

Molecular Dynamics Simulation of Interaction between PBT and Energetic Plasticizer

DENG Lei, ZHANG Wei, BAO Tong, ZHOU Xing

(School of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: To select the energetic plasticizer which is compatible with 3,3-bis(azido methyl) oxetane (BAMO) and tetrahydroxyl furan (THF) copolymer (PBT) and has low glass-transition temperatures of the mixture with PBT, the compatibilities between PBT and five kinds of energetic plasticizers, triethyleneglycol dinitrate (TEGDN), 1,3-diazido-2-ethyl-2-nitropropane (DAENP), N-butyl nitroxyethyl nitramine (Bu-NENA), 1-allyl-3,4-dinitropyrazole (ADNP), bis(2,2-dinitropropyl) formal and bis(2,2-dinitropropyl) formal acetal mixture (mass ratio of BDNPF/A is 1:1, A3), and glass-transition temperatures of PBT plasticizer blends were simulated and studied by means of MD method. The reasons of the interaction between PBT binder and energetic plasticizer were analyzed. Results show that the compatibility order of PBT and energetic plasticizer is Bu-NENA>DAENP>A3>TEGDN>ADNP, TEGDN and ADNP are incompatible with PBT. The order of glass transition temperatures of the PBT and plasticizer mixture is PBT/Bu-NENA<PBT/TEGDN<PBT/DAENP<PBT/ADNP<PBT/A3. The compatibility between Bu-NENA and DAENP and PBT is better compared with the existing PBT plasticizer A3 and the glass transition temperatures of the PBT/Bu-NENA and PBT/DAENP mixed system are lower.

Key words: molecular dynamics; BAMO-THF copolymer (PBT); energetic plasticizer; solubility parameter; glass transition temperature

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2017.01.005



“2017年(第二届)火炸药计量与测试技术研讨会”会议征文通知(第一轮)

为进一步推动我国火炸药计量、理化分析及性能检测新技术、新方法、新装置的创新发展与推广应用,促进本领域的学术交流与科技合作,继2015年第一届火炸药计量与测试技术研讨会在西安成功举办后,拟由中国工程物理研究院化工材料研究所、中国兵器工业第二〇四所(国防科技工业火炸药第一计量站、国家含能材料产品质量监督检验中心)和西南科技大学(分析测试中心)联合主办,由中国工程物理研究院化工材料研究所含能材料测试评价中心承办“2017年(第二届)火炸药计量与测试技术研讨会”。会议拟定于2017年5月在绵阳召开。

会议组委会特向全国火炸药分析测试领域的专家学者发出诚挚邀请,欢迎参会,惠赐论文。

一、会议征文范围(包括但不限于)

1、火炸药计量新技术、新方法、新装置;2、火炸药理化分析新技术、新方法、新装置;3、火炸药性能检测新技术、新方法、新装置;4、爆炸性危险物质鉴定技术、方法及标准;5、现有火炸药计量、分析、测试相关标准存在的问题及建议;6、计量检测实验室管理及标准化管理;7、热、力、电、光、磁等计量技术在火炸药计量测试中的应用等。

二、投稿须知

1、投稿地址: huozhayao2017@163.com; 2、论文截止日期: 2017年4月15日; 3、经作者同意后,投稿文章将择优推荐到《含能材料》、《火炸药学报》和《兵工学报》等核心期刊发表。

三、参会说明

会议收取注册费(包括会议费、资料费、茶点、餐费等,不包括住宿费),会后统一开具报销发票。(普通代表1500元,学生代表750元。)

会议秘书处设在中国工程物理研究院化工材料研究所

联系人: 杨芳 0816-2483314 赵龙 0816-2483514 李洁 0816-2482962

传真: 0816-2495856

E-mail: huozhayao2017@163.com (推荐方式)