

文章编号: 1006-9941(2010)01-0042-05

HTPB 与增塑剂相容性评价的分子动力学模拟

兰艳花, 刘亚青, 付一政

(中北大学山西省高分子复合材料工程技术研究中心, 山西 太原 030051)

摘要: 为评价端羟基聚丁二烯 (HTPB) 与增塑剂相容性的优劣, 采用分子动力学 (MD) 模拟方法对纯 HTPB、增塑剂癸二酸二辛酯 (DOS)、己二酸二辛酯 (DOA)、邻苯二甲酸二丁酯 (DBP)、邻苯二甲酸二辛酯 (DOP) 及 HTPB 与增塑剂组成的共混物的密度、结合能和径向分布函数等进行了计算。结果表明: 比较纯物质溶度参数差值 ($\Delta\delta$) 的大小, 共混物密度增加值, 结合能及分子间径向分布函数值大小均可以得出增塑剂相容性优劣次序为 HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP。

关键词: 高分子物理; 端羟基聚丁二烯 (HTPB); 增塑剂; 相容性; 分子动力学模拟; 径向分布函数

中图分类号: TJ55; O631

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.01.011

1 引言

为了改善端羟基聚丁二烯 (HTPB) 复合固体推进剂的力学性能, 增加 HTPB 柔韧性并使之易于加工, 需要在复合固体推进剂配方中加入增塑剂^[1], 理想的增塑剂必须与 HTPB 具有良好的相容性, 才能保证推进剂具有优异的性能, 否则推进剂的安定性下降、爆发点下降、起爆感度改变、接触材料性能变坏^[2]。开发具有高能量、综合性能好且成本低的固体推进剂, 相容技术十分关键, 寻找与 HTPB 匹配的增塑剂已成为推进剂配方设计中的关键因素。HTPB 可以使用多种增塑剂增塑, 主要有癸二酸二辛酯 (DOS)、己二酸二辛酯 (DOA)、邻苯二甲酸二丁酯 (DBP) 和邻苯二甲酸二辛酯 (DOP), 各种增塑剂与 HTPB 的相容性不同, 如何采用合理的方法, 以科学、合理的判据, 准确地评定推进剂的安定性和相容性, 具有重要意义。对相容性进行精确表征是研究推进剂共混体系的基础, 可通过形态学、固体物性和热力学等实验方法表征推进剂组分内高分子共混物相容性。但这些方法或费时费力或存在某些局限性, 与实验研究相比, 分子模拟技术是一种更直接的研究方法, 近年来已有越来越多的科研小

组^[3-6]开始应用分子模拟方法研究推进剂和炸药各组分的相容性, 并得到了一些有意义的结论。本文应用分子动力学 (MD) 模拟方法对 HTPB 与增塑剂 (DOA、DOS、DOP、DBP) 的相容性进行了研究, 通过对 HTPB 与增塑剂的溶度参数差、共混物密度变化、结合能和径向分布函数等预测了共混物的相容性, 模拟结果可以为 HTPB 推进剂的配方设计提供参考。

2 模型构建与模拟方法

2.1 物理模型分子建模过程

运用 Materials Studio (MS) 软件包中 Visualizer 模块依据表 1 建立相应的 HTPB 和 DOA、DOS、DOP、DBP 分子模型, 其中 HTPB 是以羟基封端的由 11 个顺式丁二烯、11 个 1,2-丁二烯和 33 个反式丁二烯重复单元组成聚合度为 55 的嵌段共聚物。采用 Smart Minimization 方法对所构建的分子模型进行结构优化, 选择 Compass 力场^[7]。根据 298 K, 1.01×10^5 Pa 条件下, 相应材料的密度 (HTPB 为 $0.908 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, DOA 为 $0.927 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, DOS 为 $0.915 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, DOP 为 $0.966 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, DBP 为 $1.046 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$), 利用 Amorphous cell 模块分别构建了 HTPB、增塑剂纯物质及 HTPB/增塑剂共混物无定形分子模型。为了使所构建的模型包含 1000 个以上原子, 纯 HTPB 无定形分子模型中包含 2 条 HTPB 嵌段共聚物, DOA、DOS、DOP、DBP 无定形分子模型分别包含 16、14、16、24 个相应的分子。每个共混物无定形分子模型中均包含一条 HTPB 分子链, 相应的 DOA、DOS、DOP、DBP 分子个数分别

收稿日期: 2009-05-05; 修回日期: 2009-06-11

基金项目: 国家重大基础研究发展计划 (973-61338), 中北大学青年科学基金和山西省研究生优秀创新资助项目

作者简介: 兰艳花 (1984-), 女, 硕士研究生, 主要从事含能材料的计算与模拟研究。e-mail: lan_yanhua@163.com

通讯联系人: 刘亚青 (1970-), 女, 教授, 博导。e-mail: zflyq98@163.com

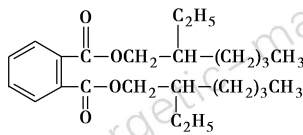
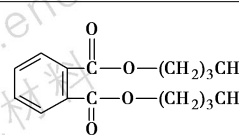
为 8、7、8、12, 而共混物的初始密度为 0.9176, 0.9117, 0.9382, 0.9913 $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ (均按体积比例的加和性获得)。

2.2 MD 模拟细节

首先利用 Smart Minimization 方法对所构建的无定形分子模型进行结构优化, 然后进行 MD 模拟, 采用 Andersen^[8] 控温方法, Berendsen^[9] 控压方法, 各分子起始速度按 Maxwell 分布取样, Velocity Verlet 算法^[10] 进行求解, 范德华和静电作用 (Coulomb), 分别用 Atom-based^[11] 和 Ewald^[12] 方法, 非键截断半径为 0.95 nm, 样条宽度 (spline width) 取 0.1 nm, 缓冲宽度 (buffer width) 取 0.05 nm, 时间步长 1 fs, 进行 250 ps NPT (等温等压) 系综的 MD 模拟, 后 50 ps 用于计算纯物质的溶解度参数以及共混物的密度变化、结合能, 并定义单个的分子链为一个原子集 (sets), 分析分子间的径向分布函数。另外, 为了表明模拟时间是否足够长, 对增塑剂 DOA 进行了 1 ns 的动力学计算。

表 1 HTPB 和增塑剂的分子结构式

Table 1 Chemical structures of HTPB and plasticizers

material	chemical structure
HTPB	$\text{HO}-(\text{H}_2\text{C}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}=\text{C}-\text{CH}_2)_{11}-(\text{H}_2\text{C}-\underset{\text{CH}}{\underset{\text{CH}_2}{\text{C}}})_{11}-(\text{H}_2\text{C}-\overset{\text{H}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}=\text{C}-\text{CH}_2)_{23}-\text{OH}$
DOA	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-(\text{CH}_2)_4-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$
DOS	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}_2-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$
DOP	
DBP	

3 结果与讨论

3.1 HTPB 与增塑剂相容性的理论判据

从热力学角度来看, 相容性就是指推进剂组分形成

均相体系的能力。相容与否决定于混合物混合过程中自由能的变化 (ΔG) 是否小于 0, 即要求 $\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0$ (T 为热力学温度)。由于高分子相对分子质量很大, 混合时 ΔS 很小, 而高分子间混合过程一般都是吸热过程, 即 ΔH 为正值, 因此要满足 $\Delta G < 0$ 比较困难。研究共混物相容性的理论判据有溶度参数 (δ)、Flory Huggins 参数 ($\chi_{1,2}$)、稀溶液黏度法和玻璃化转变温度 (T_g) 等, 其中溶度参数是较为简便的一种表征参数^[13], 可根据 δ 预测高分子混合物之间的相容性。有研究认为^[14] 对于高分子体系, 若分子间没有强极性基团或氢键作用, 两种材料的溶度参数差值 ($\Delta\delta$) 只要满足 $|\Delta\delta| < 1.3 \sim 2.1 (\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$ 两者就相容, 因此可根据 δ 来判断高分子混合物之间的相容性。

3.2 HTPB 与增塑剂相容性的溶度参数判断

所得 HTPB 与增塑剂溶度参数值 δ_{MD} 见表 2, 为了比较同时给出实验值 δ_{exp} 。DOA 在 250 ps 和 1 ns 分子动力学模拟后的溶解度参数值相差不大, 说明 250 ps 的动力学平衡时间对本文研究的体系已经足够长。现有的从理论上计算高分子溶度参数的方法主要是 Dunkel 等^[15] 发展的原子与基团贡献法, 表 2 同时给出了根据原子与基团贡献法原理采用 Van Krevelen 和 Small 方法计算的值。由表 2 可见, 除了 DOP 以外, 分子动力学模拟的结果与实验值及 Van Krevelen 和 Small 方法计算值均吻合较好, 说明分子动力学方法可用于 HTPB 与增塑剂体系的溶度参数的定量计算。表 3 列出了采用不同计算方法所得 $\Delta\delta$, 从表 2 和表 3 可见, 虽然采用不同的计算方法, 所得的溶度参数不同, 但不论采用哪种方法, 通过计算 $\Delta\delta$ 判断共混物相容性的结果均一致, 即 HTPB 与本文所选增塑剂均属于相容体系, 相容性优劣的次序为: HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP。

表 2 HTPB 及增塑剂的溶度参数

Table 2 Solubility parameters of HTPB and plasticizers

system	$(\text{J} \cdot \text{cm}^{-3})^{1/2}$			
	$\delta_{\text{exp}}^{[15]}$	$\delta_{\text{Van Krevelen}}^{[15]}$	$\delta_{\text{Small}}^{[15]}$	δ_{MD}
HTPB	17.80	17.73	17.68	17.06
DOA	17.61	17.20	17.38	16.72
DOA ¹⁾	17.61	17.20	17.38	16.39
DOS	17.63	17.14	17.24	16.74
DOP	18.22	17.89	18.21	16.34
DBP	19.03	18.67	19.05	18.85

Note: 1) molecular dynamics calculation performed during 1 ns of DOA.

表 3 采用不同方法所得 $\Delta\delta$ Table 3 $\Delta\delta$ calculated using various methods ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$)^{1/2}

system	$\Delta\delta_{\text{exp}}$	$\Delta\delta_{\text{van Krevelen}}$	$\Delta\delta_{\text{Small}}$	$\Delta\delta_{\text{MD}}$
HTPB/DOA	0.19	0.53	0.30	0.34
HTPB/DOS	0.17	0.59	0.44	0.32
HTPB/DOP	0.42	0.16	0.53	0.72
HTPB/DBP	1.23	0.94	1.37	1.79

3.3 密度变化率与相容性优劣的关系

为了比较,以相容性好的 HTPB/DOS 与相容性差的 HTPB/DBP 为例,给出模拟前后共混物的构象变化图(图 1)。通过分析 HTPB/增塑剂在 MD 模拟前后的构象变化,可以发现,在 MD 模拟前,增塑剂均匀分布于 HTPB 分子中,经过 250 ps MD 模拟后,对于相容性较好的共混体系,两组分间有较强的相互作用,共混物体积减少,密度增大,而相容性较差时,共混物体积增大,密度减小。表 4 列出经过 MD 模拟后,共混物密度变化情况,其中定义密度变化率为: $(\rho_{\text{after}} - \rho_{\text{before}}) / \rho_{\text{before}}$ 。由表 4 可见密度变化率的次序为: HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP,可见 HTPB 与增塑剂相容性越好,密度增加率越大。

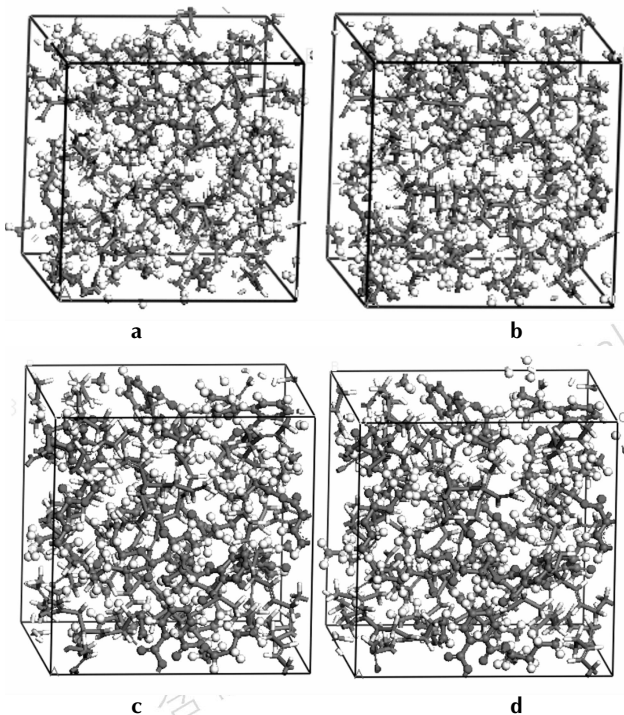


图 1 MD 模拟前后共混物构象变化

Fig.1 The conformation changes of blend before and after MD simulations (conformation of HTPB/DOS before (a) and after (b) MD simulation, conformation of HTPB/DBP before (c) and after (d) MD simulation)

表 4 MD 模拟前后密度变化值

Table 4 Density change before and after MD simulation

system	ρ_{before}	ρ_{after}	$(\rho_{\text{after}} - \rho_{\text{before}}) / \rho_{\text{before}}$
HTPB/DOA	0.9143	0.9254	1.21%
HTPB/DOS	0.9120	0.9306	2.04%
HTPB/DOP	0.9385	0.9121	-1.75%
HTPB/DBP	0.9916	0.8625	-13.02%

3.4 结合能大小与相容性优劣的关系

相容性的本质是各组分的分子间相互作用,而各组分间的相互作用直接影响其机械强度和感度等性能,同时推进剂的其它物理、化学和爆炸性质均与其聚集状态和分子间相互作用有关^[16-17]。寻找与推进剂结合能大的高分子黏结剂和匹配好的助剂已成为推进剂及 PBX 配方设计中的关键因素。分子间相互作用能 (ΔE) 或分子间结合能 ($-\Delta E$) 可定量地表征分子间相互作用的强度^[18-22]。以稳定构型下各体系的总能量进行分子间相互作用能计算,HTPB 与增塑剂的平均相互作用能 (E_{inter}) 可表示为: $E_{\text{inter}} = E_{\text{total}} - (E_{\text{plasticizers}} + E_{\text{polymer}})$, 其中 E_{total} 为 HTPB/增塑剂的平均总能量, $E_{\text{plasticizers}}$ 和 E_{polymer} 分别为增塑剂和 HTPB 的平均单点能,定义结合能 (E_{bind}) 为相互作用能的负值,即 $E_{\text{bind}} = -E_{\text{inter}}$ 。由表 5 可见结合能的大小次序为: HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP,可见 HTPB 与增塑剂相容性越好,分子间相互作用能越大。

表 5 HTPB 与增塑剂的相互作用能

Table 5 Interaction energy of HTPB and plasticizers

system	E_{total}	$E_{\text{plasticizers}}$	E_{polymer}	E_{bind}
HTPB/DOA	-938.73	-143.55	56.27	851.11
HTPB/DOS	-1139.19	121.43	59.25	1319.87
HTPB/DBP	-902.59	-92.72	22.88	832.75

3.5 径向分布函数与相容性优劣的关系

径向分布函数 $g(r)$ 是反映材料微观结构的特征物理量,它表示在一个分子周围距离为 r 的地方出现另一个分子的概率密度相对于随机分布概率密度的比值。图 2 分别给出了 HTPB/增塑剂共混物中 HTPB 与增塑剂的分子间径向分布函数(为了节省版面,本文只给出相容性较好的 HTPB/DOS 和相容性较差的 HTPB/DBP),分子间径向分布函数可以揭示非键原子间相互作用方式和本质,氢键作用范围为 0.26 ~

0.31 nm, 范德华作用范围为 0.31 ~ 0.50 nm。由图 2 可见, HTPB 与增塑剂分子间主要作用方式为范德华作用。另外, 分子间的 $g(r)$ 可以用来判断共混物的相容性, 混合物的径向分布函数 $g(r)$ 越是高于单一物质的径向分布函数, 相容性越好, 反之, 则会发生相分离^[23-25]。HTPB/DOS 和 HTPB/DBP 中同种物质 (HTPB-HTPB, DOS-DOS, DBP-DBP) 的径向分布函数均比共混物 (HTPB/DOS, HTPB/DBP) 的低, 说明 HTPB 与增塑剂 DOS, DBP 都是相容的, 但 DOS 要比 DBP 远离共混物曲线, 故 HTPB/DOS 的相容性要优于 HTPB/DBP。

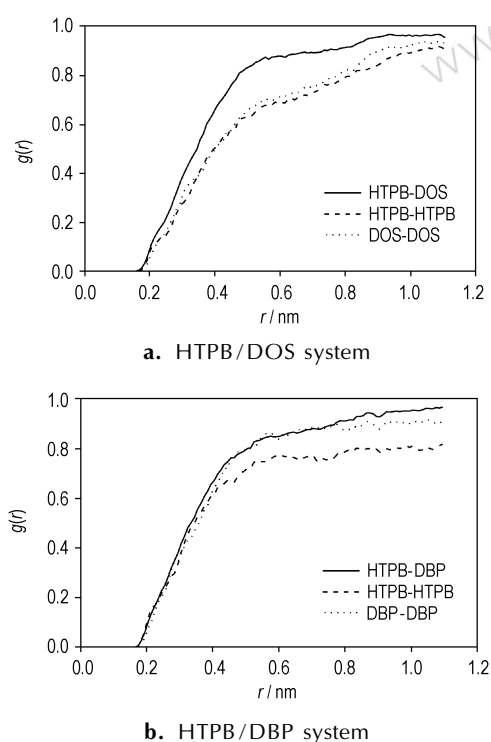


图 2 共混物的分子间径向分布函数

Fig. 2 Intermolecular pair correlation function for HTPB/plasticizers

4 结论

(1) 通过比较溶度参数差值 ($\Delta\delta$) 的大小可以预测 HTPB 与增塑剂相容性的优劣次序为: HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP。

(2) 对于相容性好的 HTPB/增塑剂体系 (HTPB/DOA 和 HTPB/DOS), 经过 MD 模拟后共混物体积会减少, 密度增大, 相容性越好, 密度增加值越大。

(3) HTPB 与增塑剂间相互作用主要为范德华作用, 混合物的径向分布函数 $g(r)$ 越是高于单一物质的

径向分布函数, 相容性越好, 结合能越大。

致谢: 感谢项目合作单位第二炮兵工程学院提供的软件和技术支持。

参考文献:

- [1] 任务正, 王泽山, 杨红梅. 火炸药理论和实践[M]. 北京: 中国北方化学工业总公司, 2001: 594-595.
REN Wu-zheng, WANG Ze-shan, YANG Hong-mei. Theory and Practice of Explosive[M]. Beijing: China North Chemical Industries Corp., 2001: 594-595.
- [2] 罗延龄, 薛丹敏. 端羧基聚丁二烯液体橡胶的合成与表征[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2000, 4(2): 29-33.
LUO Yan-ling, XUE Dan-min. Synthesis and characterization of HCTPB[J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2000, 4(2): 29-33.
- [3] 李倩, 姚维尚, 谭惠民. 叠氮粘合剂与硝酸酯溶度参数的分子动力学模拟[J]. 含能材料, 2007, 15(4): 370-373.
LI Qian, YAO Wei-shang, TAN Hui-min. Molecular dynamics simulation of solubility parameter of azide binders and nitrate ester[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2007, 15(4): 370-373.
- [4] Rachid H, Lussier L S, Ringuette S. On the correlation between miscibility and solubility properties of energetic plasticizers/polymer blends: Modeling and simulation studies[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2008, 33(4): 301-310.
- [5] 付一政, 刘亚青, 兰艳花. 端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(7): 1267-1272.
FU Yi-zheng, LIU Ya-qing, LAN Yan-hua. Molecular dynamics simulation on compatibility of hydroxyl-terminated polybutadiene/plasticizer blends[J]. *Acta Phys-Chim Sin*, 2009, 25(7): 1267-1272.
- [6] 赵贵哲, 付一政, 兰艳花. HTPB/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟和介观模拟[J]. 化学学报, 2009, 67(19): 2233-2238.
ZHAO Gui-zhe, FU Yi-zheng, LAN Yan-hua. Molecular dynamic simulations and mesoscopic dynamic simulations on the compatibility of HTPB/plasticizer blends[J]. *Acta Chim Sinica*, 2009, 67(19): 2233-2238.
- [7] Sun H. COMPASS: An ab initio force-field optimized for condensed-phase applications-overview with details on alkane and benzene compounds[J]. *The Journal of Physics Chemistry B*, 1998, 102(38): 7338-7364.
- [8] Andersen H C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature[J]. *The Journal of Chemistry Physics*, 1980, 72(4): 2384-2393.
- [9] Berendsen H J C, Postma J P M, Gunsteren W F, et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath[J]. *The Journal of Chemistry Physics*, 1984, 81(8): 3684-3690.
- [10] Allen M P, Tildesley D J. Computer simulation of liquids[M]. Oxford: Clarendon Press, 1987: 78-82.
- [11] Karasawa N, Goddard W A. Force fields, structures and properties of poly(vinylidene fluoride) crystals[J]. *Macromolecules*, 1992, 25(26): 7268-7281.
- [12] Ewald P P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale[J]. *Annalen der Physik*, 1921, 369(3): 253-287.
- [13] 孙小巧, 范晓薇, 居学海. 推进剂组分相容性研究方法[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2007, 5(4): 30-36.

- SUN Xiao-qiao, FAN Xiao-wei, JU Xue-hai. Research methods on component compatibility of propellants[J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2007, 5(4): 30–36.
- [14] Mason J A, Sperling L H. *Polymer Blends and Composites* [M]. New York: New York Plenum Press, 1976: 513–514.
- [15] 李华昌, 符斌. 实用化学手册 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2006.
- LI Hua-chang, FU Bin. *Practical Handbook of Chemistry* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2006.
- [16] Hildebrand J H, Scott R L. *The Solubility of Non-Electrolytes* [M]. New York: Reinhold Publishing Co, 1950: 424–434.
- [17] 任玉立, 陈少镇. 关于硝化纤维素浓溶液的研究-体系溶度参数与相容性[J]. *火炸药学报*, 1981(1): 9–16.
- REN Yu-li, CHEN Shao-zhen. Study on concentrated solution of nitrocellulose- solubility parameters and system compatibility[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 1981(1): 9–16.
- [18] 肖继军, 黄辉, 肖鹤鸣. HMX 晶体和 HMX/F2311PBXs 力学性能的 MD 模拟研究[J]. *化学学报*, 2007, 65(17): 1746–1750.
- XIAO Ji-jun, HUANG Hui, XIAO He-ming. MD simulation study on the mechanical properties of HMX crystals and HMX/F2311PBXs[J]. *Acta Chim Sinica*, 2007, 65(17): 1746–1750.
- [19] Radovan T, Alessandro C, Marco F. Computer simulation of polypropylene/organoclay nanocomposites: Characterization of atomic scale structure and prediction of binding energy [J]. *Polymer*, 2004, 45(23): 8075–8083.
- [20] Paolo C, Giulio S, Sabrina P. Many-scale molecular simulation for ABS-MMT nanocomposites: upgrading of industrial scraps [J]. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2008, 107(1–2): 169–179.
- [21] 朱伟, 肖鹤鸣, 赵峰. HMX/TATB 复合材料弹性性能的 MD 模拟 [J]. *化学学报*, 2007, 65(13): 1223–1228.
- ZHU Wei, XIAO He-ming, ZHAO Feng. Molecular dynamics simulation of elastic properties of HMX/TATB composite [J]. *Acta Chim Sinica*, 2007, 65(13): 1223–1228.
- [22] Subhra M, Golok B, Nando K. Mechanical and dynamic mechanical properties of miscible blends of epoxidized natural rubber and poly(ethylene-co-acrylic acid) [J]. *Polymer*, 1996, 37(24): 5387–5394.
- [23] Clancy T C, Putz M. Mixing of isotactic and syndiotactic polypropylenes in the melt [J]. *Macromolecules*, 2000, 33(25): 9452–9463.
- [24] Akten E D, Mattice W L. Monte carlo simulation of head-to-head, tail-to-tail polypropylene and its mixing with polyethylene in the melt [J]. *Macromolecules*, 2001, 34(10): 3389–3395.
- [25] Gestoso P, Brisson J. Towards the simulation of poly(vinyl phenol)/poly(vinyl methyl ether) blends by atomistic molecular modelling [J]. *Polymer*, 2003, 44(8): 2321–2329.

Molecular Dynamics Simulation on Compatible Evaluation of HTPB and Plasticizers Blends

LAN Yan-hua, LIU Ya-qing, FU Yi-zheng

(Research Center for Engineering Technology of Polymeric Composites of Shanxi Province, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: The density, binding energy and radical distribution function of HTPB/plasticizers blends and binder hydroxyl-terminated polybutadiene (HTPB), and plasticizer dioctyl sebacate (DOS), dioctyl adipate (DOA), dibutyl phthalate (DBP), dioctylphthalate (DOP) were calculated by molecular dynamics simulation (MD) for evaluating compatibility of HTPB and plasticizers. The results show that $\Delta\delta$ value of pure substance, the density added value, binding energy and radical distribution function value, the compatibility of HTPB and plasticizers can be obtained, and the order of compatibility are as follows: HTPB/DOS > HTPB/DOA > HTPB/DOP > HTPB/DBP.

Key words: polymer physics; hydroxyl-terminated polybutadiene (HTPB); plasticizer; compatibility; molecular dynamics simulation; radial distribution function

CLC number: TJ55; O631

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.01.011