

EMPREGO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL NA VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO DA PRESSÃO DE DETONAÇÃO DE EXPLOSIVO PLÁSTICO-PBX

Fausto B. Mendonça^a, Rene F. B. Gonçalves^a, Girum S. Urgessa^b, Koshun Iha^a, Marcela Domingues^a e José A. F. F. Rocco^{a,*}

^aDepartamento de Química, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 12228-900 São José dos Campos – SP, Brasil.

^bSid and Reva Dewberry Department of Civil, Environmental and Infrastructure Engineering, George Mason University, 22030, Fairfax – VA, EUA.

*e-mail: friz@ita.br

MATERIAL SUPLEMENTAR

O registro do decaimento da energia potencial durante a simulação computacional aplicado a dinâmica de moléculas consta na Figura 1S.

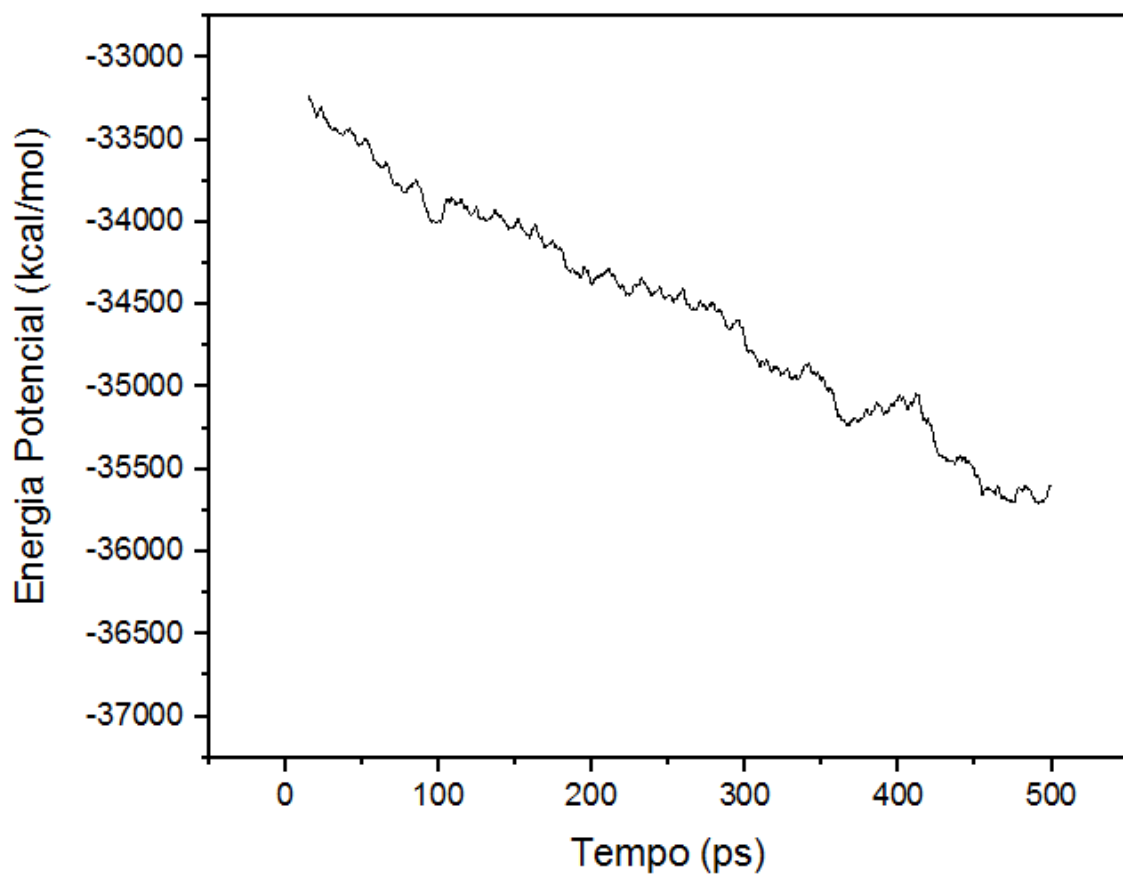


Figura 1S. Decaimento da energia potencial durante a simulação