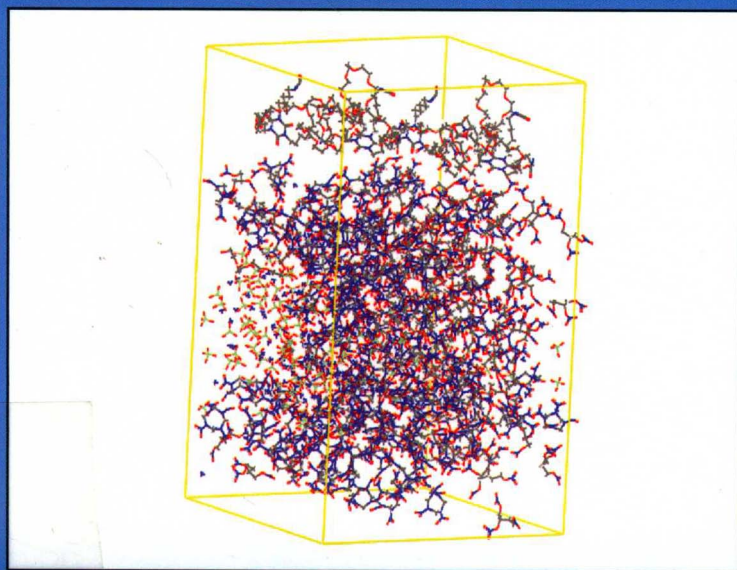


21世纪科学版化学专著系列

高能材料分子动力学

肖继军 朱卫华 朱 伟 肖鹤鸣 著



科学出版社

21 世纪科学版化学专著系列

高能材料分子动力学

肖继军 朱卫华 朱 伟 肖鹤鸣 著



科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是作者近十年来运用分子动力学理论方法模拟研究高(含)能体系结构和性能科研工作的总结。全书共 15 章。第 1 章简介分子动力学的原理和方法。第 2~5 章介绍力场参数优化、模型构建、力学性能预测和感度理论判别的共性工作。第 6~14 章主要用经典分子动力学方法,模拟研究了单体炸药、混合炸药(特别是多类高聚物黏结炸药)、固体推进剂和发射药的广义结构、界面作用和能量特性,关联它们的安全性、相容性、爆炸性,尤其是用静态法和波动法求得弹性力学性能;阐明了组分、温度、浓度和晶体缺陷造成的影响;建议了热和撞击感度的引发键最大键长、引发键连双原子作用能和内聚能密度等理论判据;提出了用子体系与子体系之间的相互作用能(即体系的结合能)表征它们之间的相容性。这些内容为高能复合材料的理论设计提供了例证以及丰富信息、规律和指导。第 15 章用从头算分子动力学方法,模拟研究了四类典型炸药晶体在高温、高压和冲击加载下的结构变化和分解机理,展示了解析过程中出现的奇特现象和图像。

本书可供四大基础化学、高分子物理与化学、炸药化学、爆炸理论、理论与计算化学、材料学、材料物理与化学等专业的高校师生和科技工作者参考阅读。

图书在版编目(CIP)数据

高能材料分子动力学 / 肖继军等著. —北京:科学出版社,2013
(21 世纪科学版化学专著系列)

ISBN 978-7-03-038519-2

I. ①高… II. ①肖…②朱…③朱… III. ①功能材料-分子动力-研究
②弹药材料-分子动力-研究 IV. ①TB34②TJ410.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 208268 号

责任编辑:刘 冉 / 责任校对:鲁 素 张小霞

责任印制:赵德静 / 封面设计:陈 敬

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新科印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013 年 9 月第 一 版 开本:B5 (720×1000)

2013 年 9 月第一次印刷 印张:27 1/4

字数:540 000

定价:128.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

作者简介



肖继军,博士,南京理工大学教授,博士生导师。主要从事高分子材料和高能材料等学科的教学和科研工作。主持或参加了国家自然科学基金项目、国家安全重大基础研究项目(国防 973 项目)、国防科工委项目、中国工程物理研究院项目、国家重点实验室项目和国防科技重点实验室项目等 20 余项;为本科生、研究生主讲过普通化学、高分子物理、高聚物结构与性能以及聚合物改性等课程。在国内外学术期刊上发表论文 60 余篇,出版学术专著一部,获教育部提名国家自然科学奖二等奖一项。



朱卫华,南京理工大学教授、博士生导师。南京大学物理化学理学博士。先后在清华大学化学系、新加坡高性能计算研究院从事博士后研究工作。研究方向为量子化学、分子模拟。研究兴趣侧重于功能材料的理论模拟与设计。

作为负责人主持国家自然科学基金、国家安全重大基础研究项目(国防 973 项目)子专题、总装备部预研基金、高等学校博士学科点专项科研基金、重点实验室开放基金、教育部留学回国人员科研启动基金以及总装备部青年创新基金等项目研究。已在 *Chem. Mater.*, *Phys. Rev. B*, *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem. A/B/C*, *J. Comput. Chem.* 和 *Phys. Chem. Chem. Phys.* 等学术期刊上发表论文 80 多篇。



朱伟,博士。2008 年 7 月毕业于南京理工大学化工学院。现为嘉兴学院生化学院副教授。主要从事物理化学教学以及理论与计算化学科研工作,已在国内外学术期刊上发表论文 20 多篇。



肖鹤鸣,南京理工大学化学教授、材料学博士生导师。我国著名应用量子化学家和材料物理化学家。1963年毕业于南京大学化学系,1978~1980年在吉林大学量子化学进修班结业。1990年以来,先后出访俄罗斯、乌克兰、荷兰、法国、美国、新加坡和捷克等国,在国内外作特邀报告数十次。曾任南京理工大学教材建设委员会副主任、物理化学学科负责人、材料学学术带头人和分子与材料计算研究所所长;西北大学和中国工程物理研究院化工材料研究所兼职教授;《化学物理学报》和《含能材料》等期刊编委。

系统地从事物理化学和含能材料的交叉研究,是我国“量子炸药化学”[含(高)能材料计算学]的创始人和主要开拓者。主讲过物理化学、量子化学等本科生和研究生课程10门以上,指导出硕士/博士研究生、博士后和国内外访问学者近百人。获全国教学成果奖1项和省部级成果奖8项。主持国家自然科学基金和国家安全重大基础研究项目(国防973项目)子专题等科研项目30多项,在国内外学术期刊上发表论文400多篇,出版译作1部、教材1部、学术专著9部,论著被广泛引用和应用,在国内外产生广泛影响。

被评为首批“江苏省优秀研究生教师(1989年)”、国务院“政府特殊津贴”专家(1993年)、“全国优秀博士学位论文指导老师”(2001年)、“江苏省优秀博士生导师”(2002年)和“全国优秀博士学位论文提名奖指导老师”(2009年和2010年)。

前 言

自然科学的发展经常也遵循“分久必合,合久必分”的规律。理论化学以量子化学为主,涵盖统计力学和微观反应动力学等。计算化学以分子动力学为主,由分子力学发展而来,也依赖统计力学,包括蒙特卡罗(Monte Carlo)方法等。原本理论化学和计算化学是分开的,均归属于物理化学学科;随着二者理论和方法的交叉发展,以及迅猛发展的计算机及其网络系统的大力推进,现“理论与计算化学”又有“合”的动向,且似有概称为“计算化学”而单列学科的趋势。

从 20 世纪 70~80 年代开始,得助于我国理论化学奠基人、我校名誉教授唐敖庆先生和我国著名含(高)能材料(Energetic Materials)专家肖学忠教授等的倡导和支持,我校开创并一直从事“量子炸药化学”研究,亦即从事物理化学和含(高)能材料两个学科的结合研究;主要是把量子化学、统计热力学、化学动力学和分子力学、分子动力学等理论方法,系统地应用于火炸药、起爆药等各类爆燃物的分子、超分子、晶体和复合材料,计算和模拟了它们的结构和性能,为的是阐明缘由、总结规律、预示未知、设计和指导合成与配方研究,进而达到服务于我国国防、航天和相关国民经济的目的。

在跨世纪的 30 年内,我校在对“量子炸药化学”这一新方向、新领域和新的交叉学科的创立、开辟和研究中,首先和最多地运用的当然是各种量子化学理论方法,从 HMO、EHMO、CNDO、INDO、MINDO、MNDO、AM1、PM3 和 X_α 等半经验分子轨道方法,到多种水平的第一性原理从头算(*ab initio*)和密度泛函理论(DFT)方法,相关学术论著已发表较多,这里无需赘述。其次,几乎与应用量子化学研究并行,通过培养研究生和完成科研项目,我们也较多地运用了多种分子力学和分子动力学的理论方法。对此,由于紧扣本书主旨,这里不妨多说几句。

早在 20 世纪 80 年代末,中国石油大学王大喜教授在我校攻读博士学位,他的博士学位论文的主要内容就是优化硝酸酯的力场参数并用于硝酸甲酯水解反应和溶剂效应的 QM 和 MM 研究^①。这是运用 Allinger MM2 力场研究爆炸物动态性质的最早工作,为此,肖鹤鸣作为其指导老师获特邀于 1992 年在全国物理有机化

^① 可参见文献:化学学报,1992,50:335;J. Phys. Org. Chem., 1992,5:361;硝基化合物的分子轨道理论,科学出版社,1993:356-380

学会议上作大会报告。20 世纪末,我校与荷兰代尔夫特(Delft)理工大学联合培养博士生,贡雪东教授和苏州大学樊建芬教授当年的博士学位论文,其中部分工作就是完成了有关共轭体系和沸石的 Delphi 力场参数优化,并用于有机气体在沸石中吸附、扩散和催化的 MM 和 MD 研究^①。其中樊建芬从事的 MD 模拟研究,当时在国内还刚刚起步,获得了当年国家自然科学基金(29773021)的资助。

进入 21 世纪以来,肖继军、马秀芳、许晓娟、邱玲、朱伟、于艳春等先后在我校获得博士学位。他们的学位论文中或多或少都包含火炸药结构-性能 MD 模拟的内容。在这里,我们较多地运用了 Materials Studio 材料科学软件和孙淮教授开发的 COMPASS 力场,也根据需要运用过自行扩展的 MPCFF 力场和普适的 UFF 和 Dreiding 力场等。通过经典 MD 模拟,我们完成了(有些还正在进行中)国家自然科学基金项目(10176012, 20173028)、国防科工委国防基础科研项目(K1701061001)、冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室及其主任基金项目、中国工程物理研究院化工材料研究所和流体物理研究所的合作研究项目、国家安全重大基础研究项目(国防 973-61337、61340 和 613142)以及爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)开放基金等较多项目。肖继军教授在指导多位硕士生(黄玉成、王艳群、张航、夏露、汪文睿和李松远等)和协助指导上述博士生完成这些任务的同时,率先开辟了高能混合体系如高聚物黏结炸药(PBX)和推进剂、发射药的经典 MD 模拟,特别是对它们的力学性能进行了系统的研究。朱伟副教授自 2008 年毕业离校至今,仍在嘉兴学院继续参加和完成了我校承担的如上较多科研工作,在模拟多组分高能混合体系和优化力场参数等工作中,成绩显著。2005 年以来,朱卫华教授在完成国家自然科学基金项目(10576016)、国家安全重大基础研究项目(国防 973-61337, 61339, 613142)和爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)开放基金等项目中,对各类型高能晶体的能带和电子结构进行了系统的理论研究;这其中,他开辟了极端条件(高温、高压和冲击加载)下多类典型炸药晶体的从头算分子动力学(*ab initio* MD)模拟,报道了它们的引发分解反应机理。

综上所述,我校从事理论与计算化学研究起步较早,持续不断。30 年来,在“量子炸药化学”和(或)“计算高能材料学”研究领域,我们目睹和经历了量子化学和经典分子动力学的“分”,又实现了二者在量子分子动力学中的“合”,十分有趣。本书是经典分子动力学和量子分子动力学在该研究领域的应用,概括了我们近十年来的相关科研和教学成果。本书包含了十多位研究生的学位论文,并以他们在

^① 可参见文献:化学学报,1997,55:440;Chin. Sci. Bull., 1994,44:598;J. Mol. Struct., 1999,492:133;Chin. J. Chem., 2001,19:251

国内外学术期刊上发表的数十篇论文为素材,但因所研究的课题很复杂,涉及面非常广,而作者们的阅历和知识面尚较欠缺,水平有限,故本书难免有不妥之处。抛砖引玉,谨供读者参考,恳请读者批评指正。

南京理工大学化工学院

分子与材料计算研究所

肖鹤鸣 肖继军 朱卫华 朱 伟

2012 年 10 月

目 录

前言

第 1 章 分子动力学理论基础	1
1.1 引论	1
1.2 经典分子动力学	2
1.2.1 力场	3
1.2.2 系综	5
1.2.3 边界条件	5
1.2.4 数值解法	5
1.2.5 MD 计算流程	7
1.3 量子分子动力学	8
1.3.1 Hartree-Fock(HF)方程	9
1.3.2 Kohn-Sham(KS)方程	10
1.3.3 从头算 MD 方法	11
1.3.4 从头算 MD 计算流程	13
参考文献	13
第 2 章 力场参数优化	15
2.1 力场函数形式和参数化方法	15
2.2 高氯酸铵(AP)的力场参数	17
2.2.1 AP 的力场参数	17
2.2.2 AP 力场参数验证	18
2.3 硝基胍(NQ)的力场参数	20
2.3.1 NQ 的力场参数	20
2.3.2 NQ 力场参数验证	22
2.4 二氧化硅(SiO_2)的力场参数	24
2.4.1 SiO_2 的力场参数	24
2.4.2 SiO_2 力场参数验证	25
参考文献	26
第 3 章 MD 模拟的模型构建	28
3.1 β -HMX 不同超晶胞的 MD 模拟	28
3.1.1 模型搭建和模拟细节	29

3.1.2	β -HMX 在不同超胞下的 MD 模拟晶胞参数	31
3.1.3	β -HMX 晶体的引发键 N—N 键长分布	32
3.1.4	β -HMX 晶体引发键连双原子作用能	33
3.1.5	β -HMX 晶体的力学性能	34
3.2	TATB/氟聚物 PBX 的模型构建	35
3.2.1	TATB 晶体和氟聚物	36
3.2.2	TATB 晶体和 TATB/PCTFE PBX 的力学性能——吸附包覆模型	37
3.2.3	TATB 晶体和 TATB/氟聚物 PBX 的力学性能——渗透添加模型	38
3.2.4	TATB/氟聚物 PBX 沿不同晶面的力学性能——切割分面模型	41
3.2.5	本节小结	42
3.3	高聚物链数和链节数的选取	43
3.3.1	HMX/ F_{2311} PBX 的 MD 模拟	43
3.3.2	RDX/PS PBX 的 MD 模拟	46
	参考文献	50
第 4 章	力学性能预测的理论和方法	54
4.1	应力、应变和广义胡克定律	54
4.1.1	应力	54
4.1.2	应变	56
4.1.3	应力与应变的关系	57
4.1.4	弹性系数矩阵讨论	58
4.2	微观力学模型与宏观力学性质	60
4.2.1	原子水平力学模型	60
4.2.2	宏观力学性质	60
4.3	弹性、塑性与断裂	61
4.4	弹性力学性能模拟	62
4.4.1	静态分析法及其应用示例	62
4.4.2	波动分析法及其应用示例	65
	参考文献	66
第 5 章	感度的微观理论判别	67
5.1	感度理论研究的历史回顾	67
5.1.1	高能分子 QC 计算, 撞击感度的热力学和动力学判据	68
5.1.2	高能晶体 QC 计算和从头算 MD 模拟, 前沿能隙判据	69
5.2	引发键的键长统计分布	70
5.2.1	HMX 和 RDX 晶体的引发键键长分布	70
5.2.2	HMX 和 RDX 基 PBX 中引发键的键长分布	71

5.3 感度的引发键最大键长判据	72
5.3.1 不同配比、不同温度的 AP/HMX 和 AP/NG 体系	73
5.3.2 不同配比多组分体系和不同温度 PBX	78
5.4 感度的引发键连双原子作用能判据	81
5.4.1 不同温度下的 HMX(100)晶体和 HMX(100)/F ₂₃₁₁ PBX 的能量性质	81
5.4.2 不同 F ₂₃₁₁ 浓度下 HMX/F ₂₃₁₁ PBX 的能量性质	86
5.4.3 对相关函数及其对界面作用的分析	89
5.5 力学性能与感度的关系	94
5.5.1 不同 F ₂₃₁₁ 浓度下 HMX(100)/F ₂₃₁₁ PBX 的力学性能	95
5.5.2 不同温度下 HMX(100)晶体和 HMX(100)/F ₂₃₁₁ PBX 的力学性能	96
5.5.3 本节小结	99
参考文献	100
第6章 单体炸药的结构和性能	105
6.1 RDX 晶体的热膨胀和力学性能	105
6.1.1 模型搭建、模拟细节和平衡结构下的晶胞参数	105
6.1.2 不同温度下的晶体结构和热膨胀系数	107
6.1.3 不同温度下的力学性能	110
6.2 β -HMX 晶体的热膨胀系数、感度判据和力学性能	113
6.2.1 β -HMX 晶体在不同温度下的晶胞参数和热膨胀系数	113
6.2.2 β -HMX 晶体的感度判别和力学性能	116
6.3 RDX 和 HMX 的感度和力学性能的 MD 比较研究	120
6.3.1 MD 模拟方法和细节	121
6.3.2 感度与引发键最大键长的关系	124
6.3.3 感度与引发键连双原子作用能的关系	125
6.3.4 感度与内聚能密度的关系	127
6.3.5 弹性力学性能比较	128
6.3.6 本节小结	129
6.4 PETN 晶体的感度判别和力学性能预测	129
6.4.1 模型搭建和模拟细节	130
6.4.2 PETN 晶体的晶胞参数	132
6.4.3 感度的引发键最大键长判据	132
6.4.4 感度的引发键连双原子作用能判据	134
6.4.5 感度的内聚能密度判据	135
6.4.6 力学性能比较	136
6.4.7 本节小结	138

6.5	ϵ -CL-20 晶体的感度判别和力学性能研究	139
6.5.1	力场、模型和模拟	139
6.5.2	晶胞参数	141
6.5.3	感度与引发键键长的关系	142
6.5.4	引发键连双原子作用能	143
6.5.5	内聚能密度	144
6.5.6	力学性能	145
6.5.7	本节小结	147
	参考文献	147
第7章	TATB 基 PBX 的结构和性能	153
7.1	TATB/氟聚物 PBX 沿不同晶面的力学性能——温度的影响	153
7.1.1	模型构建和模拟方法	153
7.1.2	常温常压下四种聚合物黏结 TATB 不同晶面的力学性能	155
7.1.3	温度对 F_{2311} 黏结 TATB(001)面力学性能的影响	158
7.1.4	本节小结	160
7.2	TATB/氟聚物 PBX 沿不同晶面的结合能	161
7.2.1	PBX 的平衡示例	162
7.2.2	结合能计算	162
7.2.3	径向分布函数分析	164
7.3	不同浓度和温度下 TATB/PCTFE PBX 的力学性能和结合能	165
7.3.1	计算模型和平衡结构	165
7.3.2	PCTFE 浓度对 TATB 基/PCTFE PBX 力学性能的影响	166
7.3.3	不同 PCTFE 浓度下 TATB/PCTFE PBX 的结合能	169
7.3.4	TATB/PCTFE PBX 在不同温度下的力学性能和结合能	170
7.4	TATB/氟聚物 PBX 的力学性能、结合能和爆炸性能	171
7.4.1	模型构建和计算方法	171
7.4.2	TATB/氟聚物的力学性能	172
7.4.3	TATB/氟聚物 PBX 的结合能	174
7.4.4	TATB 晶体和 TATB/氟聚物 PBX 的爆炸性能	174
7.4.5	本节小结	175
7.5	温度对 TATB 和 TATB/ F_{2311} PBX 力学性能和结合能的影响	176
7.5.1	模型搭建和模拟细节	176
7.5.2	平衡判别和平衡结构	177
7.5.3	纯 TATB 和 TATB/ F_{2311} 在不同温度下的力学性能	179
7.5.4	温度对 TATB/ F_{2311} PBX 结合能的影响	181

7.5.5 本节小结	182
参考文献	182
第8章 RDX基PBX的结构和性能	184
8.1 RDX/氟聚物PBX的力学性能、结合能和爆炸性能	184
8.1.1 计算方法、模型和平衡结构	184
8.1.2 RDX/氟聚物PBX的力学性能	186
8.1.3 RDX/氟聚物PBX的结合能	189
8.1.4 RDX/氟聚物PBX的爆炸性能	190
8.1.5 本节小结	190
8.2 温度对RDX/F ₂₃₁₁ PBX力学性能和结合能的影响	191
8.2.1 计算方法、模型和平衡结构	191
8.2.2 温度对力学性能的影响	193
8.2.3 温度对结合能的影响	196
8.2.4 对相关函数分析	198
8.2.5 本节小结	199
8.3 RDX/PS-PBX的结构、能量及其与感度的关系	200
8.3.1 MD模型搭建和模拟	200
8.3.2 感度与引发键最大键长($L_{\max}$)的关系	200
8.3.3 感度与相互作用能的关系	201
8.3.4 本节小结	204
8.4 PBX-9007的力学性能和结合能	205
8.4.1 模型搭建和平衡结构	205
8.4.2 弹性力学性能比较	207
8.4.3 结合能比较	207
参考文献	208
第9章 HMX基PBX的结构和性能(I)	210
9.1 HMX/氟聚物PBX的结合能和力学性能	210
9.1.1 计算方法和细节	210
9.1.2 HMX/高聚物原子簇的MM和MO结合能	212
9.1.3 HMX晶体和HMX/氟聚物PBX的力学性能	213
9.1.4 本节小结	216
9.2 温度对HMX和HMX/F ₂₃₁₁ PBX力学性能和结合能的影响	216
9.2.1 考察力场实用性和平衡判别	217
9.2.2 温度对纯 β -HMX晶体力学性能的影响	219
9.2.3 温度对HMX/F ₂₃₁₁ PBX结构参数和密度的影响	220

9.2.4	温度对 HMX/F ₂₃₁₁ PBX 力学性能的影响	222
9.2.5	温度对 HMX/F ₂₃₁₁ PBX 结合能的影响	224
9.3	HMX 和 HMX/F ₂₃₁₁ PBX 的力学性能——不同温度 NVT 和 常温下 NPT 研究	225
9.3.1	模拟方法和模型	226
9.3.2	HMX 晶体和 HMX 基 PBX 的常温力学性能	227
9.3.3	不同温度下 HMX 晶体的力学性能	228
9.3.4	不同温度下 HMX 基 PBX 的力学性能	229
9.3.5	HMX 和 HMX(100)/F ₂₃₁₁ PBX 的 NPT-常温力学性能	230
9.3.6	本节小结	231
	参考文献	231
第 10 章	HMX 基 PBX 的结构和性能(Ⅱ)	234
10.1	HMX/Estane 5703 PBX 的界面作用和力学性能	234
10.1.1	高分子、HMX 和 PBX 的模型构建和模拟	234
10.1.2	引发键键长分布和结合能	237
10.1.3	HMX 和 HMX/Estane PBX 的力学性能	239
10.1.4	本节小结	240
10.2	以 PEG 和 HTPB 为黏结剂的 HMX 基 PBX	240
10.2.1	模型构建和模拟	241
10.2.2	引发键键长分布和结合能	242
10.2.3	HMX/HTPB 和 HMX/PEG PBX 的力学性能	244
10.2.4	本节小结	245
10.3	JOB-9003 四组分 PBX 的结构与性能	246
10.3.1	模型搭建和模拟计算	246
10.3.2	平衡结构和结合能	247
10.3.3	力学性能比较	248
10.3.4	爆热和爆速	249
10.3.5	钝感剂的致钝机理	250
10.3.6	本节小结	252
10.4	JO-9159 四组分 PBX 的结构和性能	253
10.4.1	模型搭建和模拟计算	253
10.4.2	JO-9159 PBX 中的界面作用和结合能	254
10.4.3	JO-9159 PBX 等体系的力学性能	258
10.4.4	JO-9159 PBX 等体系的爆热和爆速	259
10.4.5	本节小结	260

参考文献	260
第 11 章 其他基混合炸药的结构和性能	263
11.1 ϵ -CL-20/氟聚物 PBX 的力学和爆炸性能	263
11.1.1 力场、模型和模拟平衡	263
11.1.2 力学性能	265
11.1.3 结合能	267
11.1.4 爆炸性能	268
11.2 TNAD/氟聚物 PBX 的力学和爆炸性能	268
11.2.1 模型搭建和晶胞参数比较	269
11.2.2 力学性能	270
11.2.3 结合能和爆炸性能	272
11.3 PETN 基 PBX 的结合能和力学性能	273
11.3.1 计算方法和模拟细节	274
11.3.2 PETN/高聚物超分子的 MM 和 MO 结合能	275
11.3.3 PETN 和 PETN/氟聚物 PBX 的常温力学性能	277
11.3.4 不同温度下的力学性能比较	279
11.3.5 本节小结	280
11.4 PETN/TNT 混合炸药的感度和力学性能	280
11.4.1 模型构建和 MD 模拟	280
11.4.2 感度与引发键最大键长的关系	281
11.4.3 感度与相互作用能的关系	283
11.4.4 力学性能比较	286
11.4.5 本节小结	287
参考文献	287
第 12 章 晶体缺陷对炸药结构和性能的影响	292
12.1 HMX 和 HMX/HTPB PBX 的晶体缺陷研究	292
12.1.1 模型搭建和模拟计算	292
12.1.2 力学性能比较	295
12.1.3 爆炸性能比较	295
12.1.4 电子结构和感度比较	296
12.1.5 本节小结	298
12.2 缺陷对 ϵ -CL-20 及其 PBX 力学性能和结合能的影响	299
12.2.1 模型搭建和模拟	299
12.2.2 力学性能	301
12.2.3 结合能	302

12.3	缺陷对 RDX 晶体及其 PBX 感度的影响	302
12.3.1	RDX 晶体的位错、空位和掺杂缺陷	303
12.3.2	完美和缺陷 RDX 晶体的感度比较	306
12.3.3	完美和缺陷 RDX(100)基 PBX 的感度	307
12.4	HMX 掺杂(TATB)体系的力学性能和结合能	307
12.4.1	模型、模拟和平衡判别	308
12.4.2	HMX/TATB 的力学性能	310
12.4.3	HMX 掺杂 TATB 体系在不同温度下的力学性能	311
12.4.4	温度对 HMX/TATB 体系结合能的影响	312
12.4.5	本节小结	313
	参考文献	314
第 13 章	火药及其相关体系的结构和性能	316
13.1	几种简单火药模型体系的结构和性能	316
13.1.1	模型搭建和模拟计算	317
13.1.2	力学性能	320
13.1.3	热力学性质	321
13.1.4	爆热、爆速和爆压	322
13.1.5	本节小结	323
13.2	聚环氧乙烷、聚四氢呋喃及其共聚醚的力学性能	323
13.2.1	模型建立和模拟方法	324
13.2.2	力学性能	326
13.3	单一和混合硝酸酯增塑剂的力学性能和界面相互作用	327
13.3.1	理论、方法和模型	327
13.3.2	COMPASS 力场对硝化甘油的适用性	329
13.3.3	力学性能分析	329
13.3.4	界面相互作用和结合能	330
13.3.5	界面相互作用的本质	331
13.3.6	本节小结	332
13.4	十种二组分高能体系的结构和性能	333
13.4.1	计算模型和模拟细节	334
13.4.2	结合能和相容性	337
13.4.3	界面作用——对相关函数分析	338
13.4.4	力学性能	341
13.4.5	本节小结	344
13.5	推进剂/衬层的界面固化反应和力学性能	344

13.5.1 模型构建、模拟细节和固化反应展示	344
13.5.2 力学性能比较	349
13.5.3 本节小结	350
参考文献	350
第 14 章 高能复合材料的理论设计	353
14.1 ϵ -CL-20 基 PBX 配方设计初探	353
14.1.1 模型构建和模拟细节	354
14.1.2 相容性的结合能判据	355
14.1.3 安全性——致钝机理研究	358
14.1.4 力学性能预示	359
14.1.5 能量性质的定性评估	360
14.1.6 本节小结	361
14.2 四种四组分高能体系的相容性和力学性能	361
14.2.1 模型构建、MD 模拟和平衡判别	362
14.2.2 以结合能度量相容性	364
14.2.3 力学性能	367
14.2.4 本节小结	369
14.3 高能复合材料配方设计示例(I)	369
14.3.1 (PEG/NG/BTTN)/AP/HMX 五组分体系	370
14.3.2 (PEG/NG/BTTN)/AP/HMX/Al 六组分体系	371
14.4 高能复合材料配方设计示例(II)	372
14.4.1 模型构建、MD 模拟和平衡结构	372
14.4.2 组分分子的浓度分布和迁移状况	373
14.4.3 两种配方的力学性能比较	375
14.4.4 两种配方的安全性能比较	376
14.4.5 两种配方的相容性比较	376
14.4.6 本节小结	376
参考文献	377
第 15 章 炸药晶体结构和性能的头算 MD 研究	379
15.1 叠氮化银晶体的温度行为	379
15.1.1 模拟方法	380
15.1.2 径向分布函数	380
15.1.3 晶体结构变化和分解	382
15.1.4 电子结构	385
15.1.5 速度自相关函数能谱	386