

六硝基六氮杂异伍兹烷转晶中的分子动力学模拟

导航/NAVIGATE	
本期目录/Table of Contents	
下一篇/Next Article	
上一篇/Previous Article	
工具/TOOLS	
引用本文的文章/References	
下载 PDF/Download PDF(228KB)	
立即打印本文/Print Now	
导出	
统计/STATISTICS	
摘要浏览/Viewed	
全文下载/Downloads	853
评论/Comments	549



《火炸药学报》 [ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 30 期数: 2007年第5期 页码: 1-04 栏目: 出版日期: 2007-10-30

Title: Molecular Dynamic Simulation of the Crystallization of HNIW

作者: 陈华雄; 陈树森; 金韶华; 李丽洁; 史彦山; 向玉联
北京理工大学材料科学与工程学院

Author(s): -

关键词: 量子力学; 分子动力学模拟; 六硝基六氮杂异伍兹烷; 晶体生长; 添加剂

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: -

摘要: 利用六硝基六氮杂异伍兹烷(HNIW)晶体生长及添加剂附着晶面的模拟,来优选添加剂使转晶得到的 ϵ 型HNIW晶体形状更规则;构立了 ϵ 型HNIW晶胞模型,采用分子动力学方法模拟了晶体生长的外部形态。应用分子动力学计算,筛选到能修改 ϵ HNIW晶体生长外形的T1、T2和T3添加剂。在转晶实验中利用T1、T2和T3添加剂修改了 ϵ HNIW晶体的外形,与分子动力学模拟结果基本一致。结果表明,分子动力学模拟可预示添加剂对 ϵ HNIW晶体生长的影响。借助这种模拟,易选择添加剂,使 ϵ HNIW晶体具有更规则的形貌。

Abstract: -

参考文献/References:

相似文献/References:

- [1]居学海,叶财超,徐司雨.含能材料的量子化学计算与分子动力学模拟综述[J].火炸药学报,2012,35(1):1.
JU Xue-hai, YE Cai-chao, XU Si-yu. Overview on Quantum Chemical Computing and Molecular Dynamic Simulations of Energetic Materials[J]., 2012, 35(5):1.
- [2]居学海,叶财超,徐司雨.含能材料的量子化学计算与分子动力学模拟综述[J].火炸药学报,2012,35(2):1.
JU Xue-hai, YE Cai-chao, XU Si-yu. Overview on Quantum Chemical Computing and Molecular Dynamic Simulations of Energetic Materials[J]., 2012, 35(5):1.

备注/Memo: -

更新日期/Last Update: