

引用信息: HUANG Yu-Cheng; HU Ying-Jie; XIAO Ji-Jun; YIN Kai-Liang; XIAO He-Ming. Acta Phys. -Chim. Sin., 2005, 21(04): 425-429 [黄玉成; 胡应杰; 肖继军; 殷开梁; 肖鹤鸣. 物理化学学报, 2005, 21(04): 425-429]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

TATB基PBX结合能的分子动力学模拟

黄玉成; 胡应杰; 肖继军; 殷开梁; 肖鹤鸣

南京理工大学化工学院, 南京 210094; 南京晓庄学院化学系, 南京 210017; 江苏工业学院化工系, 常州 213016

摘要:

用分子动力学(MD)方法, 模拟计算了四种氟聚合物(聚偏二氟乙烯(PVDF)、聚三氟氯乙烯(PCTFE)、氟橡胶(F_{2311})、氟树脂(F_{2314}))与TATB(1,3,5-三氨基-2,4,6-三硝基苯)晶体的相互作用. 结果发现, 四种氟聚合物与TATB的结合能大小排序为PVDF> F_{2311} > F_{2314} >PCTFE, 各氟聚合物在TATB不同晶面上的结合能大小排序为(001)>(010)>(100), 结合能主要由分子间氢键决定.

关键词: TATB 高聚物粘结炸药(PBX) 结合能 分子动力学

收稿日期 2004-08-20 修回日期 2004-10-09 网络版发布日期 2005-04-15

通讯作者: 肖鹤鸣 Email: xiao@mail.njust.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(826KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ TATB

▶ 高聚物粘结炸药(PBX)

▶ 结合能

▶ 分子动力学

本文作者相关文章

▶ 黄玉成

▶ 胡应杰

▶ 肖继军

▶ 殷开梁

▶ 肖鹤鸣