

[14] Barker J A, Leonard P J, Pompe A. Fifth virial coefficients[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1966, 44(11): 4206 - 4211.
 with the VLW equation of state[C] // *Proceedings of 8th International Symposium on Detonation*. Albuquerque, New Mexico, 1985: 796 - 804.

[15] WU Xiong. Detonation performance of condensed explosive computed

Effect of L-J or Exp-6 Potential Function on Calculation of Reduced Second Virial Coefficient

HAN Yong¹, LONG Xin-ping², HUANG Yi-min¹, JIANG Zhi-hai¹

(1. Institute of Chemical Materials, CAEP, Mianyang 621900, China; 2. CAEP, Mianyang 621900, China)

Abstract: In order to study the effect of potential function (L-J, Exp-6) on calculation of the reduced second Virial coefficient $B^*(T^*)$, the Simpson's changing step length integral was introduced to approximately calculate the different $B^*(T^*)$. The calculation results are in agreement with literature values, which prove the availability of the calculation method introduced. By the comparison of $B^*(T^*)_{L-J}$ calculated by L-J potential function and $B^*(T^*)_{Exp-6}$ calculated by Exp-6 potential function, the changing relationship between difference value ($\Delta(T^*)$) and reduced temperature (T^*) was obtained. The result reveals that in detonation environment, when T^* is 25 - 40, there is obvious difference between $B^*(T^*)_{L-J}$ and $B^*(T^*)_{Exp-6}$.

Key words: statistical physics; potential function; Virial coefficient; equation of state



《含能材料》2008 年第 5 期被 EI 收录论文

题 名	第一作者	出版年卷期页
Zr/KClO ₄ 激光点火延迟时间与装药密度的关系	严 楠	(2008)16-05-0487-03
三基发射药 M32 和 SD 的热安全性	赵凤起	(2008)16-05-0490-04
高能发射药有效安定剂消耗反应动力学研究	衡淑云	(2008)16-05-0494-04
高聚物理论估算溶型火药拉伸强度的应用研究	堵 平	(2008)16-05-0498-04
硼系延期药燃烧特性分析	武双章	(2008)16-05-0502-05
纳米 Fe ₂ O ₃ 对钨系延期药燃烧性能的影响	黄寅生	(2008)16-05-0507-04
超细 HNS 颗粒状态研究	王 平	(2008)16-05-0511-04
超细 A ₅ 传爆药的制备及表征	梁逸群	(2008)16-05-0515-04
超细 BNCP 比表面积对其性能的影响	郁卫飞	(2008)16-05-0519-02
显微红外光谱法测定 EI 发射药中钝感剂扩散系数	潘 清	(2008)16-05-0521-04
环境湿度对某新型推进剂热分解动力学的影响	张 军	(2008)16-05-0525-02
火药燃烧气体产物检测方法研究	胡 岚	(2008)16-05-0527-04
可见分光光度法测定 PBX 传爆药中 HMX 含量	梁逸群	(2008)16-05-0531-04
基于 Bootstrap 方法的火工品可靠性评估	温玉全	(2008)16-05-0535-04
某火工品贮存老化效应分析研究	涂小珍	(2008)16-05-0539-04
薄膜桥火工品的制备与性能研究	王广海	(2008)16-05-0543-04
桥丝式电火工品射感度试验研究	陈明华	(2008)16-05-0547-03
特定条件下的可靠性试验信息熵	蔡瑞娇	(2008)16-05-0550-03
火工品可靠性计量-计数评估方法的有效性研究	董海平	(2008)16-05-0553-03
基于序约束的火工品可靠性试验数据分析	洪东跑	(2008)16-05-0556-04
灼热桥丝式电火工品发火可靠性设计方法	董海平	(2008)16-05-0560-04
半导体桥电爆过程的能量转换测量与计算	张文超	(2008)16-05-0564-03
吡啶类化合物结构与性能关系的理论研究	殷 明	(2008)16-05-0567-05
四氮烯异构体的密度泛函理论研究(英)	崔 燕	(2008)16-05-0572-05
二硝酰胺胍(GDN)的晶体结构和热行为(英)	徐抗震	(2008)16-05-0577-04
偶氮四唑二胍的合成优化与性能表征	王义惠	(2008)16-05-0581-04
四氮烯起爆药的电喷雾电离质谱裂解研究	刘俊伟	(2008)16-05-0585-03
碳纳米材料红外图像遮蔽特性研究	王红霞	(2008)16-05-0588-02
微粉石墨在燃烧型抗红外烟幕中的应用	霸书红	(2008)16-05-0592-03
碳纤维织物铜银复合镀覆及其 3 毫米波 RCS 特性	侯 伟	(2008)16-05-0595-04
纳米镍粉对 1.06μm 和 10.6μm 激光的消光性能研究(英)	刘香翠	(2008)16-05-0599-04
具有脉动燃烧效应的烟火药水中燃烧声频特性	欧阳的华	(2008)16-05-0603-03
聚乙烯醇缩丁醛包覆氯酸钾及其安全性研究	钱新明	(2008)16-05-0606-03
新型含能粘合剂羟烷基纤维素醚硝酸酯分子设计及合成	邵自强	(2008)16-05-0609-05
GAP 基热塑性弹性体的合成及表征	菅晓霞	(2008)16-05-0614-04
Miniature Detonating Cord (MDC) for Breaking Organic Glass Plates	Bogdan ZYGMUNT	(2008)16-05-0618-03
超细钝感 HMX 小尺寸拐角装药延迟时间研究	李晓刚	(2008)16-05-0621-04
液体推进剂液滴点火特性的实验研究	余永刚	(2008)16-05-0625-04
底排点火具在高压速率下瞬态燃烧特性的实验研究	陆春义	(2008)16-05-0629-04
低敏感高能发射药等离子体点火研究动态	肖正刚	(2008)16-05-0633-06