

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2021.06.002

# 含能增塑剂 Bu-NENA 与黏结剂共混体系的介观动力学模拟<sup>\*</sup>

高 杰 金大勇 郭 昕 牛 磊  
西安近代化学研究所(陕西西安,710065)

[摘 要] 采用介观动力学(MesoDyn)模拟方法对比研究了含能增塑剂丁基硝氧乙基硝胺(Bu-NENA)与端羟基聚醚(HTPE)、聚叠氮缩水甘油醚(GAP)共混体系的相结构及其相演变过程和影响因素,用共混实验对 Bu-NENA 与 HTPE、GAP 的相容性进行了观察。模拟结果表明:Bu-NENA 与 HTPE、GAP 均具有较好的混溶性,且 Bu-NENA 与 HTPE 的混溶性优于 Bu-NENA 与 GAP,与混溶性实验的结果一致。25 ℃ 条件下,HTPE/Bu-NENA 混合体系中 Bu-NENA 质量分数在 50% 以下时,HTPE 和 Bu-NENA 混溶性较好;GAP/Bu-NENA 混合体系中 Bu-NENA 质量分数在 50% 时,GAP 和 Bu-NENA 的混溶性较其他比例时差。但在 GAP/Bu-NENA 混合体系中,GAP 和 Bu-NENA 的有序度参数  $P$  均较小,接近于 0, GAP/Bu-NENA 混合体系混溶性良好;Bu-NENA 的质量分数对 GAP/Bu-NENA 混合体系混溶性影响不大。

[关键词] 物理化学;Bu-NENA;HTPE;GAP;相结构;介观动力学模拟

[分类号] TJ55

## Mesoscopic Dynamics Simulation of Blends of Energetic Plasticizer Bu-NENA and Binder

GAO Jie, JIN Dayong, GUO Xin, NIU Lei  
Xi'an Modern Chemistry Research Institute (Shaanxi Xi'an, 710065)

[ABSTRACT] Phase structure, evolution process and influence factors of blends of energetic plasticizer Bu-NENA, and HTPE or GAP were studied by mesoscopic dynamics simulation (MesoDyn). Compatibility of Bu-NENA and HTPE or GAP was observed by blending test. Simulation results show that Bu-NENA has good miscibility with HTPE or GAP, and the miscibility of Bu-NENA and HTPE is better than that of Bu-NENA and GAP, which is consistent with the results of miscibility test. When mass fraction of Bu-NENA in HTPE/Bu-NENA blends is less than 50% at 25 ℃, the miscibility of HTPE and Bu-NENA is better. When mass fraction of Bu-NENA in GAP/Bu-NENA blends is 50% at 25 ℃, the miscibility of GAP and Bu-NENA is lower than that of other proportions. However, in GAP/Bu-NENA mixed system, the order parameter  $P$  of GAP or Bu-NENA is small and close to zero, and the miscibility of GAP/Bu-NENA blend system is good. Mass fraction of Bu-NENA has little effect on the miscibility of Gap/Bu-NENA blend system.

[KEYWORDS] physical chemistry; Bu-NENA; HTPE; GAP; phase structure; mesoscopic dynamics simulation

### 引言

高聚物黏结炸药(PBX)是由高分子黏结剂、主体炸药及燃料等组成的一类炸药,其力学性能和感度性能优异,能量水平可控;因此,近年来在国内外武器弹药中得到了广泛的应用<sup>[1-3]</sup>。增塑剂是 PBX

炸药配方中的关键组分,可以有效地改善火炸药产品的使用温度范围、改进工艺性能、降低易损性等。目前,浇注PBX炸药中广泛使用的己二酸二辛酯(DOA)、癸二酸二辛酯(DOS)等均为惰性增塑剂,严重影响了混合炸药的能量水平。为了提高PBX炸药的能量,降低炸药中的惰性组分含量是一个重要途径,利用含能增塑剂取代惰性增塑剂是近年来

<sup>\*</sup> 收稿日期:2021-03-09  
基金项目:国防重大专项  
第一作者:高杰(1986 - ),男,副研究员,主要从事炸药配方及装药技术研究。E-mail:njustgj@sina.com

火炸药研究的热点<sup>[4-6]</sup>。研究发现,硝氧乙基硝胺类含能增塑剂丁基硝氧乙基硝胺(Bu-NENA)具有熔点低、塑化性能优良、感度低、安定性好及相容性好的特点,是一种极好的耐低温增塑剂,可在发射药、推进剂及炸药中应用<sup>[7]</sup>。

含能增塑剂与高分子材料之间良好的互溶性是黏结剂体系应用的前提。黏结剂体系从结构上可视为高分子溶液,高分子的种类、与增塑剂的配比等因素均对黏结剂体系相结构的稳定性有一定的影响,但目前很难通过实验的方法对黏结剂体系的相结构以及各组分相演变的动态过程进行认识。随着计算机技术的发展和模拟计算方法在材料科学研究中的广泛应用,利用介观动力学(MesDyn)对高分子与增塑剂体系的介观形貌、组分间的相互作用和相分离等问题进行模拟已成为科研工作者开展高分子黏结剂体系混溶性研究的重要手段<sup>[8-9]</sup>。

本研究中,采用 MesDyn 模拟计算方法对 Bu-NENA 与端羟基聚醚(HTPE)、聚叠氮缩水甘油醚(GAP)共混体系相结构、相演变过程及影响因素进行了对比分析,可为含能增塑剂 Bu-NENA 在浇注 PBX 炸药中的应用提供技术参考。

## 1 实验部分

### 1.1 试样

Bu-NENA,西安近代化学研究所;HTPE、GAP,黎明化工研究院。

### 1.2 实验方法

将 Bu-NENA 分别与 HTPE 和 GAP 混合均匀,配制成质量比分别为 70 : 30、60 : 40、50 : 50、40 : 60 和 30 : 70 的共混体系溶液,然后将其放入 25 ℃ 烘箱静置 60 d,观察共混体系溶液混溶情况。

## 2 分子动力学和介观动力学模拟

### 2.1 分子动力学模拟计算方法

依据 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的化学结构式(表 1),用 Materials Studio(MS)软件分别建立 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 纯物质模型。模型中,Bu-NENA 分子、HTPE 分子链和 GAP 分子链的数目分别为 40 个、3 条和 3 条。Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的无定形模型如图 1 所示。

表 1 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的分子结构

Tab. 1 Molecular structure of Bu-NENA, HTPE and GAP

化合物	结构
Bu-NENA	$\begin{array}{c} \text{O}_2\text{N}-\text{H}_2\text{C}-\text{H}_2\text{C}-\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\   \\ \text{NO}_2 \end{array}$
HTPE	$\text{HO}-(\text{CH}_2)_4-[\text{O}-(\text{CH}_2)_2-\text{O}-(\text{CH}_2)_4]_n-\text{OH}$
GAP	$\begin{array}{c} \text{H}-[\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}]_n-\text{OH} \\   \\ \text{CH}_2-\text{N}_3 \end{array}$

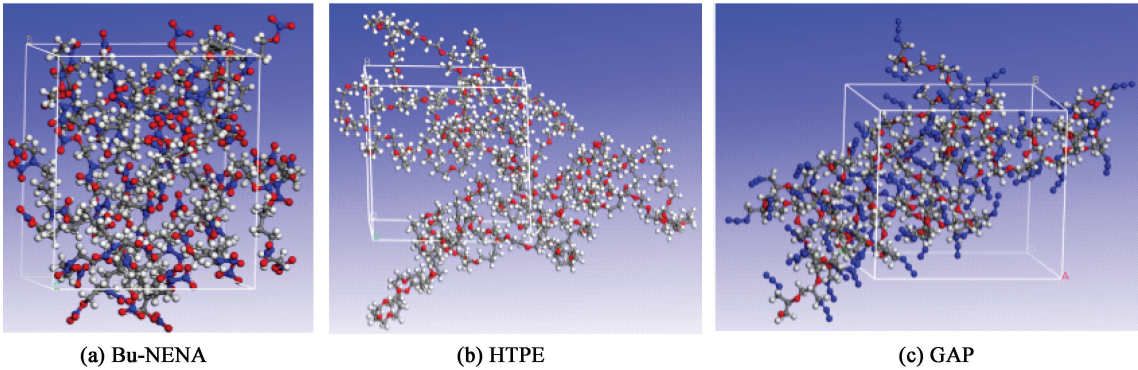


图 1 Bu-NENA、HTPE 及 GAP 的无定形模型  
Fig. 1 Amorphous models of Bu-NENA, HTPE and GAP

首先,采用 MS 软件 Forcite 计算模块中的 Geometry Optimization 方法,在 Compass 力场条件下对上述建立的纯物质无定形模型进行结构优化;然后通过 3 个循环的退火处理,将模型中不合理的结构消除,为下一步分子动力学(MD)计算提供合理的平衡构象。退火处理的条件为从 250 K 升温至 520 K,再降温至 250 K,温度间隔为 30 K。利用以上计算得到的平衡结构,在温度 25 ℃ 和压力  $1.01 \times 10^5$  Pa 条件下开展 MD 模拟。分子间范德华力的计算选用 Atom-Based 方法,截断半径 1.85 nm;静电作用力计算选用 Ewald 方法,精度  $4.18 \times 10^{-5}$  J/mol;控温和控压分别为 Andersen 和 Berendsen 方法;模拟计算的总时间为 1 000 ps,时间步长为 1 fs,采用 NPT 系综;模拟计算的前 500 ps 用于系统热力学平衡,后 500 ps 用于统计计算分析,得到密度  $\rho$ 、溶度参数  $\delta$  和摩尔体积  $V_M$  等数据。

2.2 介观动力学模拟计算方法

利用 MS 软件的 MesoDyn 模块对高分子与增塑剂的共混体系进行介观动力学模拟计算时,需要知道共混体系中纯物质的  $V_M$  和  $\delta$  等参数。这些参数由 MD 计算得到,计算的方法参考文献[9]。

结合以上参数,开展高分子黏结剂与 Bu-NENA 不同质量配比下的介观动力学模拟,获得混合体系的介观形貌,模拟的总时间为 1 000  $\mu$ s,计算步长为 20 ns。介观动力学计算的方法以及具体的参数设定参考文献[10]。

3 结果与讨论

3.1 互溶性实验结果分析

HTPE 与 Bu-NENA、GAP 与 Bu-NENA 共混体系互溶性实验的情况分别如图 2、图 3 所示。可以看出,实验前、后 HTPE 与 Bu-NENA、GAP 与 Bu-NENA 共混体系均未出现分层情况,说明 Bu-NENA 与 HTPE、GAP 均具有较好的物理相容性。

3.2 溶度参数与相互作用参数

经 MD 计算,得到温度为 298 K 时 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的  $\rho$ 、 $\delta$  和  $V_M$ ,如表 2 所示。由表 2 的数据可知,MD 计算得到的密度与实验值相差较小,表明 MD 模拟计算具有较好的准确性,模拟结果可在后续分析计算中使用。

溶度参数 $\delta$ 是评价黏结剂和增塑剂物理相容性的重要参数。研究表明,两者的溶度参数差值 $\Delta\delta$ 越小,物理相容性就越好。一般认为两者的 $\Delta\delta$ 只要满足  $|\Delta\delta| < 1.3 \sim 2.1 \text{ (J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$ ,两者就相

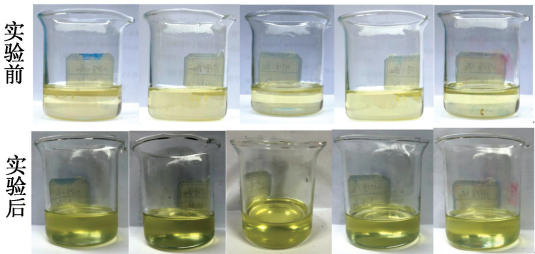


图 2 HTPE/Bu-NENA 混合体系实验前、后的样品状态  
Fig.2 Sample state of HTPE/Bu-NENA mixture before and after test

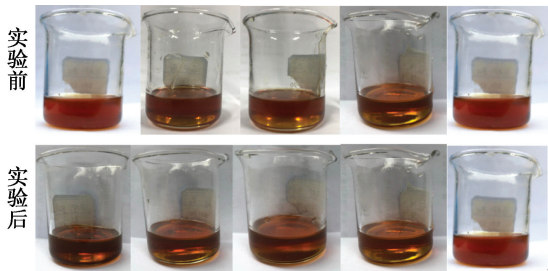


图 3 GAP/Bu-NENA 混合体系实验前、后的样品状态  
Fig.3 Sample state of GAP/Bu-NENA mixture before and after test

表 2 模拟所得 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的性质  
Tab.2 Properties of Bu-NENA, HTPE and GAP obtained by simulation

化合物	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$		$\delta/(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$	$V_M/(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})$
	实验值	模拟值		
Bu-NENA	1.21	1.19	20.77	174.84
HTPE	1.10	1.05	18.83	56.44
GAP	1.30	1.30	22.17	76.86

容<sup>[11]</sup>。  
由表 2 中数据计算得到  $|\Delta\delta|_{\text{HTPE/Bu-NENA}} = 1.94 \text{ (J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$ ,  $|\Delta\delta|_{\text{GAP/Bu-NENA}} = 1.40 \text{ (J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$ , 表明 Bu-NENA 与 HTPE、GAP 在室温条件下均具有良好的相容性。

在介观模拟中,为表征体系的化学性质,首先需要确定体系组分之间的相互作用参数  $v^{-1}\epsilon_{ij}$ 。Bu-NENA 与高分子黏结剂之间的  $v^{-1}\epsilon_{ij}$ ,需由分子动力学模拟得到的纯物质的  $\delta$  和  $V_M$  等参数计算得到。将表 2 中数据分别代入式(1),计算得到 Flory-Huggins 相互作用参数  $\chi$ <sup>[10]</sup>:

$$\chi = \frac{V_M(\delta_p - \delta_{\text{Bu-NENA}})^2}{RT}.$$

(1)

式中: $V_M$ 取高分子黏结剂和 Bu-NENA 的  $V_M$  的平均值; $R$ 为理想气体常数; $T$ 为绝对温度; $\delta_p$ 为高分子黏结剂的溶度参数。



MesoDyn 模拟输入的  $v^{-1}\varepsilon_{ij}$  参数通过  $\chi$  乘  $RT$  得到,计算得到的 Bu-NENA 与 HTPE、GAP 的  $v^{-1}\varepsilon_{ij}$  分别为 435.215 J/mol 和 554.999 J/mol。

3.3 分子高斯链结构

在介观动力学模拟中,除了相互作用参数外,需要得到 HTPE、GAP 分子链粗粒化后的高斯链结构模型。在高斯链结构模型中,分子结构中的若干个基团由体积相同的球状高斯链段(珠子)替代,高斯链段的个数(珠子个数)  $N_{\text{Mes}}$  由高分子链中重复单元个数  $N$  除以高分子链极限特征比  $C_{\infty}$  得到

$$N_{\text{Mes}} = \frac{N}{C_{\infty}} \tag{2}$$

研究中,HTPE 和 GAP 分子链中重复单元的个数分别为 51 和 30,通过定量结构性质关系(quantitative structure property relationship, QSPR)方法<sup>[9]</sup> 分别计算得到 HTPE、GAP 分子链的极限特征比为 5.6 和 5.3。

通过式(2)计算,得到可用 9 个珠子代替 HTPE 分子链,可用 6 个珠子替代 GAP 分子链。

高斯链的长度  $L_{\text{Mes}}$ 、高斯链段(珠子)长度  $L_{\text{mon}}$  和高分子链极限特征比  $C_{\infty}$  之间的关系为

$$L_{\text{Mes}} = L_{\text{mon}} \times C_{\infty} \tag{3}$$

通过 QSPR 计算方法,可以得到 HTPE、GAP 的  $L_{\text{Mes}}$  分别为 16.566、23.150 nm;通过式(3)计算,可得 HTPE、GAP 的  $L_{\text{mon}}$  分别为 2.96、4.37 nm。

根据表 2 中  $V_{\text{M}}$ ,可求得单个 Bu-NENA 的体积为 0.29 nm<sup>3</sup>;将单个增塑分子假定为球体,根据球体体积公式  $V=4\pi r^3/3$  ( $r$  为半径),可以计算得到单个 Bu-NENA 分子的直径为 0.82 nm。然后根据大小关系得到:在 HTPE/Bu-NENA 体系中,4 个 Bu-NENA 分子用 1 个珠子代替;在 GAP/Bu-NENA 体系中,5 个 Bu-NENA 分子用 1 个珠子代替。

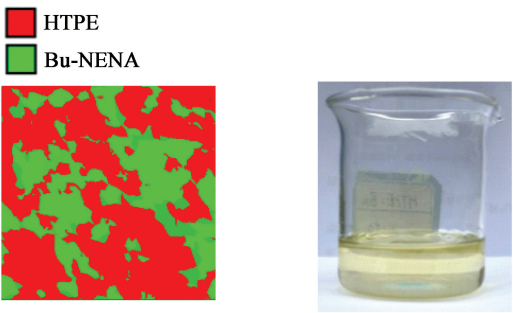
3.4 Bu-NENA 对不同高分子体系相结构的影响

利用 MesoDyn 模拟计算模块,结合上述 HTPE、GAP 与 Bu-NENA 的相互作用参数和高斯链结构数据,分别对 25 ℃ 条件下混合质量比为 50 : 50 的 HTPE/Bu-NENA 和 GAP/Bu-NENA 共混体系进行介观动力学模拟。计算可得两种共混体系的介观形貌(图 4 ~ 图 5)和组分有序度参数  $P$ 。

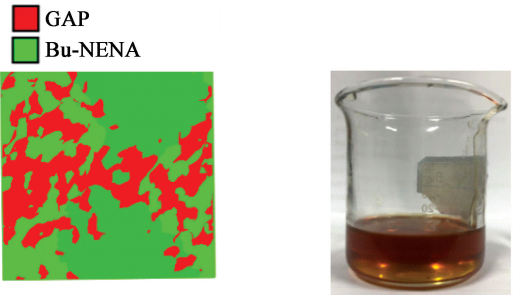
高分子/增塑剂共混体系某组分的有序度参数  $P$  定义为某组分局部密度平方与体系密度平方差的体积平均值:

$$P = \frac{1}{V_s} \int_{V_s} [\theta_i^2(r) - \theta_{i,0}^2] dr \tag{4}$$

式中:  $\theta_{i,0}$  为组分  $i$  处于均一状态时的无量纲密度;



(a) 介观形貌 (b) 实验照片  
图 4 HTPE/Bu-NENA 共混体系的介观形貌和混溶实验照片



(a) 介观形貌 (b) 实验照片  
图 5 GAP/Bu-NENA 共混体系的介观形貌和混溶实验照片

Fig. 4 Mesoscopic morphology and experimental photos of miscibility of HTPE/Bu-NENA blend system

$\theta_i(r)$  为组分  $i$  在距离为  $r$  处的无量纲密度;  $V_s$  为体积。

$P$  为体系中某组分偏离均相分布的差异程度,反映了体系的相分离程度,数值越大表明体系相分离程度越大,混溶性越差。

计算得到:HTPE/Bu-NENA 共混体系中,HTPE 和 Bu-NENA 的  $P$  分别为 0.003 8 和 0.001 3; GAP/Bu-NENA 共混体系中,GAP 和 Bu-NENA 的  $P$  分别为 0.014 3 和 0.002 9。两种体系各组分的  $P$  均接近于 0,这说明 Bu-NENA 与 HTPE 和 GAP 混合后体系的熵值较小,组分间没有发生相分离,两种体系的物理相容性均较好,具有良好的混溶性。两种共混体系中,GAP/Bu-NENA 共混体系组分的  $P$  大于 HTPE/Bu-NENA 共混体系,说明 HTPE 与 Bu-NENA 混合后体系的熵值相对更小,相结构稳定性更好; HTPE/Bu-NENA 体系的混溶性比 GAP/Bu-NENA 体系更好。从共混体系介观形貌可知,HTPE/Bu-NENA 与 GAP/Bu-NENA 共混体系中,Bu-NENA 与 HTPE、GAP 之间界面模糊,Bu-NENA 均匀地分散在

两种高分子相中,这与混溶性实验增塑剂与高分子间未出现分层现象的结果是一致的,也说明两种共混体系均具有良好的互溶性。但对比两种共混体系的介观形貌,发现两种共混体系存在差异,HTPE/Bu-NENA 共混体系两相分散更为均匀,HTPE 与 Bu-NENA 的混溶性更好,这与有序度参数的评判结果一致。

3.5 Bu-NENA 含量对共混体系相结构的影响

在实际使用过程中,增塑剂的含量需要根据 PBX 炸药的配方性能和工艺性能进行调整。因此,开展增塑剂含量对共混体系相结构的影响是十分必要的。针对 HTPE/Bu-NENA、GAP/Bu-NENA 两种共混体系,在 25 ℃ 条件下利用 MesoDyn 模块分别开展了黏结剂与 Bu-NENA 质量比为 70 : 30、40 : 60、50 : 50、60 : 40 和 30 : 70 的介观动力学模拟,计算得到 HTPE/Bu-NENA、GAP/Bu-NENA 共混体系的  $P$  和介观形貌分别如图 6、图 7 所示。Bu-NENA 含量对与共混体系相结构的影响存在较大差异。对于 HTPE/Bu-NENA 共混体系而言,当 Bu-NENA 的含量增加时体系的混溶性变差,Bu-NENA 的含量对 HTPE/Bu-NENA 共混体的混溶性影响显著。

HTPE/Bu-NENA 体系中,Bu-NENA 的质量分数由 30% 增加到 70% 时,HTPE 和 Bu-NENA 的  $P$  分别由 0.002 2 和 0.000 2 增大至 0.041 2 和 0.059 3,分别增加了 18.7 倍和 296.5 倍;Bu-NENA 的质量分数在 50% 以下时,HTPE/Bu-NENA 共混体的混溶性相对 Bu-NENA 的质量分数大于 50% 时更好。从介观形貌可以看出,HTPE/Bu-NENA 共混体系在 HTPE 与 Bu-NENA 质量比为 40 : 60 和 30 : 70 时,

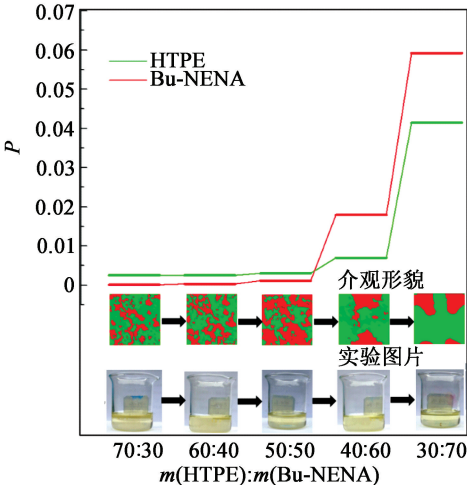


图 6 HTPE/Bu-NENA 共混体系的有序度参数和介观形貌  
Fig. 6 Order parameter and mesoscopic morphology of HTPE/Bu-NENA blend system

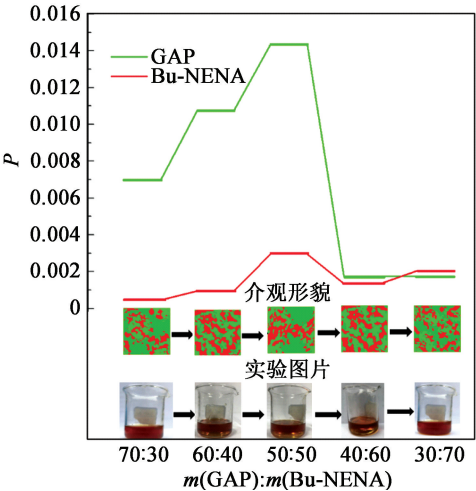


图 7 GAP/Bu-NENA 共混体系的有序度参数和介观形貌  
Fig. 7 Order parameter and mesoscopic morphology of GAP/Bu-NENA blend system

HTPE和Bu-NENA相发生了团聚、融合,两相界面清晰,呈现出明显的相分离现象,此时,该体系的混溶性较差。

然而对于 GAP/Bu-NENA 共混体系, GAP 和 Bu-NENA 的  $P$  先增大,在两组分质量比为 50 : 50 时达到最大值,之后又随 Bu-NENA 含量的增加而减小。如 GAP 与 Bu-NENA 质量比由 70 : 30 调整至 50 : 50 时,体系中 GAP 和 Bu-NENA 的  $P$  分别由 0.006 9 和 0.000 4 增大至 0.014 3 和 0.002 9,分别增加了 2.1 倍和 7.3 倍。从共混体系介观形貌可以看出:两者质量比为 50 : 50 时,GAP 和 Bu-NENA 相发生了一定程度的团聚;而在其他比例时,Bu-NENA 在 GAP 中分散效果较好。说明 GAP/Bu-NENA 共混体系中,GAP 与 Bu-NENA 的混溶性在 GAP 与 Bu-NENA 质量比为 50 : 50 时较质量比为 70 : 30、60 : 40、40 : 60、30 : 70 时差。

4 结论

- 1) 通过分子动力学模拟得到的 Bu-NENA、HTPE 和 GAP 的密度及溶度参数与混溶性实验吻合较好,表明分子动力学模拟结果具有较好的准确性。
- 2) 通过溶度参数,可预测室温条件下 Bu-NENA 与 HTPE、GAP 均具有良好的物理相容性。
- 3) 在温度 25 ℃ 的条件下,质量比为 50 : 50 的 HTPE/Bu-NENA、GAP/Bu-NENA 的共混体系均未产生明显的相分离,HTPE/Bu-NENA 共混体系组分

的分散程度比 GAP/Bu-NENA 共混体系高,即其混溶性相对更好,与混溶性实验的结果一致。

4)在 25 ℃ 条件下,HTPE/Bu-NENA 共混体系随着增塑剂 Bu-NENA 含量的增大,混溶性变差,HTPE 与 Bu-NENA 在质量比为 30 : 70 和 40 : 60 时产生了相分离;GAP/Bu-NENA 共混体系混溶性随增塑剂 Bu-NENA 含量的增大先变差、再变好,但未出现明显相分离现象。

参 考 文 献

[1] 罗观,黄辉,张明,等. 可浇注固化 PBX 类含铝炸药低易损性研究[J]. 含能材料,2004,12(1):20-22,33.  
LUO G, HUANG H, ZHANG M, et al. Study on low vulnerability of cast-cured PBX aluminized explosive[J]. Chinese Journal of Energetic Materials,2004,12(1):20-22,33.

[2] RADWAN M. Explosive characteristics of aluminized PBXs based on HMX and polyurethane binder [C]//32nd International Annual Conference of ICT. Karlsruhe, DE, 2001, 44:1-9.

[3] PIAKSIN L,CAMPOS J,MENDES R,et al. Shock sensitivity and detonation performance of PBX formulations based on the RS-RDX,RS-HMX and fine/ultra-fine HE particles bonded With the inert binders[C]//39th International Annual Conference of ICT. Karlsruhe, DE, 2008,28:1-17.

[4] 陈建宇,徐更光. GAP 应用研究进展[J]. 兵工自动化,2015,34(4):67-70.  
CHEN J Y, XU G G. Research on GAP application[J]. Ordnance Industry Automation,2015,34(4):67-70.

[5] 陈斌,汪营磊,陆婷婷,等. 2,4-二硝基-2,4-二氮杂戊烷的合成与热性能[J]. 火炸药学报,2018, 41(6):543-548.  
CHEN B, WANG Y L, LU T T, et al. Synthesis and thermal properties of 2,4-dinitro-2,4-diazapentane[J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants,2018,41(6):543-548.

[6] 孙亚斌,周集义. 含能增塑剂研究进展[J]. 化学推进剂与高分子材料,2003,1(5):20-25.  
SUN Y B, ZHOU J Y. Advance in research of energetic plasticizers[J]. Chemical Propellants & Polymeric Materials,2003,1(5):20-25.

[7] 高福磊,姬月萍,李普瑞,等. 硝氧乙基硝胺系列化合物的合成与表征[J]. 含能材料,2011,19(5):497-500.  
GAO F L, JI Y P, LI P R, et al. Synthesis and characterization of N-(2-Nitroxyethyl) alkylnitramines[J]. Chinese Journal of Energetic Materials,2011,19(5):497-500.

[8] 齐晓飞,闫宁,严启龙,等. 硝化纤维素/增塑剂共混体系相结构的介观动力学模拟[J]. 火炸药学报,2017,40(6):101-107.  
QI X F, YAN N, YAN Q L, et al. Mesoscopic dynamic simulations on the phase structure of nitrocellulose/plasticizers blends[J]. Chinese Journal of Explosives and Propellants,2017,40(6):101-107.

[9] 赵贵哲,冯益柏,付一政,等. 端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟和介观模拟[J]. 化学学报,2009,67(19):2233-2238.  
ZHAO G Z, FENG Y B, FU Y Z, et al. Molecular dynamic simulations and mesoscopic dynamic simulations on the compatibility of HTPB/plasticizer blends[J]. Acta Chimica Sinica, 2009,67(19):2233-2238.

[10] 齐晓飞,严启龙,刘萌,等. DIANP 对 NC 溶塑作用的实验与模拟[J]. 含能材料,2016,24(3):269-273.  
QI X F, YAN Q L, LIU M, et al. Experiment and simulation on plastication of NC by DIANP[J]. Chinese Journal of Energetic Materials,2016,24(3):269-273.

[11] 赵树森,付一政,梁晓艳,等. HTPB/增塑剂共混物的介观动力学模拟[J]. 高分子材料科学与工程,2011,27(5):186-190.  
ZHAO S S, FU Y Z, LIANG X Y, et al. Mesoscale dynamic simulation on HTPB/plasticizers blends [J]. Polymer Materials Science & Engineering,2011,27(5):186-190.

声 明

1、本刊对发表的文章拥有出版电子版、网络版版权,并拥有与其他网站交换信息的权利。本刊支付的稿酬已包含以上费用。

2、本刊文章版权所有,未经书面许可,不得以任何形式转载。

《爆破器材》编辑部