

文章编号: 1006-9941(2018)04-0311-05

# 含 DNTN 的 CMDB 推进剂的能量特性的计算及其组分的相容性

李祥志, 毕福强, 廉 鹏, 李 辉, 刘国权, 王伯周

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

**摘 要:** 根据最小自由能法, 采用 NASA-CEA 软件, 计算了含 2,3-二羟甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯(DNTN)的复合改性双基(CMDB)推进剂能量特性。采用差示扫描量热法研究了 DNTN 和 CMDB 推进剂组分的相互作用。结果表明, DNTN 替代硝化棉(NC)+硝化甘油(NG)/黑索今(RDX)/Al 推进剂配方中的 RDX, 使体系的理论比冲最大, 达  $2666.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 特征速度逐渐增大, 氧系数逐渐提高。DNTN 全部替代 NC+NG/高氯酸铵(AP)/Al 推进剂配方中的 AP, 使理论比冲最大, 达  $2669.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 燃气平均分子量降低, 燃温升高, 表明 CMDB 推进剂体系中的 DNTN 有良好的应用潜力。DNTN 与 NC/NG、RDX、奥克托金(HMX)、六硝基六氮杂异戊兹烷(CL-20)、吉纳(DINA)和炭黑(C.B)之间没有明显的相互作用, 与邻苯二甲酸铅( $\varphi$ -Pb)和 1,3-二甲基-1,3-二苯基脲(C2)之间相互作用明显。

**关键词:** 2,3-二羟甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯(DNTN); 改性双基推进剂(CMDB); 能量特性; 相容性; 差示扫描量热法(DSC)

中图分类号: TJ55; V512

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.04.004

## 1 引 言

2008 年, 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室 D. E. Chavez 等<sup>[1]</sup>报道了 2,3-二羟甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯(DNTN)的合成及性能研究, 其熔点为  $85 \sim 86 \text{ }^\circ\text{C}$ , 分解温度大于  $140 \text{ }^\circ\text{C}$ , 氧平衡为 0%, 密度为  $1.917 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 爆速为  $9100 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , 生成焓为  $371 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 爆压为 40 GPa, 能量水平与奥克托今(HMX)相当, 此后也陆续有很多关于 DNTN 合成方法的研究<sup>[2-4]</sup>。DNTN 有望代替三硝基甲苯(TNT)作为液相载体炸药, 可显著提高熔铸炸药的能量水平。由于 DNTN 具有低熔点、高能量的特点, 也可以作为增塑剂应用于推进剂中<sup>[4]</sup>。王娟等<sup>[5]</sup>研究了 TNT 对 DNTN 性能的影响, 发现 DNTN 与 10% TNT 混合后, 热分解温度有所升高, 撞击感度有下降趋势。D. A. Reese 等<sup>[6]</sup>对在端羟基聚丁二烯(HTPB)推进剂体系中 DNTN 的应用进行了研究, 发现 DNTN/Al/HTPB 推进剂燃烧放热远高于高氯酸铵(AP)/Al/HTPB 推进

剂, 在未来固体火箭推进剂中有望取代 AP。侯斌等<sup>[3]</sup>研究了溶剂效应对 DNTN 晶体形貌的影响, 发现乙酸乙酯/石油醚体系可有效改善 DNTN 的晶体形貌; 同时通过差示扫描量热法(DSC)研究了 DNTN 与 HTPB 推进剂体系组份的相容性。

目前, 有关 DNTN 在复合改性双基(CMDB)推进剂中的应用未见文献报道。为了评价 DNTN 在 CMDB 推进剂中的应用潜力, 本研究采用 NASA-CEA 软件, 计算了含 DNTN 的 CMDB 推进剂配方的能量特性参数, 考察了理论比冲  $I_{sp}$ 、特征速度  $C^*$ 、燃烧温度  $T_c$  和燃气平均分子量  $M_c$  的变化规律, 利用 DSC 分析了 DNTN 和 CMDB 推进剂常用组分——硝化棉(NC) (含氮量 12.6%)、硝化甘油(NG)、黑索今(RDX)、HMX、六硝基六氮杂异戊兹烷(CL-20)、吉纳(DINA)和炭黑(C.B)、邻苯二甲酸铅( $\varphi$ -Pb)和 1,3-二甲基-1,3-二苯基脲(C2)混合体系的热分解行为, 讨论了 DNTN 和不同类型组分的相互作用, 为在 CMDB 推进剂中 DNTN 的应用研究提供参考。

## 2 实验部分

### 2.1 试剂与仪器

DNTN, 由西安近代化学研究所自制<sup>[4]</sup>, 纯度大于 99%, NC (含氮量 12.6%)、NG、RDX、HMX、CL-20、DINA、C2、 $\varphi$ -Pb 和 C.B 为工业品。

收稿日期: 2017-06-28; 修回日期: 2017-12-21

基金项目: 国家自然科学基金(21243007)

作者简介: 李祥志(1988-), 男, 助理研究员, 主要从事含能材料的合成及应用性能研究。e-mail: nannanbite@163.com

通信联系人: 王伯周(1967-), 男, 研究员, 主要从事含能材料研究。

e-mail: wbz600@163.com

DSC 采用德国耐驰 DSC 204 HP 型差示扫描量热仪测量; 气氛为动态高纯氮, 流量  $50 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ ; 压力  $0.1 \text{ MPa}$ , 升温速率  $10 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$ ; 试样量  $1.0 \sim 2.0 \text{ mg}$ , 试样皿为铝池。

## 2.2 计算方法

采用基于最小自由能原理的 NASA-CEA (Chemical Equilibrium and Applications) 软件<sup>[7-8]</sup>, 计算了含 DNTN 推进剂的能量特性参数包括:  $I_{sp}$ 、 $C^*$ 、 $T_c$  和  $M_c$ , 其中计算标准条件为: 燃烧室压强  $6.86 \text{ MPa}$ , 喷管膨胀比为  $70/1$ 。

## 2.3 相容性试验

将 DNTN 与推进剂各组分按质量比  $1:1$  称取约  $100 \text{ mg}$ , 混合后进行 DSC 试验。相容性的评价标准参考美国 Honeywell 公司提出的用热分析评价相容性标准<sup>[9-10]</sup>, 采用最大放热峰温变化  $\Delta T_p$  评价, 计算公式见式(1):

$$\Delta T_p = T_{p1} - T_{p2} \quad (1)$$

式中,  $T_{p1}$  为参比体系的最大放热峰温,  $^\circ\text{C}$ ;  $T_{p2}$  为混合体系的最大放热峰峰温,  $^\circ\text{C}$ 。评价相容性的标准见参考文献[11]。

## 3 结果与讨论

### 3.1 含 DNTN 的 CMDB 推进剂能量特性计算

为了考察在 CMDB 推进剂配方中 DNTN 的能量特性, 基于 CMDB 推进剂基础配方 A<sup>[12]</sup>。采用 DNTN 逐步取代 CMDB 推进剂配方中的 RDX, 考察推进剂的能量变化规律, 结果见表 1。

由表 1 可知, 随着 DNTN 含量的增加, 理论比冲  $I_{sp}$  和特征速度  $C^*$  等能量特性参数逐渐增大; 当体系中 DNTN 完全替代 RDX 时, 体系理论比冲  $I_{sp}$  最大为  $2666.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 较基础配方提高了  $67.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ; DNTN 含量的增加使体系的氧系数  $\phi$  逐渐增大, 燃温  $T_c$  和燃气平均分子量  $M_c$  逐渐升高。这是由于 DNTN 的氧平衡比 RDX 较好, DNTN 含量逐渐增多时推进剂配方的氧系数提高, 随之而来的是气体产物平均分子量的逐渐增加, 燃烧产物中大分子量的二氧化碳含量增加, 小分子量的氢气、水、一氧化碳的含量减小, 使得推进剂的燃烧更完全, 推进剂燃烧更充分也使推进剂燃温升高。这表明 DNTN 取代 RDX, 不仅略微提高了体系的能量水平, 而且使体系氧系数提高, 燃温升高。

表 1 DNTN 含量对 CMDB 推进剂的能量特性及燃烧产物的影响

Table 1 Effect of DNTN content on the energy characteristics and combustion products of CMDB propellant

content / %			energy characteristics			
DNTN	RDX	$\phi$	$T_c$ /K	$M_c$ /g · mol <sup>-1</sup>	$I_{sp}$ /N · s · kg <sup>-1</sup>	$C^*$ /m · s <sup>-1</sup>
0	27.7	-0.1790	3465.9	27.04	2599.4	1598.9
3	24.7	-0.1725	3491.7	27.16	2610.2	1602.4
6	21.7	-0.1660	3515.4	27.29	2620.0	1605.4
9	18.7	-0.1595	3537.4	27.40	2629.0	1607.9
12	15.7	-0.1530	3557.7	27.52	2637.0	1609.9
15	12.7	-0.1466	3576.5	27.63	2644.1	1611.6
18	9.7	-0.1401	3593.9	27.74	2650.2	1613.0
21	6.7	-0.1336	3610.2	27.84	2656.1	1614.0
24	3.7	-0.1271	3625.4	27.95	2661.3	1614.9
27.7	0	-0.1191	3642.9	28.07	2666.5	1615.6

Note:  $\phi$  is the oxygen coefficient,  $T_c$  is the combustion temperature,  $M_c$  is the average relative molecular mass of gas,  $I_{sp}$  is the specific impulse,  $C^*$  is the characteristic velocity.

为考察在 CMDB 推进剂配方中 DNTN 的能量特性, 基于 CMDB 推进剂基础配方 B<sup>[13]</sup>, 采用 DNTN 逐步取代 CMDB 推进剂配方中的 AP, 考察推进剂的能量变化规律, 结果见表 2。

表 2 DNTN 含量对 CMDB 推进剂的能量特性及燃烧产物的影响

Table 2 Effect of DNTN content on the energy characteristics and combustion products of CMDB propellant

content / %			energy characteristics			
DNTN	AP	$\phi$	$T_c$ /K	$M_c$ /g · mol <sup>-1</sup>	$I_{sp}$ /N · s · kg <sup>-1</sup>	$C^*$ /m · s <sup>-1</sup>
0	30	-0.0284	3383.6	29.39	2521.0	1523.5
3	27	-0.0386	3413.2	29.25	2537.5	1533.8
6	24	-0.0488	3441.6	29.11	2553.3	1543.8
9	21	-0.0590	3468.9	28.96	2568.7	1553.6
12	18	-0.0692	3495.3	28.82	2583.8	1563.3
15	15	-0.0794	3520.9	28.67	2598.5	1572.8
18	12	-0.0897	3545.8	28.53	2613.1	1582.2
21	9	-0.0999	3570.2	28.38	2627.4	1591.5
24	6	-0.1100	3594.0	28.24	2641.5	1600.7
27	3	-0.1203	3617.4	28.09	2655.5	1609.8
30	0	-0.1305	3640.5	27.95	2669.5	1618.8

由表 2 可知, 随着配方中 DNTN 含量增加, AP 含量的减少, CMDB 推进剂的理论比冲  $I_{sp}$  和特征速度  $C^*$  均有提高; 当 DNTN 全部替代体系中的 AP 时,  $I_{sp}$  达到最大值  $2669.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 较基础配方提高了  $148.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ,  $C^*$  提高了  $95.3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。DNTN

含量的增加使体系的氧系数  $\phi$  逐渐降低,燃温  $T_c$  逐渐升高,燃气平均分子量  $M_c$  逐渐降低。这是由于体系中 AP 含量降低时,大分子量的 HCl 随之也减少,推进剂燃烧更完全,推进剂燃温升高。这表明 DNTN 取代 AP,使体系的能量水平大幅度提高,对推进剂能量水平提高是有益的。

### 3.2 DNTN 与 CMDB 推进剂主要组分的相互作用

#### 3.2.1 DNTN 与双基组分 (NC/NG) 的相互作用

NC 和 NG 是构成 CMDB 系列推进剂的基体组分。NC 是不仅能提供能量,还是推进剂机械强度的骨架; NG 是 CMDB 推进剂中 NC 的主溶剂,二者在 CMDB 推进剂中的总含量在 50% 以上<sup>[14]</sup>。DNTN 与 NC/NG 及其混合物的 DSC 曲线见图 1。

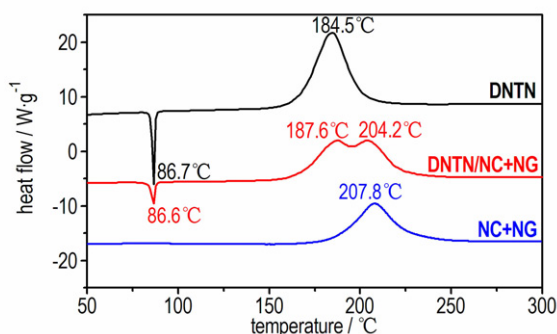


图 1 DNTN 和 NC/NG 的 DSC 曲线

Fig.1 DSC curves of DNTN and NC/NG

由图 1 可知,DNTN 在 86.7 °C 时的尖锐吸热峰为试样熔化峰,峰形尖锐,表明样品纯度较高;在 150 °C 左右 DNTN 开始分解,184.5 °C 时有 1 个明显的放热峰,表明在该温度发生了剧烈的放热分解反应。86.7 °C 的吸热峰是 DNTN 的熔融吸热过程,因此,DNTN 的放热为液相分解过程。和 DNTN 的热分解峰比较,DNTN 和 NC/NG 的混合体系的热分解峰推迟了 3 °C,表明 DNTN 与 NC/NG 相容性良好。对于 DNTN 等硝酸酯化合物,在达到剧烈分解温度之前,也会缓慢分解,释放出  $\text{NO}_2$  气体,释放出的  $\text{NO}_2$  会促进 NC/NG 的分解<sup>[15]</sup>,因此 NC/NG 的分解峰温提前了 3 °C。

#### 3.2.2 DNTN 与高能填料的相互作用

RDX 和 HMX 是 CMDB 系列推进剂的典型氧化剂,CL-20 是高能 CMDB 新型三代材料。DNTN 与 RDX、HMX 和 CL-20 的 DSC 曲线见图 2。

由图 2 可见,DNTN 和 RDX 混合后,RDX 的晶型转变峰<sup>[16]</sup>由 205.2 °C 提前到了 201.6 °C。这是由于 RDX 晶型转变温度与 DNTN 分解峰温相近,DNTN

分解快速放热使 RDX 的晶型转变提前并促使 RDX 分解提前 2.6 °C;混合体系分解放热峰温较 DNTN 单组分提前了 0.6 °C,放热峰位置变化很小,说明两者相互之间影响微弱。DNTN 与 HMX 混合后,混合体系中 HMX 晶型未发生转变,混合体系分解峰温退后了 0.5 °C,说明两者相互之间影响不明显。DNTN 和 CL-20 混合后,混合体系分解峰温退后了 1.3 °C,说明两者相互之间影响不明显。

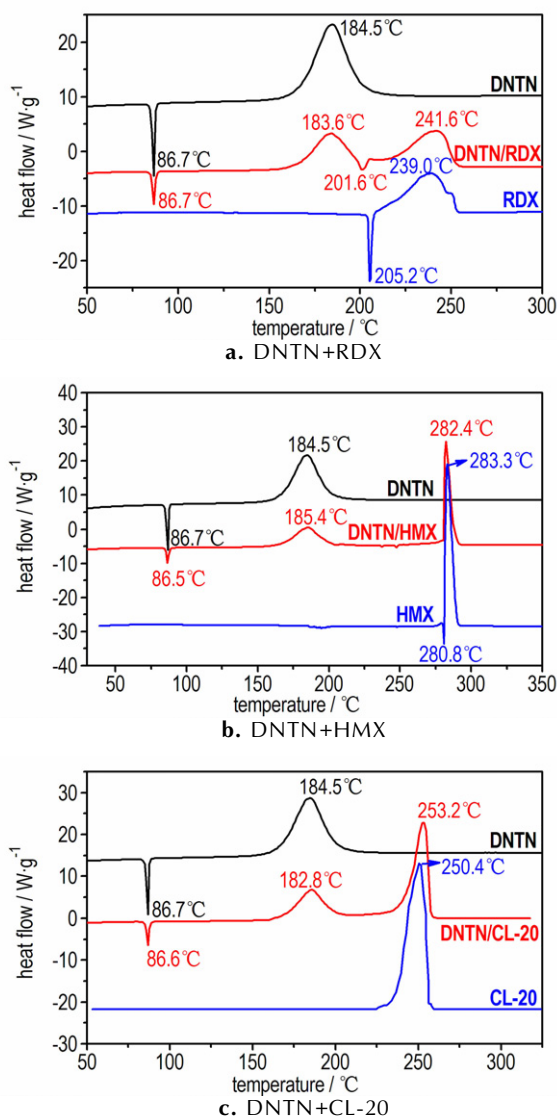


图 2 DNTN 和高能固体填料的 DSC 曲线

Fig.2 DSC curves of DNTN and high energy solid fillers

#### 3.2.3 DNTN 与其它助剂的相互作用

$\varphi$ -Pb 和 C.B 是 CMDB 推进剂的燃烧催化剂,C2 是 CMDB 推进剂的常用安定剂,DINA 是 CMDB 推进剂的增塑剂。DNTN 与  $\varphi$ -Pb、CB、C2 和 DINA 的 DSC 曲线见图 3。

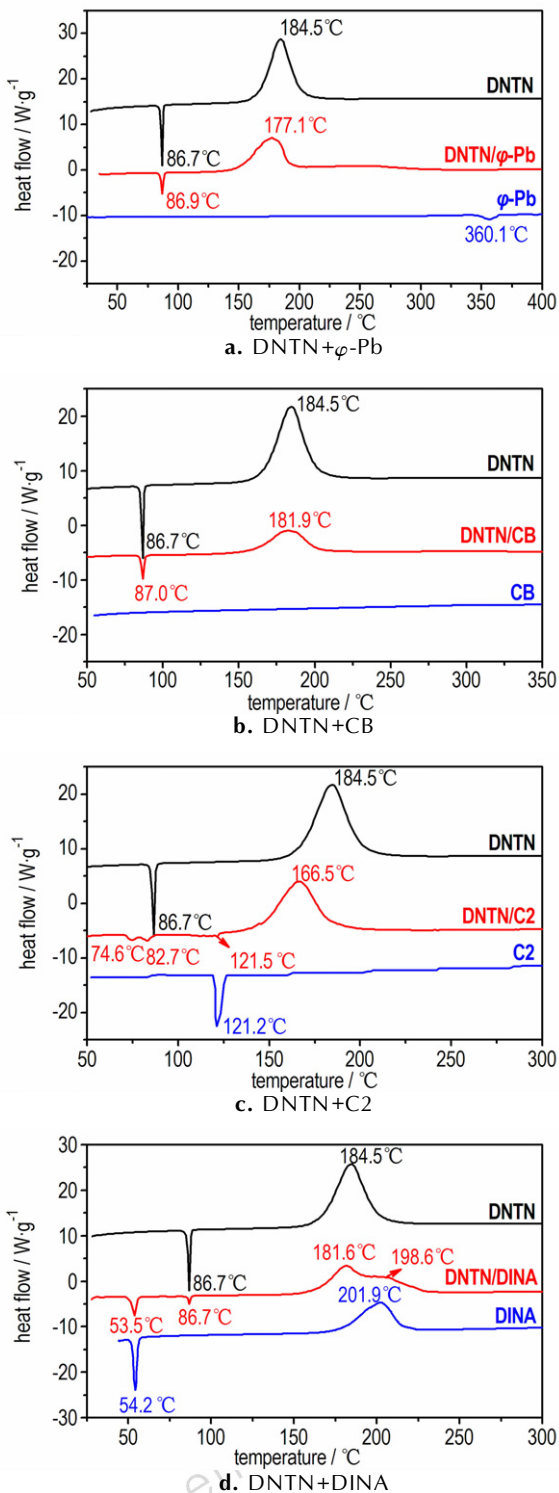


图3 DNTN和其他助剂的DSC曲线  
Fig.3 DSC curves of DNTN and other additives

由图3可见,DNTN和 $\varphi$ -Pb混合后,混合体系的分解峰温较DNTN提前了7.4℃,说明 $\varphi$ -Pb起到了催化剂作用,使放热峰变宽, $\varphi$ -Pb对DNTN分解起到了催化剂作用。在分析温度范围内C.B无热响应,

DNTN和C.B混合后,混合体系的分解峰温较DNTN提前了2.6℃,说明C.B的催化剂作用不明显。DNTN和C2混合后,在74.6℃和82.7℃有两个吸热峰,可能是由于C2和DNTN部分溶解,破坏了两化合物原有的晶体结构中的静电作用和DNTN分子间的弱键作用<sup>[4]</sup>,导致两个化合物熔点都降低;混合体系的分解峰温较DNTN提前了18℃,说明两者相互作用剧烈。DNTN和DINA混合后,DINA在54.2℃时熔融,混合体系的熔点略有降低(0.5℃);混合体系的分解峰温较DNTN提前了2.7℃,说明两者相互作用微弱。

#### 4 结论

(1) DNTN逐渐替代NC+NG/RDX/Al推进剂配方中的RDX时,理论比冲和特征速度逐渐增大,体系的氧系数 $\phi$ 逐渐提高,燃温 $T_c$ 和燃气平均分子量 $M_c$ 逐渐升高,这表明DNTN取代RDX,不仅略为提高了体系的能量水平,而且使体系氧系数提高,燃温升高。

(2) DNTN全部替代NC+NG/AP/Al推进剂配方中的AP时,理论比冲达到最大值2669.1 N·s·kg<sup>-1</sup>,较基础配方提高了148.1 N·s·kg<sup>-1</sup>,特征速度提高了95.3 m·s<sup>-1</sup>,燃气平均分子量降低,燃温升高,这表明DNTN取代AP,可使体系能量大幅提高。

(3) DNTN与NC/NG、RDX、HMX、CL-20、C.B和DINA之间没有明显的相互作用,基本不影响各自分解历程,DNTN与这些组分相容性良好; $\varphi$ -Pb对DNTN分解起到了催化剂作用;DNTN与C2之间存在相互作用明显,在配方设计时应避免DNTN与C2搭配使用。

#### 参考文献:

- [1] Chavez D E, Hiskey M A, Naud D L, et al. Synthesis of an energetic nitrate esters[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2008, 43(47): 8307-8309.
- [2] 于剑昆. 新型熔铸炸药2,3-二羟基甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯的制备、结构表征及性质[J]. *化学推进剂与高分子材料*, 2012, 10(5): 21-21.  
YU Jian-kun. Preparation, structure characterization and properties of novel melt cast explosive 2,3-bis(hydroxymethyl)-2,3-dinitro-1,4-butanediol tetranitrate[J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2012, 10(5): 21-21.
- [3] 侯斌, 何金选, 任晓婷, 等. 2,3-二羟基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯的合成、晶形控制及其HTPB推进剂组分的相容性[J]. *含能材料*, 2017, 25(4): 348-352.  
HOU Bin, HE Jin-xuan, REN Xiao-ting, et al. Synthesis, crystal morphology control of SMX and its compatibility with the components of HTPB[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Han-*

- neng Cailiao*), 2017, 25(4): 348-352.
- [4] 毕福强, 姚君亮, 王伯周, 等. 2,3-二羟甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯的合成、晶体结构及性能研究[J]. 有机化学, 2011, 31(11): 1893-1900.  
BI Fu-qiang, YAO Jun-liang, WANG Bo-zhou, et al. Synthesis, crystal structure and properties of 2,3-bis(hydroxymethyl)-2,3-dinitro-1,4-butanediol tetranitrate[J]. *Chinese Journal of Organic Chemistry*, 2011, 31(11): 1893-1900.
- [5] 王娟, 刘大斌, 周新利. 2,4,6-三硝基甲苯对 2,3-二羟基甲基-2,3-二硝基-1,4-丁二醇四硝酸酯性能的影响[J]. 南京理工大学学报, 2014, 38(1): 161-165.  
WANG Juan, LIU Da-bin, ZHOU Xin-li. Influence of 2,4,6-trinitrotoluene on properties of 2,3-bis(hydroxymethyl)-2,3-dinitro-1,4-butanediol tetranitrate[J]. *Journal of Nanjing University of Science and Technology*, 2014, 38(1): 161-165.
- [6] Resse D A, Son S F, Groven L J. Composite propellant based on a new nitrate ester[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2012, 39(5): 684-688.
- [7] 付小龙, 樊学忠, 毕福强, 等. 硝基呋喃/CMDB 推进剂能量特性[J]. 含能材料, 2014, 22(6): 852-856.  
FU Xiao-long, FAN Xue-zhong, BI Fu-qiang, et al. Energy characteristics of cmdb propellants with nitrofurazan compounds[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2014, 22(6): 852-856.
- [8] 裴江峰, 赵凤起, 宋秀铎, 等. BAMO/AMMO 共聚物基高能固体推进剂能量特性计算和分析[J]. 含能材料, 2015, 23(1): 37-42.  
PEI Jiang-feng, ZHAO Feng-qi, SONG Xiu-duo, et al. Calculation and analysis on energy characteristics of high propellants based on bamo/ammo copolymers[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2015, 23(1): 37-42.
- [9] Beach N E, Canfield V K. Compatibility of explosives with polymers(III). AD721004 [R]. Springfield: NTIS, 1971.
- [10] PEI Jiang-feng, ZHAO Feng-qi, LU Hong-lin. Compatibility study of BAMO-GAP copolymer with some energetic materials[J]. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2016, 124(3): 1301-1307.
- [11] 严启龙, 李笑江, 廖林泉, 等. 四硝基并哌嗪(TNAD)与推进剂组分相容性的 DSC 法评估[J]. 含能材料, 2008, 16(3): 309-314.  
YAN Qi-long, LI Xiao-jiang, LIAO Lin-quan, et al. Compatibility of trans-1,4,5,8-tetranitro-1,4,5,8-tetraazadacalin(TNAD) with some propellant components evaluated by DSC method[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2008, 16(3): 309-314.
- [12] 赵凤起, 徐司雨, 李猛, 等. 改性双基推进剂性能计算模拟[M]. 北京: 国防工业出版社. 2015: 56-58.  
ZHAO Feng-qi, XU Si-yu, LI Meng, et al. Performance calculation and simulation of composite modified double base propellant[M]. Beijing: National Defense Industry Press. 2015: 56-58.
- [13] 周诚, 毕福强, 王伯周, 等. 含 3,5-二硝氨基-1,2,4-三唑胍盐推进剂的能量特性计算[J]. 火炸药学报, 2016, 39(3): 80-82.  
ZHOU Cheng, BI Fu-qiang, WANG Bo-zhou, et al. Energetic characteristics computation of propellants containing hydrazinium 3,5-diamino-1,2,4-triazole[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2016, 39(3): 80-82.
- [14] 巨荣辉, 李吉祯, 樊学忠, 等. DATTO3.5 与 CMDB 推进剂组分的相互作用及相容性[J]. 含能材料, 2016, 24(3): 249-255.  
JU Rong-hui, LI Ji-zhen, FAN Xue-zhong, et al. Interaction and compatibility of DATTO3.5 with main compounds of CMDB propellant[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials(Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(3): 249-255.
- [15] 毕福强, 樊学忠, 付小龙, 等. 1,1'-二羟基-5,5'-联四唑二胺盐和 CMDB 推进剂组分的相互作用研究[J]. 固体火箭技术, 2014, 37(2): 214-218.  
BI Fu-qiang, FAN Xue-zhong, FU Xiao-long, et al. Interaction of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate with CMDB propellant components[J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2014, 37(2): 214-218.
- [16] 刘子如. 含能材料热分解[M]. 北京: 国防工业出版社. 2008: 21-26, 82-84.  
LIU Zi-ru. Thermal analyses for energetic materials[M]. Beijing: National Defense Industry Press. 2008: 21-26, 82-84.

## Computation of Energetic Characteristics of CMDB Propellant Containing DNTN and Compatibility of Their Components

LI Xiang-zhi, BI Fu-qiang, LIAN Peng, LI Hui, LIU Guo-quan, WANG Bo-zhou

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

**Abstract:** The energy characteristics of CMDB propellant containing 2,3-bis(hydroxymethyl)-2,3-dinitro-1,4-butanediol tetranitrate (DNTN) were calculated by NASA-CEA software based on the minimum free energy method. The interaction of DNTN with components of composite modified double base (CMDB) propellant was studied by differential scanning calorimetry (DSC). Results show that the substitution of RDX in nitrocellulose (NC) + nitroglycerin (NG) / Hexogen (RDX) / Al propellant formulation for DNTN makes the system have the greatest theoretical specific impulse, reaching  $2666.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , the characteristic velocity increase gradually, the oxygen coefficient improve gradually. The substitution of all AP in NC+NG/AP/Al propellant formulation for DNTN makes the system have the greatest theoretical specific impulse, up to  $2669.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , the average molecular weight of combustion gases decrease and the combustion temperature rise, indicating that DNTN has good application potential in CMDB propellant. There are not obvious interactions between DNTN with (NC/NG), RDX, Octogen (HMX), hexanitrohexaazaisowurtzitan (CL-20), carbon black (C.B) and N-nitrodihydroxyethylaminodinitrate (DINA), and there are strong interaction between DNTN with lead phthalate ( $\varphi$ -Pb) and 1,3-dimethyl-1,3-diphenylurea (C2).

**Key words:** 2,3-bis(hydroxymethyl)-2,3-dinitro-1,4-butanediol tetranitrate (DNTN); CMDB propellant; energy characteristics; compatibility; differential scanning calorimetry (DSC)

**CLC number:** TJ55; V512

**Document code:** A

**DOI:** 10.11943/j.issn.1006-9941.2018.04.004