

文章编号: 1006-9941(2007)04-0370-04

叠氮粘合剂与硝酸酯溶度参数的分子动力学模拟

李 倩, 姚维尚, 谭惠民

(北京理工大学材料科学与工程学院, 北京 100081)

摘要: 为了预测叠氮粘合剂与硝酸酯的混溶性, 采用分子动力学模拟方法对不同软段、硬段组成的叠氮聚醚热塑性弹性体以及硝酸酯的内聚能密度和溶度参数进行了模拟计算, 结果表明: 叠氮预聚物和叠氮粘合剂与硝化乙二醇(DEGDN)、硝化三乙二醇(TEGDN) 的混溶性比硝化甘油(NG)、1,2,4-丁三醇三硝酸酯(BTTN) 及 NG + DEGDN 混合溶液的混溶性好; 叠氮预聚物中, PAMCMO 与各种硝酸酯的混溶性明显优于 GAP、BAMO、AMMO; 虽然引入了硬段使三种叠氮粘合剂比其预聚物的溶度参数有所提高, 但计算的几种叠氮粘合剂与硝酸酯的混溶性仍不太理想; 在叠氮预聚物中引入改善力学性能的四氢呋喃链段时, 其与硝酸酯的混溶性明显低于以叠氮均聚物为软段的聚氨酯粘合剂。

关键词: 物理化学; 叠氮粘合剂; 内聚能密度; 溶度参数; 分子动力学模拟

中图分类号: O642; TB324

文献标识码: A

1 引 言

叠氮粘合剂具备高能量、高密度和低敏感度等特点, 而且燃烧快、燃气污染小、成气量大, 特别适合用于少烟、无烟推进剂中作粘合剂。叠氮粘合剂与硝酸酯增塑剂必须具有良好的混溶性^[1], 才能保证叠氮推进剂具有上述优异性能。研究高聚物与低分子溶剂的混溶性方法较多, 溶度参数是其中较为简便的表征参数。

溶度参数对了解、判断聚合物-聚合物体系的相容性和聚合物-溶剂(包括增塑剂、增粘剂等)体系的溶解性、相溶性时具有十分重要的参考价值。

聚合物不同于低分子化合物, 因无气化热, 故其溶度参数的测定都是间接的, 例如溶胀法、粘度法等静态方法或通过理论推算^[2], 但这些方法或费时费料或存在某些局限性, 因此采用计算机模拟研究非常必要。计算机模拟在分子动力学领域中的应用已经发展到一个崭新的阶段, 不仅能提供定性的描述, 而且能模拟出高分子体系的一些结构与性能的定量结果。已有文献报道应用分子动力学模拟有机溶剂的溶度参数^[3], 但关于聚合物溶度参数的计算机模拟尚未见公开报道。本研究采用分子动力学模拟方法对新型叠氮聚醚预聚物、叠氮聚醚粘合剂及硝酸酯的内聚能密度、溶度参数进行了模拟计算, 可为叠氮粘合剂在固体推进剂中的应用提供参考。

2 物理模型和模拟方法

2.1 物理模型

运用分子模拟软件 Materials Studio 4.0 中的 Visualizer 模块, 搭建叠氮预聚物缩水甘油叠氮聚醚(GAP)、双叠氮甲基氧杂环丁烷(BAMO)、叠氮甲基-3-甲基氧杂环丁烷(AMMO)、3-叠氮甲基-3-氰乙氧基甲基氧丁环(AMCMO)的分子模型以及“叠氮预聚体-异氰酸酯-扩链剂”型的线性叠氮聚氨酯热塑性弹性体分子模型, 其中叠氮预聚体分别采用均聚物 GAP、BAMO、AMMO 及其以 50/50 比例与 THF(四氢呋喃)的共聚物, 异氰酸酯分别采用 4,4'-二苯基甲烷二异氰酸酯(MDI)、甲苯二异氰酸酯(TDI)、异佛尔酮二异氰酸酯(IPDI), 扩链剂均采用 1,4-丁二醇(BDO); 搭建的硝酸酯分子模型包括硝化甘油(NG)、硝化乙二醇(DEGDN)、硝化三乙二醇(TEGDN)、1,2,4-丁三醇三硝酸酯(BTTN) 及 NG 与 DEGDN 混合摩尔比为 1: 1 的混合硝酸酯。

选择专门对 $-ONO_2$ 做过高度精度量子力学处理的 COMPASS 力场, 将搭建好的分子模型在 COMPASS 力场下进行充分的结构优化, 其中 Summation method 采取 Atom Based 方法, cutoff distance(非键截断宽度)取 9.50\AA , Spline Width 取 1.00\AA , Buffer Width(缓冲宽度)取 0.50\AA 。优化后的结构利用 Amorphous Cell 模块的 Construction 搭建无定形结构单元。由于高分子构型的多样性, 结合本文研究体系的特点, 得到 10 个构型不同的 amorphous cell。图 1、图 2 分别为叠氮粘合剂分子、硝酸酯分子的其中某一构型的无定形结构单元。

收稿日期: 2007-03-06; 修回日期: 2007-06-18

作者简介: 李倩(1981-), 女, 硕士生, 研究方向为新型叠氮粘合剂的分子模拟。e-mail: liqian@bit.edu.cn

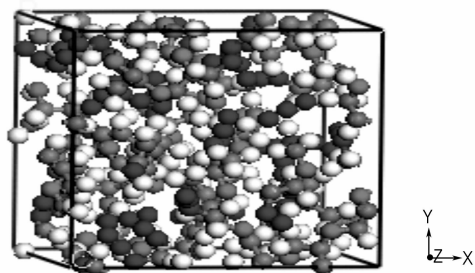


图1 GAP/MDI/BDO 模型

Fig.1 The model of GAP/MDI/BDO

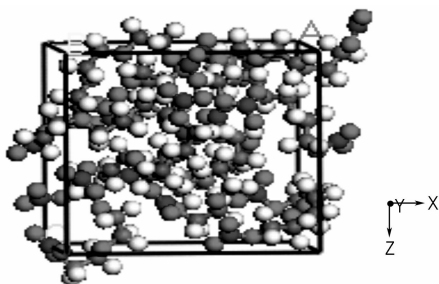


图2 TEGDN 模型

Fig.2 The model of TEGDN

2.2 MD 模拟方法

将无定形结构单元在 COMPASS 力场下进行分子动力学(MD)模拟。首先对搭建的 amorphous cell 通过 NPT 系综平衡对模型进行密度优化,以接近实际的密度值;然后选取 NVT 系综,在真空条件下,采用 Anderson 恒温器,温度为 298 K,时间步长为 1 fs,总模拟步长为 30 万步,其中前 10 万步用于平衡,后 20 万步用于统计分析,每 100 步记录一次轨迹文件。判别模拟达到平衡的标准有两个:一是温度平衡,温度变化的标准偏差应小于 5% (如图 3 所示);二是能量平衡,能量恒定或沿恒定值上下波动较小(如图 4 所示)。针对平衡后的无定形结构,以 Amorphous Cell 模块中的 Analysis 对轨迹进行分析,通过计算即可获得体系的内聚能密度及溶度参数值。分别对所得 10 个构型的 amorphous cell 进行内聚能密度、溶度参数分子动力学模拟,所得叠氮聚氨酯粘合剂及硝酸酯的内聚能密度、溶度参数即为这十个无定形单元计算结果的平均值。

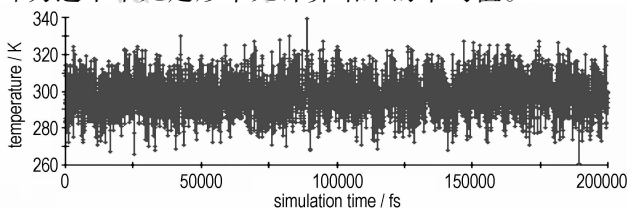


图3 温度随时间变化的平衡曲线

Fig.3 The balance of temperature vs. simulation time

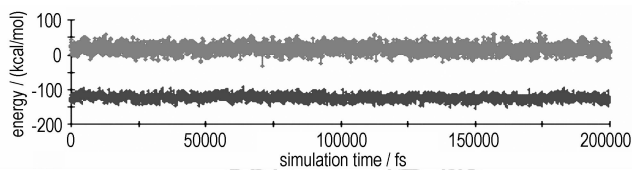


图4 能量随时间变化的平衡曲线

Fig.4 The balance of energy vs simulation time

3 计算结果与讨论

计算所得叠氮均聚物的内聚能密度(CED)及溶度参数值(δ)见表1,为了比较同时给出文献值 δ' 。由表1可见,分子动力学模拟的结果与文献报道值吻合较好,说明该分子动力学方法可用于本文体系的溶度参数的定量计算。比较表1中各均聚物的溶度参数,其大小顺序为: PAMCMO > GAP > BAMO > AMMO。PAMCMO 结构中氰乙基的引入有效的提高了其溶度参数^[4],而 AMMO 中叠氮对位上的甲基虽然提高了其力学性能^[5],却减弱了分子间作用力,降低了它的溶度参数值。

表1 叠氮预聚物的内聚能密度和溶度参数

Table 1 Cohesive energy density and solubility parameter of azide prepolymer

plasticizer	CED/($10^8 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3}$)	$\delta/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$	$\delta'/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$
GAP	3.27	18.08	18 ~ 18.8 ^[5]
BAMO	3.16	18.02	18.13 ^[4]
AMMO	2.93	17.11	-
PAMCMO	5.23	22.85	23.45 ^[4]

由于聚氨酯组成与配方上的多样性,不同的组成和配方得到的 CED 和 δ 都有所变化,表2为不同软段、硬段的叠氮热塑性弹性体的内聚能密度(CED)及溶度参数值(δ),其中叠氮预聚体/二异氰酸酯/丁二醇的摩尔比为 1/2/1。

由表2中的三组数据可见,聚氨酯体系的溶度参数随着组成的软段和硬段成分的不同,发生了相应的变化:当硬段相同时,AMMO 中叠氮对位上非极性的甲基减弱了分子间作用力,使其溶度参数小于 GAP 和 BAMO,故由软段不同引起的溶度参数的大小顺序为: I > II > III,且以叠氮聚醚类化合物与四氢呋喃的共聚物作为软段时,表2中的 I₄、II₄、III₄ 的溶度参数有明显的减小,这是由于非极性基团的引入,使热塑性聚氨酯弹性体的溶度参数减小,导致聚氨酯与硝酸酯的相容性变差,这与文献得到的结论^[4,6,7]一致;当软段相同时,分别将 I、II、III 组中的异氰酸酯部分由极性

的苯环结构(MDI、TDI)变化为非极性的脂环结构(IPDI),随着异氰酸酯极性的减弱,叠氮热塑性聚氨酯弹性体的 δ 出现逐渐减小的趋势,即由异氰酸酯变化引起的溶度参数的大小顺序为:MDI>TDI>IPDI。

表 2 叠氮热塑性弹性体的内聚能密度和溶度参数

Table 2 Cohesive energy density and solubility parameter of azide thermoplastic elastomers

No	TPE	CED $/(10^8 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3})$	δ $/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$
I ₁	GAP/MDI/BDO	4.05	20.11
I ₂	GAP/TDI/BDO	4.04	20.09
I ₃	GAP/IPDI/BDO	3.37	18.36
I ₄	GAP-THF/IPDI/BDO	3.25	18.03
II ₁	BAMO/MDI/BDO	3.87	19.64
II ₂	BAMO/TDI/BDO	3.76	19.39
II ₃	BAMO/IPDI/BDO	3.27	18.09
II ₄	BAMO-THF/IPDI/BDO	2.89	17.01
III ₁	AMMO/MDI/BDO	3.76	19.39
III ₂	AMMO/TDI/BDO	3.67	19.16
III ₃	AMMO/IPDI/BDO	3.08	17.54
III ₄	AMMO-THF/IPDI/BDO	2.90	17.04

表 3 硝酸酯增塑剂的内聚能密度和溶度参数

Table 3 Cohesive energy density and solubility parameter of nitrate ester plasticizers

plasticizer	CED $/(10^8 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3})$	δ $/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$	δ^* $/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$	δ'' $/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$
NG	7.5864	27.54	31.14	23.16 ^[9] /24.04 ^[10]
BTTN	6.92	26.30	28.99	23.42 ^[10]
DEGDN	6.0718	24.64	25.44	21.52 ^[9]
TEGDN	6.0526	24.60	24.29	21.31 ^[9]
NG + DEGDN	6.9126	26.29	28.29	-

Note: δ^* is estimated with method of Hoftzyer-Krevelen (1976) by the related formulation of reference [8]. NG: nitroglycerin. DEGDN: diethyleneglycol dinitrate. TEGDN: triethyleneglycol dinitrate. BTTN: 1,2,4-butanetrioltrinitrate.

表 3 列举了常用硝酸酯的溶度参数值,其中 δ 为本文分子动力学模拟结果, δ^* 为应用文献^[8]中的Hoftzyer-Krevelen (1976)方法的估算结果, δ'' 为文献^[9,10]中采用不同估算方法的计算结果(其中文献^[9]采用 P. A. Small 方法,文献^[10]采用 Fedors R. F (1974)方法)。对于一些不常用溶剂的溶度参数人们经常采用的方法就是采用基团加合法进行估算,但是从表 3 中的 δ^* 和 δ'' 可以看出,采用不同的计算方法,所得的溶度参数会有差距,这就给通过溶度参数判断相容性带来了一定的困难。但分析表 3 中的数据可以看出,无论采用什么计算方法,所得到的硝酸酯溶度参

数的大小顺序是不变的,即 NG > BTTN > DEGDN > TEGDN,只是采用的参数或拆分方式不同。而采用分子动力学模拟的方法,通过计算机软件,以原子水平的分子模型来模拟分子的静态结构与动态行为,进而模拟聚合物分子及溶剂体系的各种物理与化学性质,可以获得较为合理的结果^[11]。对于硝酸酯溶度参数的计算与聚氨酯溶度参数的计算是在同一力场、同样的力场参数、动力学方程下进行的,故可以实现相对考察溶度参数的目的。

由高分子物理的相关内容可知^[12],若聚合物和溶剂的溶度参数分别表示为 δ_p 和 δ_s ,则根据 Hildebrand 和 Scatchard 的论点,混合热可由下式得出

$$\Delta H_{\text{mix}} = V_s (\delta_s - \delta_p)^2 v_p^2$$

式中, V_s 为溶剂的摩尔体积, δ_p 为聚合物的摩尔体积。根据这一公式,聚合物与溶剂的混合程度取决于 δ_p 和 δ_s 的差值,若二者越接近,则 ΔH_{mix} 越小,聚合物与溶剂越能相互溶解。根据表 1~3 中计算出的叠氮粘合剂与硝酸酯的溶度参数值,可以求出差值 $\Delta\delta$ 。由 $\Delta\delta$ 即可对叠氮均聚物、叠氮粘合剂与硝酸酯的混溶性进行判断。表 4 即为计算的不同叠氮均聚物、叠氮粘合剂与硝酸酯之间的溶度参数差 $\Delta\delta$ 。

表 4 不同叠氮均聚物、叠氮粘合剂与硝酸酯之间的溶度参数差

Table 4 Difference of solubility parameters between nitrate ester plasticizers and azide binders

plasticizer	$\Delta\delta/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{0.5}$				
	NG	BTTN	DEGDN	TEGDN	NG + DEGDN
GAP	9.46	8.22	6.56	6.52	8.21
BAMO	9.52	8.28	6.62	6.58	8.27
AMMO	10.43	9.19	7.53	7.49	9.18
PAMCMO	4.69	3.45	1.79	1.75	3.44
GAP/MDI/BDO	7.43	6.19	4.53	4.49	6.18
GAP/TDI/BDO	7.45	6.21	4.55	4.51	6.20
GAP/IPDI/BDO	9.18	7.94	6.28	6.24	7.93
GAP-THF/IPDI/BDO	9.51	8.27	6.61	6.57	8.26
BAMO/MDI/BDO	7.9	6.66	5	4.96	6.65
BAMO/TDI/BDO	8.15	6.91	5.25	5.21	6.9
BAMO/IPDI/BDO	9.45	8.21	6.55	6.51	8.2
BAMO-THF/IPDI/BDO	10.53	9.29	7.63	7.59	9.28
AMMO/MDI/BDO	8.18	6.91	5.25	5.21	6.9
AMMO/TDI/BDO	8.38	7.14	5.48	5.44	7.13
AMMO/IPDI/BDO	10	8.76	7.1	7.06	8.75
AMMO-THF/IPDI/BDO	10.5	9.26	7.6	7.56	9.25

由表 4 可初步得出如下结论:叠氮预聚物和叠氮粘合剂与 DEGDN、TEGDN 的混溶性比 NG、BTTN 及 NG + DEGDN 混合溶液的混溶性好;叠氮预聚物中,引入极性基团氰乙基的 PAMCMO 与各种硝酸酯的混

溶性明显优于另外三种;虽然引入极性基团(硬段)三种叠氮粘合剂比其预聚物的溶度参数有所提高,但本文计算的几种叠氮粘合剂与硝酸酯的混溶性仍不太理想与文献^[4]结论一致;而在叠氮预聚物中引入改善力学性能的四氢呋喃链段时,其与硝酸酯的混溶性明显低于以叠氮均聚物为软段的聚氨酯粘合剂。

综合表1~4的数据可以看出,选择不同种类及含量的软段、硬段后,可使叠氮热塑性聚氨酯弹性体的溶度参数发生变化,导致与硝酸酯增塑剂的混溶性改变,从而影响推进剂整体性能的提高。而在判断叠氮热塑性聚氨酯弹性体与硝酸酯等含能增塑剂的混溶性时,通过分子模拟法进行研究,具有简单、快速、准确的优点,可以为新型的固体推进剂粘合剂的分子设计提供参考意见。

4 结论

(1) 各均聚物的溶度参数,其大小顺序为:PAMCMO > GAP > BAMO > AMMO。PAMCMO 结构中氰乙基的引入有效的提高了其溶度参数,而 AMMO 中叠氮对位上的甲基减弱了分子间作用力,降低了它的溶度参数值。

(2) 当硬段相同时,由软段不同引起的溶度参数的大小顺序为: I > II > III,且以叠氮聚醚类化合物与四氢呋喃的共聚物作为软段时,其溶度参数有明显的减小,可能导致聚氨酯与硝酸酯的混溶性减弱;当软段相同时,分别将 I、II、III组中的异氰酸酯部分由极性的苯环结构(MDI、TDI)变化为非极性的脂环结构(IPDI),随着异氰酸酯极性的减弱,叠氮热塑性聚氨酯弹性体的 δ 出现逐渐减小的趋势,即由异氰酸酯变化引起的溶度参数的大小顺序为:MDI > TDI > IPDI。

(3) 叠氮预聚物和叠氮粘合剂与 DEGDN、TEGDN 的混溶性比 NG、BTTN 及 NG + DEGDN 混合溶液的混溶性好;叠氮预聚物中,PAMCMO 与各种硝酸酯的混溶性明显优于另外三种;虽然引入硬段后三种叠氮粘合剂比其预聚物的溶度参数有所提高,但本文计算的几种叠氮粘合剂与硝酸酯的混溶性仍不太理想;当叠氮预聚物中引入改善力学性能的四氢呋喃链段时,其与硝酸酯的混溶性明显低于以叠氮均聚物为软段的聚氨酯粘合剂。

参考文献:

[1] 姜志荣,杜磊. 理想固体推进剂粘合剂的分子结构[J]. 固体火箭技术, 1993,3(1): 70-80.

JIANG Zhi-rong, DU Lei. Ideal molecular structure of solid propellant

binders [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 1993, 3(1): 70-80.

- [2] 蔡振云,侯虞钧. 用 Flory 溶液理论推算聚合物的溶度参数[J]. 石油化工,1991,20: 416-421.
CAI Zhen-yun, HOU Yu-jun. Determination of polymer solubility parameter by flory solution theory [J]. *Journal of Petroleum and Chemical Industry*, 1991, 20: 416-421.
- [3] 夏庆,殷开梁. 分子动力学模拟计算有机溶剂的溶解度参数[J]. 江苏工业学院学报,2004,16(1): 40-42.
XIA Qing, YIN Kai-liang. Calculation of solubility parameters of organic solvents by molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Jiangsu Polytechnic University*, 2004, 16(1): 40-42.
- [4] 甘孝贤,邢颖,李娜,等. 3-叠氮甲基-3-氰乙氧基甲基氧丁环均聚物的合成与性能[J]. 火炸药学报,2004,27(4): 10-13.
GAN Xiao-xian, XING Ying, LI Na, et al. Synthesis and properties of 3-azidomethyl-3-cyanoethoxymethyloxetane polymer [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2004, 27(4): 10-13.
- [5] 胡中波,甘孝贤. 以取代氧丁环为母体制备含能粘合剂[J]. 含能材料,2004,12(1): 62-64.
HU Zhong-bo, GAN Xiao-xian. Synthesis of energetic binders from substituted oxetanes [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Han-neng Cailiao)*, 2004, 12(1): 62-64.
- [6] 曹一林,张九轩. 四氢呋喃共聚型 GAP 粘合剂研究[J]. 固体火箭技术,1997,20(1): 45-50.
CAO Yi-lin, ZHANG Jiu-xuan. Study on the tetrahydrofuran copolymerized GAP binder [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 1997, 20(1): 45-50.
- [7] 邓剑如,王亚,张玉亭. 高分子溶液理论在固体推进剂中的应用[J]. 推进技术,1996,17(6): 78-82.
DENG Jian-ru, WANG Ya, ZHANG Yu-ting. An application of polymer solution theory to solid propellants [J]. *Journal of propulsion technology*, 1996, 17(6): 78-82.
- [8] D W Van Krevelen. Properties of polymers [M]. New York: Elsevier Science Publishing Company INC, 1990: 189-219.
- [9] 任玉立,陈少镇. 关于硝化纤维素浓溶液的研究—体系溶度参数与相溶性[J]. 火炸药学报,1981,(1): 9-16.
REN Yu-li, CHEN Shao-zhen. Study on concentrated solution of nitrocellulose-solubility parameters and system compatibility [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 1981, (1): 9-16.
- [10] 王北海. NEPE 推进剂用中性聚合物键合剂的分子设计[J]. 固体火箭技术,1994,(3): 47-53.
WANG Bei-hai. Molecular design of neutral polymeric bonding agent for NEPE propellants [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 1994, (3): 47-53.
- [11] 杨小震. 分子模拟与高分子材料 [M]. 北京: 科学出版社,2002: 1-10.
- [12] 何曼君,陈维孝,董西侠. 高分子物理 [M]. 上海: 复旦大学出版社,1990: 114-120.
- [13] 山西省化工研究所. 聚氨酯弹性体手册 [M]. 北京: 化学工业出版社,2001: 105-119.

(下转 377 页)

Effects of Fast-burning Energetic Compound ACP and Coated ACP on Combustion Properties of High Burning Rate CMDB

RAN Xiu-lun¹, YANG Rong-jie¹, ZHANG Xiao-hong²

(1. College of Materials Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: For better combustion performance of high burning rate composite modified double base (CMDB) propellant with ACP, a novel fast-burning energetic coordination compound of copper(II) salt with one of triazole derivatives, ACP particles were coated with polyurethane adhesive. The thermal decomposition behaviors of ACP and coated ACP were studied by thermogravimetry (TG), and their effects on combustion performance of CMDB propellant in the pressure region of 11 – 20.5 MPa (high pressure range) and 3 – 9 MPa (low pressure range) were comparatively studied. Experimental results show that the thermal decomposition process of ACP or coated ACP includes four phases, and total loss of weight after decomposition are 90.70% and 76.22%, respectively. ACP and coated ACP are effective to enhance burning rates under low and high pressure and have about the same increments, and led to burning rate exponents enhancement under low pressure but reduction under high pressure. The propellants containing coated ACP show about 0.1 decrease in burning rate pressure exponent under high and low pressure in comparison with that of containing uncoated ACP with the same content in propellant. The experimental results indicate that the coating agent on the surface of ACP particles plays an important role in the thermal decomposition behaviors of ACP and affects combustion properties of propellants.

Key words: applied chemistry; fast-burning energetic compound; composite modified double base propellant; high burning rate propellant; combustion performance; thermal decomposition behavior

(上接 373 页)

Molecular Dynamics Simulation of Solubility Parameter of Azide Binders and Nitrate Ester

LI Qian, YAO Wei-shang, TAN Hui-min

(School of Materials Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: Cohesive energy density and solubility parameter of nitrate ester plasticizers, azide prepolymer and azide thermoplastic elastomers which consisted of different soft segment and hard segment were calculated respectively by molecular dynamics simulation method. The results show that the miscibility of azide prepolymer or azide thermoplastic elastomer with diethyl-ene glycol dinitrate (DEGDN), triethyleneglycol dinitrate (TEGDN) is better than that with (nitroglycerin) NG, (1,2,4-butanetrioltrinitrate) BTTN or NG + DEGDN; and PAMCMO shows much better miscibility with nitrate ester plasticizer than GAP, BAMO, AMMO. Although the solubility parameter of azide thermoplastic elastomers calculated is higher than that of prepolymer, the miscibility is still not well. The homopolymer of azide prepolymer show better miscibility with nitrate ester plasticizers than their copolymer with THF.

Key words: physical chemistry; azide binder; cohesive energy density; solubility parameter; molecular dynamics simulation