образованием молекулы CO: *a* — различные стадии реакции; *б* — зависимость полной кинетической энергии молекулы CO от времени

ет о сложности происходящего процесса, характерные стадии которого показаны на рис. 8, *a*. Воздействие на-

летающего атома O на карбонильную группу вызывает образование активированного комплекса, который су-

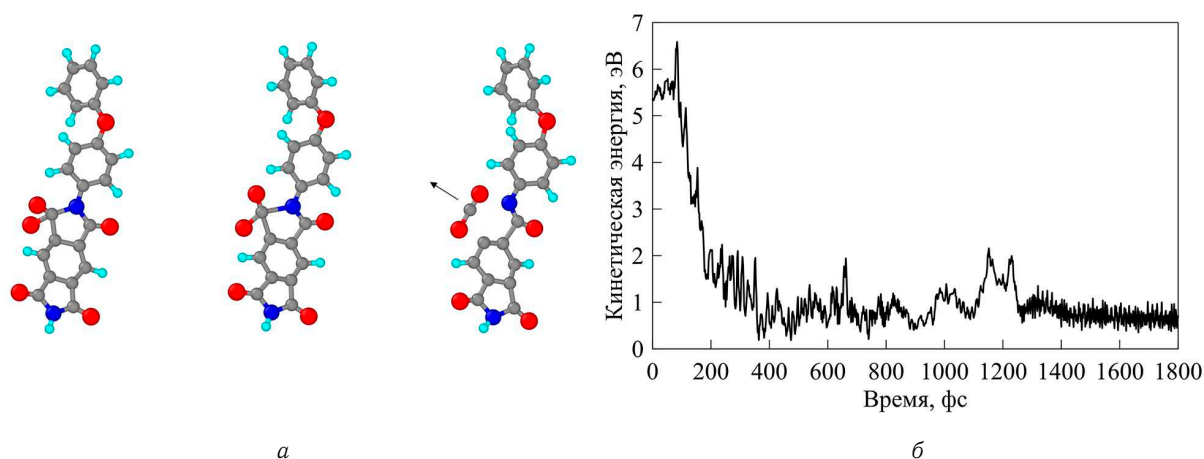


Рис. 8. Реакция с образованием молекулы CO_2 : *а* — различные стадии реакции; *б* — зависимость полной кинетической энергии молекулы CO_2 от времени

ществует в течение ~ 1200 фс после непосредственного сближения атома О с полиимидным звеном. Иницированные атомом О колебания двойной связи $\text{C}=\text{O}$ и соседних с ней связей приводят в определенный момент времени к разрыву связей $\text{C}-\text{C}$ и $\text{C}-\text{N}$, разрушению активированного комплекса и вылету молекулы CO_2 . Средняя кинетическая энергия образовавшейся молекулы в этом случае составила ~ 0.7 эВ. Полученные в результате моделирования методом DFTB величины кинетической энергии для реакций с образованием молекулы CO_2 — 0.7–2.5 эВ, длительность процесса 150–500 фс. Таким образом, и в этом случае метод МД позволил обнаружить более длительные реакции.

Следует отметить, что в приведенных временных зависимостях кинетической энергии отделившегося продукта реакции величина полной энергии представляет собой сумму энергий поступательного, колебательного и вращательного движений, поэтому на графиках хорошо видны изменения кинетической энергии за счет вращения радикала или молекулы и колебаний связей. Образовавшиеся молекулы OH , CO и CO_2 имеют достаточно высокую энергию и находятся в возбужденном состоянии, поэтому могут инициировать дальнейшие реакции.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами DFTB и МД рассчитаны времена протекания реакций взаимодействия сверхтепловых атомов кислорода с полиимидом в условиях эксплуатации материалов в околоземном космическом пространстве. Показано, что моделирование методом МД позволяет воспроизвести механизмы основных процессов взаимодействия сверхтепловых атомов кислорода с полиимидом и их характеристики (в первую очередь энергия вылетающих частиц и время реакции), получаемые при расчетах методом DFTB.

Метод МД позволяет исследовать более длительные реакции, приводящие к уносу массы полимера. Важно отметить, что при моделировании методом МД полимер был достаточно свободным и мог вращаться, что могло повлиять на результаты. Следующим шагом будет аналогичное моделирование для нескольких расположенных рядом звеньев.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-13-00244. Часть расчетов выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [20].

[1] COSPAR International Reference Atmosphere (CIRA-2012). Version: 1.0. 2012.
 [2] Minton T.K., Garton D.J. // *Advanced Series in Physical Chemistry Chemical Dynamics in Extreme Environments*. **11**, 420. (2001).
 [3] Novikov L.S. // *Radiation Measurements*. **30**, N 5. 661. (1999).
 [4] Воронина Е.Н. // *ЯФ*. **74**, № 11. 1649. (2011).
 [5] Engineering plastics handbook. Margolis J. M. (ed.). McGraw-Hill Handbooks, 2001.

[6] Новиков Л.С. // *Модель космоса*. Т. 2. Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. Под ред. Л.С. Новикова. М.: КДУ, 2007. С. 10.
 [7] Гужова С.К., Новиков Л.С., Черник В.Н., Скурат В.Е. // *Модель космоса*. Т. 2. Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. Под ред. Новикова Л.С. М.: КДУ, 2007. С. 171.
 [8] Metropolis N., Ulam S. // *Journal of the American Statistical Association*. **44**, N 247. 335. (1949).

- [9] *Chirskaya N., Samokhina M.* // WDS'12 Proceedings of Contributed Papers: Part III — Physics. Matfyzpress Prague. 2012. 30.
- [10] *Banks B.A., Miller S.K., Groh K.K., Demko R.* // Proceedings of the 9th International Symposium on Materials in a Space Environment, 16-20 June 2003, Noordwijk, The Netherlands, 2003. 145.
- [11] *Воронина Е.Н., Новиков Л.С.* // Физика и химия обработки материалов. № 6. 34. (2017).
- [12] *Martin R.M.* Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge, Cambridge University Press, 2004.
- [13] *Elstner M., Porezag D., Jungnickel G. et al.* // Phys. Rev. B. **58**, N. 11. 7260. (1998).
- [14] *Jensen F.* Introduction to computational chemistry. Wiley & Sons, 2007.
- [15] *Френкель Д., Смит Б.* Принципы компьютерного моделирования молекулярных системы. От алгоритмов к приложениям. М.: Научный мир, 2013.
- [16] *Tadmor E., Miller R.* Modeling materials: Continuum, atomistic and multiscale techniques. Cambridge University Press, 2011.
- [17] *Chenoweth K., van Duin A.C.T., Goddard W.A.* // J. Phys. Chem. A. **112**. 1040. (2008).
- [18] *van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A.* // The Journal of Physical Chemistry A. **105**, N. 41. 9396. (2001).
- [19] *Plimpton S.* // J. Comp. Phys. N 117. 1. (1995).
- [20] *Voevodin V.I., Antonov A., Nikitenko D. et al.* // Supercomputing Frontiers and Innovations. **6**, N 2. 4. (2019).

Model of polymer destruction under the action of superthermal atomic oxygen

N. Chirskaya^{1,a}, E.N. Voronina^{1,2,b}, L.S. Novikov^{1,c}

¹*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia*

²*Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^achirskaya.sinp@yandex.ru, ^bvoroninaen@nsrd.sinp.msu.ru, ^cnovikov@sinp.msu

This work examines existing approaches to simulation of polymer materials destruction processes under the action of superthermal oxygen atoms with respect to the conditions of the near-Earth space. The parameters of the reactions between hyperthermal oxygen atoms and a polyimide monomer, leading to the formation of volatile products such as CO₂, CO and OH have been calculated using the density functional based tight-binding (DFTB) method and molecular dynamics method. The parameters obtained with two methods were compared.

PACS: 94.05.-a; 07.05.Tr.

Keywords: atomic oxygen, mathematical modeling, polymer materials, interaction, erosion.

Received 22 December 2023.

Сведения об авторах

1. Чирская Наталья Павловна — канд. физ.-мат. наук, науч. сотрудник; тел.: (495) 939-31-92, e-mail: chirskaya.sinp@yandex.ru.
2. Воронина Екатерина Николаевна — доктор физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-14-90, e-mail: voroninaen@nsrd.sinp.msu.ru.
3. Новиков Лев Симонович — доктор физ.-мат. наук, профессор, гл. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-10-07, e-mail: novikov@sinp.msu.ru.