

[1]张力,陈朗,王晨,等.CL-20初始热分解反应机理的分子动力学计算[J].火炸药学报,2012,(4):5-9.

ZHANG Li, CHEN Lang, WANG Chen, et al. Mechanism of the Initial Thermal Decomposition of CL-20 via Molecular Dynamics Simulation[J]., 2012, (4):5-9.



CL-20初始热分解反应机理的分子动力学计

| | |
|---|-----|
| 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(2772KB) | |
| 立即打印本文/Print Now | |
| 导出 | |
| 统计/STATISTICS | |
| 摘要浏览/Viewed | |
| 全文下载/Downloads | 408 |
| 评论/Comments | 76 |



《火炸药学报》[ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2012年第4期 页码: 5-9
栏目: 出版日期: 2012-08-30

Title: Mechanism of the Initial Thermal Decomposition of CL-20 via Molecular Dynamics Simulation

作者: [张力](#); [陈朗](#); [王晨](#); [伍俊英](#)
北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室

Author(s): [ZHANG Li](#); [CHEN Lang](#); [WANG Chen](#); [WU Jun-ying](#)

关键词: [物理化学](#); [CL-20](#); [热分解](#); [初始热解路径](#)

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 基于Reaxff反应力场,采用NPT、NVT系综和Berendsen方法,通过分子动力学计算研究了不同密度和温度下CL-20单分子和超晶胞的初始热解路径。结果表明,CL20分子中的两种N-NO2键能生成NO2·自由基。单分子CL-20初始热分解中,两种不同类型的N-NO2化学键均能发生断裂生成NO2·自由基和R-(NO2)_n(n≤5)碎片,NO2·自由基形成N2O4, N2O4分解为NO、NO3等碎片或重新生成两个NO2·自由基,NO2·自由基与其他中间体发生反应生成N2、HNO3等碎片。CL-20超晶胞的热解初始反应路径与单分子的初始热解反应路径相同,但由于非键相互作用,使得生成NO2·自由基的总量减少。超晶胞CL-20发生热解反应生成的HNO3碎片会继续分解成H2O和N2O5等碎片。

Abstract: -

参考文献/References:

-

相似文献/References:

[1]何卫东,董朝阳. [高分子钝感发射药的低温感机理](#)[J].火炸药学报,2007,(1):9.

[2]张昊,彭松,庞爱民,等. [NEPE推进剂老化过程中结构与力学性能的关系](#)[J].火炸药学报,2007,(1):13.

- [3]路向辉,曹继平,史爱娟,等.表面处理芳纶纤维在丁羟橡胶中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):21.
- [4]李春迎,王宏,孙美,等.遥感FTIR光谱技术在固体推进剂羽焰测试中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):28.
- [5]杜美娜,罗运军.RDX表面能及其分量的测定[J].火炸药学报,2007,(1):36.
- [6]王国栋,刘玉存.神经网络在炸药晶体密度预测中的应用[J].火炸药学报,2007,(1):57.
- [7]周诚,黄新萍,周彦水,等.FOX-7的晶体结构和热分解特性[J].火炸药学报,2007,(1):60.
- [8]张秋越,孟子晖,肖小兵,等.用分子烙印聚合物吸附溶液中的TNT[J].火炸药学报,2007,(1):64.
- [9]崔建兰,张漪,曹端林.三羟甲基丙烷三硝酸酯的热分解性能[J].火炸药学报,2007,(1):71.
- [10]李进华,孙兆懿.四氧化二氮胶体饱和蒸气压的测试及分析[J].火炸药学报,2007,(1):74.
- [11]张斌,罗运军,谭惠民.多种键合剂与CL-20界面的相互作用机理[J].火炸药学报,2005,(3):23.