

研究论文

端羟基聚丁二烯与2,6-甲苯二异氰酸酯固化网络
弹性力学性质的分子模拟

史良伟^a 武文明^b 强洪夫^b 陈敏伯^{* ,a,c}

(^a华东理工大学化学与分子工程学院 上海 200237)

(^b西安高科技研究所 西安 710025)

(^c中国科学院上海有机化学研究所 上海 200032)

收稿日期 2008-5-8 修回日期 2008-9-14 网络版发布日期 2008-12-14 接受日期 2008-10-16

摘要

采用最大熵模型, 构建了HTPB预聚物的最可几结构. 考察了HTPB (nC=9)与TDI全混合以及半混合的两种固化建模方式. 分子动力学模拟得到的HTPB (nC=9)-TDI固化网络的N—N径向分布函数显示半混模式比全混模式的结构更均匀. 采用分子动力学动态模拟与静态拉伸方法对HTPB (nC=9)-TDI固化网络进行弹性力学性质的模拟计算. 比较了半混和全混模式对拉伸模量计算的影响, 表明半混模式得到的固化网络能得到合理的模拟结果. 初步表明最大熵模型在研究HTPB固化问题上静态或动态模拟结果都具有唯象可行性.

关键词 [弹性力学性质](#) [HTPB](#) [最大熵模型](#) [固化网络](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

陈敏伯 mbchen@mail.sioc.ac.cn

作者个人主页:

史良伟^a 武文明^b 强洪夫^b 陈敏伯^{* ;a;c}

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (380KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“弹性力学性质” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [史良伟,武文明,强洪夫,陈敏伯](#)