

Molecular Dynamics Simulation of CL-20/HMX Cocrystal and Blends

TAO Jun, WANG Xiao-feng, ZHAO Sheng-xiang, DIAO Xiao-qiang, WANG Cai-ling, HAN Zhong-xi

(Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: To compare the properties of the hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20) / cyclotetramethylenete-tranitramine (HMX) cocrystal and CL-20/HMX blends, the cocrystal structure and blending structure with the molar ratio of CL-20 and HMX as 2 : 1 were constructed respectively. The mechanical properties, structure stability and radial distribution function of the cocrystal system and blending system were simulated by molecular dynamics (MD) method. Simulation and calculation results show that the cocrystal process of CL-20/HMX can significantly improve the antideformation ability and ductility of the system. The tensile modulus of the cocrystal structure is greater than that of blending structure. The maximum bond length (L_{max}) decreases in the order CL-20/HMX blends > ϵ -CL-20 > β -HMX > CL-20/HMX cocrystal. The structure of CL-20/HMX blends is sensitized by the interaction in which Van der Waals force predominate. The cohesive energy density (CED) value of CL-20/HMX cocrystal structure is far greater than that of CL-20/HMX blends structure. The low sensitivity of CL-20/HMX cocrystal system is caused by the existence of hydrogen bond CH...O with relatively short length.

Key words: hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20); cyclotetramethylenete-tranitramine (HMX); mechanical properties; structure stability; hydrogen bond

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2016.04.002

火工品新技术·新工艺·新材料研讨会征文通知

各会员单位及相关单位:

为促进火工品行业创新发展、学术繁荣和人才成长,瞄准火工品新技术、新工艺、新材料,加强火工品技术学术交流,经研究,定于2016年三季度召开“火工品新技术·新工艺·新材料研讨会”,现将研讨会征文有关事项通知如下:

一、征文内容

1. 国内外火工品新技术、新工艺、新材料;
2. 火工药剂新技术、新工艺、新材料;
3. 火工品理化分析、测试和试验新技术;
4. 火工品数字化管理、设计、仿真新技术;
5. 新型火工品设计与评估新技术;6. 新型火工品安全性和可靠性新技术;7. 新型火工品工程化技术;
8. 未来火工品技术的预测与展望。

二、征文要求

1. 研究成果具有较高的理论水平或应用价值;
2. 论文未在国内外正式期刊上发表过,文责自负;
3. 提交的论文为非密,须通过所在单位的保密审查;
4. 论文格式按照科技论文标准规范,要求用Word 2003以上版本软件排版;
5. 论文格式及排序:题目,作者名,单位名,所在地,邮编,中文摘要,中文关键词,正文,参考文献,作者简介。

三、征文时间

征文截止时间为2016年5月30日。优秀论文将推荐到《火工品》期刊发表。

研讨会召开的具体时间、地点另行通知。

四、联系方式

投稿邮箱: hgqh2005@163.com

联系地址: 西安市99号信箱兵工学会

邮 编: 710061

联 系 人: 王建华 029-85333477 13152441200

中国兵工学会火工烟火专业委员会

2016年2月19日