

# 铝粉氧化对端羟基聚丁二烯界面吸附影响的分子模

导航/NAVIGATE	
<a href="#">本期目录/Table of Contents</a>	
<a href="#">下一篇/Next Article</a>	
<a href="#">上一篇/Previous Article</a>	
工具/TOOLS	
<a href="#">引用本文的文章/References</a>	
<a href="#">下载 PDF/Download PDF(1468KB)</a>	
<a href="#">立即打印本文/Print Now</a>	
<a href="#">导出</a>	
统计/STATISTICS	
<a href="#">摘要浏览/Viewed</a>	
<a href="#">全文下载/Downloads</a>	556
<a href="#">评论/Comments</a>	231



《火炸药学报》 [ISSN:1007-7812/CN:61-1310/TJ] 卷: 期数: 2009年第6期 页码: 79-83 栏目: 出版日期: 2009-12-29

Title: Molecular Simulation of Effect of Aluminum Powder Oxidation on Interface Adsorption for HTPB

作者: 焦东明; 杨月诚; 强洪夫; 武文明  
第二炮兵工程学院

Author(s): -

关键词: 物理化学; 端羟基聚丁二烯; 分子动力学; 吸附能; 力学性能; 分子模拟

Keywords: -

分类号: -

DOI: -

文献标志码: A

摘要: 为研究铝粉氧化对丁羟推进剂黏合剂界面吸附的影响, 采用分子动力学方法和COMPASS力场, 分别对端羟基聚丁二烯(HTPB)在Al和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>不同晶面 吸附进行了模拟计算, 求得界面吸附能和静态力学性能(弹性系数、模量和泊松比), 结合吸附能和径向分布函数揭示了界面相互作用本质。模拟结果表明, 采用HTPB包覆后的Al 和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>刚度降低, 弹性增强; HTPB在Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>的晶面吸附能远高于在Al晶面, HTPB 与Al晶面只存在范德华力作用, 而在Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>的界面吸附主要由静电作用引起。

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汽压的测试及分析[J].火炸药学报,2007,(1):74.

[11]焦东明,杨月诚,强洪夫,等.键合剂对HTPB与Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>之间界面作用的分子模拟[J].火炸药学报,2009,(4):60.

JIAO Dong ming,YANG Yue cheng,QIANG Hong fu,et al.Molecular Simulation of Effect of Bonding Agents on Interface Interaction for HTPB and Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>[J].,2009,(6):60.

备注/Memo: -

---

更新日期/Last Update: