

# Supporting Information

## 梯恩梯(TNT)爆轰初期形成富碳团簇分子及类石墨结构的 分子动力学模拟

张亚平<sup>a</sup> 杨镇<sup>a</sup> 李启凯<sup>b</sup> 何远航<sup>\*,a</sup>

(<sup>a</sup>北京理工大学 爆炸科学与技术国家重点实验室 北京 100081)

(<sup>b</sup>北京科技大学 新金属材料国家重点实验室 北京 100083)

表 1 为金刚石和石墨结构中碳原子和碳原子之间配位距离<sup>[1]</sup>，图 1 为本文中几种处理条件下的 C-C 之间径向分布函数示意图。而对于原子配位距离，一般认为前两个  $g(r)$  峰值所对应的配位距离具有参考意义。通过比对，先膨胀后降温的两种条件下，第一个峰值所对应的配位距离与石墨结构的配位距离相近，且 5V-10 K/ps 条件下的配位距离为 1.42 Å，5V-50 K/ps 条件下的配位距离为 2.46 Å；第二个峰值对应的配位距离，与石墨结构的配位距离也相近。因此，称这样的结构为类石墨结构是合理的。

表 1 金刚石和石墨原子配位距离

Table 1 Coordination distance of diamond and graphite

|   | Diamond       | Graphite      |
|---|---------------|---------------|
|   | $r(\text{Å})$ | $r(\text{Å})$ |
| 1 | 1.54          | 1.42          |
| 2 | 2.53          | 2.46          |
| 3 | 2.96          | 2.84          |
| 4 | 3.89          | 3.75          |

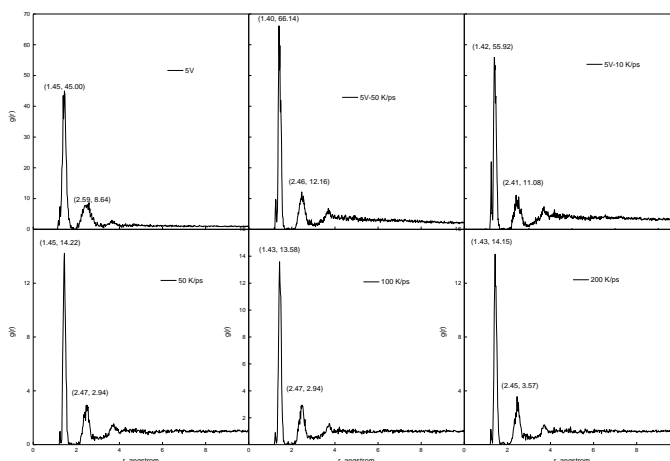


图 1 不同条件下 C-C 之间径向分布函数

Fig 1  $g(r)$  of C-C at variable conditions

[1] Ma, S.Y.; Gu, Y.D.; Qian, S.A. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, **1990**, *18*, 249 (in Chinese). (马森源, 顾永达, 钱树安. 硅酸盐学报, **1990**, *18*, 249.)