文章编号:1006-9941(2016)03-0269-06

DIANP 对 NC 溶塑作用的实验与模拟

齐晓飞,严启龙,刘 萌,胡 米 (西安近代化学研究所,陕西西安710065)

aterials.org.cn またが料 完(DIANIE 摘 要:用动态流变实验和扫描电子显微镜观察对比研究了1,5-二叠氮-3-硝基氮杂戊烷(DIANP)和硝化甘油(NG)溶塑硝化纤 维素(NC)的速率和效果,用分子动力学模拟方法对 DIANP、NG、NC的溶度参数和 DIANP、NG 在 NC 中的扩散系数进行了模拟 计算,采用介观动力学模拟方法得到了 NC/DIANP 和 NC/NG 共混体系的介观形貌。结果表明,与 NG 相比, DIANP 溶塑 NC 速 率较快,二者在 NC 中的扩散系数分别为1.39×10⁻¹⁰ m² • s⁻¹和2.24×10⁻¹⁰ m² • s⁻¹。相对于 NG, DIANP 溶塑效果更好,两种共 混体系的显微形貌特征与介观动力学模拟结果具有很高的一致性。溶度参数计算结果表明, DIANP 的分子间作用力大小与 NC 较 为相似, 而 NG 溶度参数的范德华力和静电力分量所占的比例与 NC 接近。

关键词:1,5-二叠氮-3-硝基氮杂戊烷(DIANP);硝化纤维素(NC);溶塑;分子动力学;介观动力学

中图分类号: TJ55; V512; O641 文献标志码:A **DOI**: 10.11943/j.issn.1006-9941.2016.03.010

1 引 言

硝化纤维素(NC)是改性双基推进剂的粘结剂基 体,它对能量的贡献比复合推进剂与硝酸酯增塑聚醚 推进剂的惰性粘结剂组分(端羟基聚丁二烯、聚乙二 醇和环氧乙烷/四氢呋喃共聚醚等)要大得多。但由 于 NC 分子结构为刚性,其玻璃化转变温度较高,且它 的常用增塑剂硝化甘油(NG)感度高,导致改性双基 推进剂低温易脆变和感度较高,限制了该类推进剂的 应用。在这种背景下,寻求并应用含能增塑剂替代 NG^[1-2],已成为改性双基推进剂进一步发展的关键。

在众多含能增塑剂之中,1,5-二叠氮-3-硝基氮杂 戊烷(DIANP)因具有感度低、能量高、热稳定性好、凝 固点低且燃烧气体分子量小等优点^[3],已成功应用于 发射药并改善其低温力学性能^[4-6],这为 DIANP 应用 于改性双基推进剂提供了一定的借鉴。在前期工作 中[7],本课题组通过分子动力学模拟方法研究了 DIANP对 NC 力学性能的影响及其作用机理,发现 DIANP降低 NC 刚性、增强其塑性的效果比 NG 更为 显著, 替代 NG 后可有效改善推进剂的力学性能, 因 此, DIANP 在改性双基推进剂中极具应用前景。

基金项目: 燃烧与爆炸技术重点实验室基金项目(9140C350319140C35161) 作者简介:齐晓飞(1981-),男,副研究员,主要从事固体推进剂配方 设计与模拟研究。e-mail: fayeqee@ aliyun.com

由于改性双基推进剂依靠增塑剂溶塑 NC 而固化 成型,因此研究 DIANP 对 NC 的溶塑作用对于推进剂 工艺参数的确定具有重要意义,同时也是进一步研究 推进剂其他性能的基础所在。本研究采用动态流变实 验和扫描电子显微镜对比了 DIANP 和 NG 溶塑 NC 的速率和效果,并通过分子动力学和介观动力学模拟 在微、介观尺度揭示两种增塑剂对 NC 溶塑作用存在 差异的原因,以期为 DIANP 推广应用于改性双基推进 剂提供参考。

2 实验与模拟

2.1 实验

2.1.1 配方及样品制备

将 NC 球形药分别与等质量的 NG 和 DIANP 加 入 HKV-II 型立式捏合机,真空捏合0.5 h,取样。其中 NC的氮质量分数为11.87%。

2.1.2 实验方法

动态流变实验:采用 HAAKE RS300 流变仪(德 国)以平行板方式测试样品在小形变震荡剪切条件下 的储能模量(G'),得到其动态时间谱;测试频率 6.28 rad · s⁻¹,应变幅度 3%,温度 70℃(推进剂实际 固化温度)。

微观形貌分析:利用 JSM-5800 扫描电子显微镜 (日本)观察流变实验后 NC/DIANP 和 NC/NG 共混 体系的形貌结构。

收稿日期: 2015-05-11;修回日期: 2015-07-02

2.2 模拟

2.2.1 分子动力学模拟

采用 Materials Studio(MS)软件^[8]建立 NC、增塑 剂纯物质和等质量比的 NC/DIANP 和 NC/NG 共混 体系模型,模型中 NC 分子链、DIANP 和 NG 分子的 数目分别为 2 条(NC 分子链分别标记为 NC-A 和 NC-B,每条分子链由 20 个聚合单元组成)、102 个和 90 个,其中 NC/DIANP 共混体系的模型如图 1 所示, 其余略。



图 1 NC/DIANP 共混体系模型 Fig. 1 Model of NC/DIANP blend system

在 70 ℃(推进剂实际固化温度)和1.01×10⁵ Pa 条件下,分别对纯物质和共混体系模型进行分子动力 学模拟,获取分子动力学轨迹并进行分析,得到均方位 移、分子体积、溶度参数(δ)和单体摩尔体积(V_{mon})等 数据。分子动力学模拟的参数设定参见文献[9]。

2.2.2 介观动力学模拟

利用 MS 软件的 MesoDyn 模块进行共混体系的 介观动力学模拟前,需由分子动力学模拟计算纯物质 的 V_{mon} 和 δ 等参数,此部分的计算方法参见文献[10], 具体的计算结果见 3.2。

将介观动力学模拟参数、NC 与增塑剂的质量比 1:1和温度 70 ℃等数据,输入 MesoDyn 模块进行步 长为 20 ns,总步数为 50000 步,总时间为 1000 μs 的 介观动力学模拟,获得共混体系的介观形貌。介观动 力学模拟的其他参数设定参见文献[11]。

3 结果与讨论

3.1 NC 的溶塑速率

从微观角度讲,NC的溶塑实质上是增塑剂分子 扩散进入NC分子链之间,使其链段间距增加,链段迁 移形成物理交联网络的结构转变过程^[12],而这一过程 的快慢与增塑剂分子的扩散速率密切相关,并通过动 态流变特征量予以反映^[13]。因此,本研究通过动态流 变实验测得 DIANP 和NG 溶塑 NC 过程中 G'的动态 时间谱,同时通过分子动力学模拟得到两种共混体系 微观模型中增塑剂分子的均方位移(MSD),结果如 图 2所示。



图 2 70 ℃下共混体系 *G*'的动态时间谱和增塑剂的 *MSD* **Fig. 2** Curves of *G*' vs *t* for two blend systems and *MSD* vs *t* for plasticizer at 70 ℃

由图 2a 可知,由于增塑剂种类的不同,两种共混 体系 G'随时间的变化曲线存在很大差异。对于 NC/ DIANP 共混体系而言, 溶塑初始时 DIANP 分子即迅 速扩散进入 NC 分子链之间,使其迅速溶胀完全并随 之发生迁移,微观上形成物理交联网络,导致 G'急剧 增大;之后,随着物理交联网络的逐步完善,NC分子 链相互碰撞的机会增加,其溶胀和迁移运动均受到抑 制^[12-13],因而 G'的变化速率逐渐减小,直至 1500 s 后 体系的结构特征趋于稳定,G'值基本趋近于 10⁵ Pa 左 右。相比之下,NC/NG 共混体系 G'的变化曲线呈现 倒"S"型,G′的变化速率在溶塑初期多出了一个逐渐 增大的过程,这是由于 NG 分子的扩散速率相对较慢, 扩散进入 NC 分子链之间并使其完全溶胀需要一定的 时间,此时间段内 NC 分子链的迁移运动存在一个加 速的过程,导致溶塑初期 G'的变化速率相对较小;此 外,体系中 NC 完全溶塑所需的时间由 1500 s 大幅增 加至 35000 s 左右。根据上述实验结果可知, 与 NG 相比, DIANP 溶塑 NC 的速率较大, 这一结果与其较 强的扩散能力密切相关。

MSD 反映模拟体系中分子的扩散运动能力^[13]。 由图 2b 可知, DIANP 分子的 MSD 曲线斜率明显大于 NG 分子, 直观地反映出前者的扩散运动能力强于后 者。将 MSD 曲线数值代入计算分子扩散系数的 Einstein-Smoluchowski 方程^[14]:

$$D = \lim_{t \to \infty} \frac{\langle |r_t - r_0|^2 \rangle}{6t}$$
(1)

式中,*r*₀表示分子的初始坐标,*r*_t表示 *t* 时刻分子的坐标, 其轨迹即 *MSD* 曲线。计算得到 DIANP 和 NG 分子在 NC 分子中的扩散系数分别为 2.24×10⁻¹⁰ m² · s⁻¹和 1.39×10⁻¹⁰ m² · s⁻¹,前者的扩散运动能力明显强于 后者。这与图 2a 的结果相吻合。

综合实验和模拟结果可知,与 NG 相比, DIANP 分子在 NC 分子中的扩散运动能力相对较强,在溶塑 初始即能够迅速扩散进入 NC 分子链之间,大幅提高 了溶塑 NC 的速率,缩短了完全溶塑所需的时间。

3.2 NC 的溶塑效果

NC 被溶塑成型后,介观上为两相体系(NC 与增 塑剂)组成,若通过考察溶塑产物相态结构分布的方 法检验增塑剂溶塑 NC 的效果,还需借助介观动力学 模拟的方法。本研究两种共混体系进行介观动力学模 拟的参数见表1。

将表 1 数据和 Flory-Huggins 相互作用参数(χ)公式^[11]:

$$\chi = V_{\rm mon} (\delta_{\rm NC} - \delta_{\rm Plasticizer})^2 / RT$$
⁽²⁾

式中, V_{mon} 为 NC 和增塑剂 V_{mon} 的平均值, R 为理想气体常数, 8.314 J·mol⁻¹·K⁻¹, T 为绝对温度, 343 K。 求得 χ 后乘以 RT 即为进行介观动力学模拟的相互作 用参数 ($v^{-1}\varepsilon_{II}$), 计算得到 NC 与 DIANP 和 NG 的 $v^{-1}\varepsilon_{II}$ 分别为 1082 J·mol⁻¹和 4032 J·mol⁻¹。

表1 分子动力学模拟所得 NC、DIANP 和 NG 的性质 Table 1 Properties of NC, DIANP and NG by molecular dynamics simulations

parameters	N _{Mes}	$V_{\rm mon}/{\rm nm}^3 \cdot {\rm mol}^{-1}$	$\delta/J^{1/2} \cdot cm^{-3/2}$
NC N	8	167.28	19.71
DIANP	1, 41	157.87	22.29
NG	K.V.	140.37	24.83

Note: N_{Mes} is number of beads for coarse-grained Gaussian chain, V_{mon} is molar volume of one of the monomers, δ is solubility parameter.

NC、DIANP和NG的N_{Mes}分别为8、1和1,将三

者分别用 8 个、1 个和 1 个珠子表示; NC 和两种增塑 剂珠子间的 $v^{-1} \varepsilon_{\parallel}$ 分别设定为 1082 J·mol⁻¹和 4032 J·mol⁻¹;进行 1000 μ s 的介观动力学模拟,得 到 NC/DIANP 和 NC/NG 共混体系的介观形貌图,如 图 3a 所示;同时,图 3c 还示出了两种共混体系溶塑 产物形貌结构的扫描电镜观察结果。



c. scanning electron microscope photos

图 3 共混体系的介观形貌和扫描电镜照片



图 3a 中红色表示 NC 相,绿色表示增塑剂相,同时从内部取出了增塑剂相的介观形貌切片(图 3b)。由图 3a 和图 3b 可知,虽然两种增塑剂均分散于 NC中,但 NC/NG 共混体系中两相界面清晰,NC 和 NG 相存在各自团聚、融合的现象,发生了一定程度的同相 归并(相分离);而 NC/DIANP 共混体系中两相界面 较为模糊,且两相互相贯穿、缠绕,没有发生明显的相 分离,可见 DIANP 与 NC 混合的更好。

由图 3c 可知,由于 DIANP 和 NG 溶塑 NC 的能 力不同,两种溶塑产物的微观结构存在差异。与 NG

含能材料

相比, DIANP 溶塑 NC 的效果更好, DIANP 分子扩散 进入 NC 球形药内部, 使其溶胀、NC 分子链逐渐伸 展、互相渗透缠绕的程度较高, 因而溶塑产物的微观结 构照片上基本观察不到 NC 球形药的轮廓。相比之 下, NC/NG 共混体系的溶塑产物存在明显的球形药 轮廓, 表明 NG 溶塑 NC 的效果相对较差, NC 分子链 伸展、缠绕的程度较低, 甚至一些 NC 球形药几乎没有 溶胀, 与周围界限分明, 仍处于球形药的形态。

由此可见,虽然介观动力学模拟的尺度(纳米级) 与扫描电镜观察结果(微米级)相差较大,但模拟与实验结果具有很高的一致性,即与 NG 相比, DIANP 溶 塑 NC 的效果更好。

3.3 溶度参数及增塑剂分子体积

从热力学的角度来看,NC的溶塑属于增塑剂小分子扩散进入NC大分子之间,二者相互混溶形成高分子浓溶液的过程,其溶塑速率和效果必然与组分间的混溶性密切相关,而衡量混溶性好坏的重要物理量是δ,其定义为内聚能密度(*CED*)的平方根。利用分子动力学方法模拟得到NC、NG和DIANP的*CED*、δ及其静电力分量(δ_ε)和范德华力分量(δ_ν),结果见表2。

表 2 NC、DIANP 和 NG 的溶度参数

Table 2 Solubility parameters of NC, DIANP and NG

parameters	<i>CED</i> ∕J ⋅ cm ⁻³	δ /J ^{1/2} · cm ^{-3/2}	$\delta_{\rm E}$ /J ^{1/2} · cm ^{-3/2}	$\delta_{\rm v}$ /J ^{1/2} · cm ^{-3/2}
NC	388.85	19.71	13.09	14.74
DIANP	496.87	22.29	13.33	17.86
NG	616.53	24.83	17.80	17.31

Note: *CED* is cohesive energy density parameter $\delta^2 = \delta_E^2 + \delta_v^2$, δ_E is Electrostatic component, δ_v is van der Waals component.

由表 2 可知,模拟得到的 NC 和 NG 的 δ 值分别为 19.71 J^{1/2} · cm^{-3/2} 和 24.83 J^{1/2} · cm^{-3/2},与文献[15] 中实验值(20.56 J^{1/2} · cm^{-3/2}和 23.12)^{1/2} · cm^{-3/2})吻 合得较好,表明本研究的模拟方法可行,其结果可用于 定性分析。研究表明^[16],若分子上没有强极性基团或 分子间没有氢键作用的两种材料,其溶度参数差值 ($\Delta\delta$)满足 $\Delta\delta$ <1.3~2.1 J^{1/2} · cm^{-3/2},则可判定两种材 料能够混溶。但对于 NC、DIANP 和 NG 而言,其分子 上均有强极性基团,也能够形成氢键作用^[8],因此,虽然 DIANP 和 NG 与 NC 的 $\Delta\delta$ 分别为 2.58 J^{1/2} · cm^{-3/2} 和 5.12 J^{1/2} · cm^{-3/2},二者均大于 2.1 J^{1/2} · cm^{-3/2},但据 此得出 DIANP 和 NG 与 NC 不混溶的结论明显与实 验结果不符,可知 $\Delta\delta$ <1.3~2.1 J^{1/2} · cm^{-3/2} 的判断原 则不适用于本研究的两种共混体系。

根据相似相溶原理,结构相似的物质分子间作用 力的类型和大小相差不大,易于混溶;而结构差异大 的物质,分子间作用力的类型和大小相差较大,则难于 混溶。由于 DIANP 与 NC 的 $\Delta\delta$ 明显小于 NG,因此 从分子间作用力大小相似的角度讲, DIANP 与 NC 的 混溶性要好于 NG,其分子在共混体系中更容易扩散, 在 NC 中的分散效果也更好,这也与 3.1 中 DIANP 溶 塑 NC 速率更快,以及 3.2 中 DIANP 溶塑 NC 效果更 好的结果吻合。从分子间作用力类型看,NC、NG和 DIANP 中范德华力所占比例均较大,分别为55.87%、 51.41%和64.20%,其中NG的分子间作用力分量所 占比例与 NC 非常接近,可能在一定程度上弱化了较 大 $\Delta\delta$ 数值对混溶性的负面影响,因此,虽然 NG 分子 在 NC 中的扩散运动能力相对较弱,且溶塑 NC 的效 果相对较差,但 NC/NG 共混体系仍然能够成为宏观 上均一的整体。

另一方面,在增塑剂分子扩散进入 NC 分子链间 的过程中,增塑剂的分子体积是影响 NC 溶塑的重要 因素。为考察此方面的影响,计算了单个 DIANP 和 NG 分子的体积,结果如图 4 所示。



图 4 DIANP 和 NG 的分子体积

Fig. 4 Volume of DIANP and NG molecules

图 4 中 DIANP 和 NG 的单个分子体积分别为 0.170 nm³和 0.168 nm³,二者几乎没有差别,因此从 分子体积大小的角度而言, DIANP 和 NG 对于 NC 溶 塑的影响没有太大差异。

4 结 论

(1) 与 NG 相比, DIANP 在 NC 中的扩散运动能 力较强, 二者的扩散系数分别为 1.39×10⁻¹⁰ m² · s⁻¹ 和 2.24×10⁻¹⁰ m² · s⁻¹; DIANP 取代 NG 后, NC 完全 溶塑所需的时间由 35000 s 缩短至 1500 s 左右, 同时 溶塑过程的力学响应规律也发生了变化。

(2) 相对于 NC/DIANP 共混体系, NC/NG 共混 体系的溶塑产物存在明显的球形药轮廓, 其介观形貌 也存在一定程度的相分离现象;两种体系的微观形貌 特征与介观动力学模拟结果具有很高的一致性。

(3) NC、NG 和 DIANP 的溶度参数分别为 19.71,24.83 J^{1/2} · cm^{-3/2}和22.29 J^{1/2} · cm^{-3/2}, DIANP 的分子间作用力大小与 NC 更为相似,且三者中范德 华力所占比例均较大,分别为55.87%、51.41% 和 64.20%, NG 的分子间作用力分量所占比例与 NC 相 对接近。

参考文献:

- Arthus P. Energetic polymers and plasticisers for explosive formulaions—A review of recent advances [R]. DSTO-TR-0966, 2000, 23-24.
- [2] 姬月萍,李普瑞,汪伟,等. 含能增塑剂的研究现状及发展[J]. 火炸药学报,2005,28(4):47-51.
 JI Yue-ping, LI Pu-rui, WANG Wei, et al. A review of recent advances of energetic plasticizers[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2005, 28(4):47-51.
- [3] Simmons R L. Azido nitramine: US 4450110[P], 1984.
- [4] 杨建兴, 贾永杰, 刘毅, 等. 含 RDX 的叠氮硝胺发射药热分解与 燃烧性能[J]. 含能材料, 2012, 20(2): 180-183.
 YANG Jian-xing, JIA Yong-jie, LIU Yi, et al. Thermal decomposition and combustion performance of azidonitramine gun propellant containing RDX[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2012, 20(2): 180-183.
- [5] 黄振亚,贾永杰,崔鹏腾,等. 叠氮硝胺发射药的燃烧性能调控技术[J]. 含能材料, 2013, 21(6): 795-799.
 HUANG Zhen-ya, JIA Yong-jie, CUI Peng-teng, et al. Modulating technology for combustion performance of azidonitramine gun propellant[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*(*Hanneng Cailiao*), 2013, 21(6): 795-799.
- [6] 杨建兴,崔鹏腾,贾永杰,等.1,5-二叠氮基-3-硝基氮杂戊烷对 硝化棉的溶塑作用[J].火炸药学报,2011,34(2):84-86,90. YANG Jian-xing, CUI Peng-teng, JIA Yong-jie, et al. Plastication of 1,5-diazido-3-nitrazapentane on nitrocellulose[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2011, 34(2):84-86,90.
- [7]齐晓飞,张晓宏,郭昕,等. NC/DINAP 共混体系力学性能的分子动力学模拟计算[J].火炸药学报,2013,36(2):57-61,81.
 QI Xiao-fei, ZHANG Xiao-hong, GUO Xin, et al. Molecular dynamics simulation on mechanical properties of NC/DIANP

Experiment and Simulation on Plastication of NC by DIANP

QI Xiao-fei, YAN Qi-long, LIU Meng, HU Mi

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

blends[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2013, 36(2): 57-61, 81.

- [8] 庄昌清,岳红,张慧军.分子模拟方法及模拟软件 Materials Studio 在高分子材料中的应用[J].塑料,2010,39(4):81-84. ZHUANG Chang-qing, YUE Hong, ZHANG Hui-jun. Molecular simulation methods and materials studio applications to macromolecular material[J]. *Plastics*, 2010, 39(4):81-84.
- [9] 齐晓飞,张晓宏,李吉祯,等。NC/NG 共混体系的分子动力学模 拟研究[J]. 兵工学报,2013,34(1):93-99.
 QI Xiao-fei, ZHANG Xiao-hong, Ll Ji-zhen, et al. Molecular dynamics simulation of NC/NG blends [J]. Acta Amamentarii, 2013,34(1):93-99.
- [10] 齐晓飞, 王利刚, 郭昕, 等. NC/PEG 共混体系组分间的相互作用 及其微观结构[J]. 含能材料, 2014, 22(3); 281-285.
- QI Xiao-fei, WANG Li-gang, GUO Xin, et al. Interaction between components in NC/PEG blended system and its microscopic structure [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials* (*Hanneng Cailiao*), 2014, 22(3): 281–285.
- [11] 赵贵哲,冯益柏,付一政,等.端羟基聚丁二烯/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, FENG Yi-bo, FU Yi-zheng, et al. Molecular dynamic simulations and mesoscopic dynamic simulations on the compatibility of HTPB/Plasticizer blends[J]. Acta Chimica Sinica, 2009, 67(19): 2233-2238.
- [12] 齐晓飞,张晓宏,张伟,等. NC/NG 共混体系的塑化行为[J]. 推进技术, 2013, 34(6): 843-848.
 QI Xiao-fei, ZHANG Xiao-hong, ZHANG Wei, et al. Study on plasticizing process of NC/NG blends[J]. Journal of Propulsion Technology, 2013, 34(6): 843-848.
- [13] 齐晓飞,张晓宏,郭昕,等. NENA 对 NC 溶塑作用的实验与模拟
 [J]. 固体火箭技术, 2013, 36(4): 516-520.
 QI Xiao-fei, ZHANG Xiao-hong, GUO Xin, et al. Experiments and simulation on plastication of NENA on NC[J]. Journal of Solid Rocket Technology, 2013, 36(4): 516-520.
- [14] Hofman D, Fritz L, Ulbrich J, et al. Molecular simulation of small molecules diffusion and solution in dense amorphous polysiloxanes and polyimides [J]. Computational and Theoretical Polymer Science, 2000, 10(5): 419-436.
- [15] 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 与相溶性[J].火炸药, 1981(1): 9-16.
- [16] Mason J A, Sperling L H. Polymer Blends and Composites[M]. New York: New York Plenum Press, 1976: 513–514.

CLC number: TJ55; V512; O641

with NC.

Abstract: The rate and quality of plasticizing for 1,5-diazido-3-nitrazapentane (DIANP) and nitroglycerine (NG) on nitrocellulose (NC) were compared using dynamic rheology and scanning electron microscope technologies. The solubility parameters of DIANP, NG and NC, and diffusion coefficients of DIANP and NG in NC matrix were calculated by molecular dynamics simulations. Meanwhile, the mesoscopic structure of NC/DIANP and NC/ NG blend systems were established by mesoscopic dynamics simulations. Results show that DIANP has a larger diffusion coefficient $(2.24 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ than that of NG $(1.39 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ in NC matrix. Compared with NC, DIANP has a better plasticizing quality. The microscopic structures of the two blend systems above are in good agreement with the mesoscopic dynamics simulations results. Besides, the theoretical results of solubility parameters reveal that DIANP and NG have similar intermolecular force, whereas NG has almost the same type of intermolecular force

Key words: 1,5-diazido-3-nitrazapentane (DIANP); nitrocellulose (NC); plastication; molecular dynamics; mesoscopic dynamic

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2016.03.010