

运用从头算分子动力学模拟高温耦合爆轰压力条件下 α -RDX 的分解机理

向东¹, 吴琼², 朱卫华¹

(1. 南京理工大学化工学院, 江苏 南京 210094; 2. 南京工程学院材料科学与工程学院, 江苏 南京 211167)

摘要: 运用从头算分子动力学模拟了 α -黑索今(RDX)晶体在高温(3000 K)耦合爆轰压力(34.5 GPa)下的初始和随后的分解机理。采用两种范德瓦尔斯修正方法(PBE-G06 和 PBE-TS)环境条件下对 RDX 的晶体结构进行了优化。结果表明, PBE-TS 非常合适优化 RDX。RDX 分解中, C—H 键均裂引发 α -RDX 分解。态密度的结果也证明了 C—H 键断键的现象。分解过程中发生了 HONO 的消去反应。产生 NO_2 、 NO 、 N_2O 、 N_2 、 HONO 、 N_2O_4 、 H 、 O—H 、 H_2O 和 CO_2 为主要反应, 发生在早期阶段。同时, RDX 引发后的三种不同的分解途径分别为(1)C—N 断键引发该环中其它 C—N 键断裂; (2)N— NO_2 断键并且释放 NO_2 气体; (3)H 自由基和氧原子碰撞形成 O—H 键后释放 O—H 自由基。

关键词: 从头算分子动力学; α -黑索今(RDX); 初始反应; 分解

中图分类号: TJ55; O64

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.06.003



《含能材料》“损伤与点火”专栏征稿

含能材料的损伤特征与点火过程有密切的联系, 炸药、推进剂的内部损伤及其对力学特性、安全特性和点火行为的影响规律受到了含能材料学界的高度重视, 为推动这一重要研究方向的学术交流, 本刊特设立“损伤与点火”专栏。专栏主要征集炸药、推进剂等含能材料的损伤观测与多尺度表征技术、含损伤的本构方程、准静态与动态损伤演化规律、损伤与破坏的宏(细)观模式、损伤对起爆、爆炸、爆轰成长以及非冲击起爆行为的影响等方向的原创性研究论文。来稿请注明“损伤与点火”专栏。

《含能材料》编辑部