

## 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

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