

文章编号: 1006-9941(2008)01-0094-06

# 新一代高能固体推进剂的能量特性计算研究

刘晶如, 罗运军, 杨寅

(北京理工大学材料科学与工程学院, 北京 100081)

**摘要:** 在分析硝酸酯乙基硝酸胺(NENA)、六硝基六氮杂异伍兹烷(CL-20)、咪唑类化合物、唑类富氮化合物、贮氢合金五种含能材料的特点和性能的基础上,用电算法对由常规(或含能)黏合剂/含能增塑剂/高能氧化剂/金属燃烧剂组合的一系列配方的能量特性进行了计算,探索了新型高能固体推进剂的途径和思路,并就这些途径给推进剂能量性能带来的影响进行了讨论,提供了新型高能推进剂的八条技术途径。

**关键词:** 物理化学; 固体推进剂; 高能; 含能材料; 能量特性; 理论计算

**中图分类号:** TJ55; V512; O64

**文献标识码:** A

## 1 引言

固体推进剂是火箭和导弹发动机的动力源,固体推进剂的性能直接影响导弹武器的作战效能和生存能力,高能固体推进剂是高性能导弹武器系统研制的技术基础<sup>[1]</sup>。目前,国际上固体推进剂的最高比冲在 280 s 附近,美国提出下一代高能固体推进剂理论比冲达到 310 s。

国内外长期研究表明,新型含能黏合剂、高能量密度材料、含能增塑剂以及燃料添加剂的研究应用是提高固体推进剂能量水平的重要技术途径。因此评估这些新型含能组分对推进剂性能的影响是一项必要的工作。采用国军标方法首先对推进剂比冲等能量特性参数进行理论计算是一种行之有效的方法。王申<sup>[2]</sup>用电算法对含有 CL-20 的 NEPE 固体推进剂配方的能量特性进行了对比分析,研究了在一定固含量下,配方中不同组分含量对体系能量示性参数的影响;洪伟良<sup>[3]</sup>研究了含硝仿肼(HNF)的固体推进剂 HNF/GAP/Al 和 NC/NG/HNF/RDX/Al 的能量特性,发现这两种推进剂在很宽的范围内都能达到 2700 N·s·kg<sup>-1</sup> 以上的理论比冲;刘剑洪<sup>[4]</sup>研究了二硝酰胺铵(ADN)推进剂的能量特性,得出 GAP/ADN 组成的无烟推进剂比冲可达 2607 N·s·kg<sup>-1</sup>,GAP/ADN/RDX 组成的无烟推进剂优化的最高比冲为 2630 N·s·kg<sup>-1</sup>;罗阳<sup>[5]</sup>计算了含 3, 4-二硝基咪唑基氧化咪唑(DNTF)推进剂的能量特性,结果表明 DNTF 的单元推进剂比冲为 2696.4 N·s·kg<sup>-1</sup>,比 CL-20 单元推进剂的理论比冲

还高 31.1 N·s·kg<sup>-1</sup>。

为了给下一代高能固体推进剂的配方设计提供参考,本研究以 NEPE 推进剂现有品种为基础,运用美国 NASA SP-273 热力计算数据库设计出由常规(或含能)黏合剂/含能增塑剂/高能氧化剂/金属燃烧剂组合的一系列配方,并用最小自由能法对加入新型含能材料的固体推进剂的能量进行优化理论计算,同时确定各组分的理论比值。

## 2 提高推进剂能量的主要途径

### 2.1 新型含能增塑剂 NENA 的加入

硝酸酯基乙基硝酸胺(NENA)的主要品种有 N-甲基-2-硝酸酯乙基硝酸胺(MeNENA)、N-乙基-2-硝酸酯乙基硝酸胺(EtNENA)、N-丙基-2-硝酸酯乙基硝酸胺(PrNENA)、N-丁基-2-硝酸酯乙基硝酸胺(BuNENA)等,这类含能增塑剂最突出的特点是比通常增塑剂能量更高,化学安定性更好,感度和玻璃化转变温度( $T_g$ )较低。其相关性能见表 1。

表 1 硝酸酯乙基硝酸胺( $RN(NO_2)CH_2CH_2ONO_2$ )增塑剂的性质  
Table 1 Properties of NENA plasticizers

name	chemical formula	standard enthalpy of formation/kJ·mol <sup>-1</sup>	density /g·cm <sup>-3</sup>	oxygen balance/%
MeNENA	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	1113	1.530	-43.6
EtNENA	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	784	1.320	-67.0
PrNENA	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	503	1.264	-87.0
BuNENA	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	259	1.211	-104.0
PentylNENA	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	47	1.178	-119.1

### 2.2 CL-20 的加入

CL-20 作为第四代高能量密度材料的代表,应用在固体推进剂中对能量有很大的提高。与几种高能氧

收稿日期: 2007-08-06; 修回日期: 2007-10-10

作者简介: 刘晶如(1980-),女,博士研究生,主要从事高能固体推进剂性能研究。e-mail: ruruliu1028@163.com

化剂 ADN、AP、RDX 相比, CL-20 单元推进剂能量性能优良, 理论比冲最高为  $2666.44 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 密度高达  $2.04 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。另外, 与 HMX 相比, CL-20 的爆热高 9.2%, 密度高 7%, 爆速高 5%, 因此在不同的推进剂体系中, 用 CL-20 替代 HMX 可使比冲值大幅提高<sup>[6-7]</sup>。

### 2.3 咪唑类化合物的加入

咪唑类化合物的密度大多数高于  $1.80 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 生成焓超过  $400 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ , 能量高, 耐热性好, 这些特

点对大幅度提高推进剂的能量有极其重要的意义<sup>[8-10]</sup>。其相关性能见表 2。

### 2.4 唑类富氮化合物的加入

唑类富氮含能化合物大多是安全性、安定性较高的固态化合物, 很多此类化合物结构中没有氧, 却具有高能量和高爆轰速度的特征<sup>[11]</sup>, 因此在固体推进剂中拟采用唑类富氮含能材料部分或全部取代氧化剂 AP, 以提高推进剂的能量。其相关性能见表 3。

表 2 咪唑类化合物的性质

Table 2 Properties of furazan compounds

name	chemical formula	standard enthalpy of formation/ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	density/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	oxygen balance/%
3,3'-diamino-4,4'-azofurazan (DAAF)	$\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_8\text{O}_2$	536	1.728	-65.3
3,3'-diamino-4,4'-azoxyfurazan (DAOAF)	$\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_8\text{O}_3$	443	1.747	-52.8
3,3'-dinitro-4,4'-azoxyfurazan (DNOAF)	$\text{C}_4\text{N}_8\text{O}_7$	640	1.910	-5.9
3,3'-dinitroazofuroxan (DNAF)	$\text{C}_4\text{N}_8\text{O}_8$	668	2.020	0
3,4-dinitrofurazanfuroxan (DNTF)	$\text{C}_6\text{N}_8\text{O}_8$	644	1.937	-20.5
furazan macrocyclic compounds (TOATF)	$\text{C}_8\text{N}_{16}\text{O}_8$	3324	1.940	-28.6
furazan macrocyclic compounds (DOADBF)	$\text{C}_8\text{N}_{12}\text{O}_6$	4028	1.860	-44.4

表 3 富氮化合物的性质

Table 3 Properties of nitrogen-rich compounds

name	chemical formula	standard enthalpy of formation/ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	density/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	oxygen balance/%
dinitrobitriazole	$\text{C}_4\text{H}_2\text{N}_8\text{O}_4$	382	2.00	-35.4
tetranitrobitriazole	$\text{C}_4\text{N}_{10}\text{O}_8$	552	2.10	0
dinitrobitriazole-tetranitrozene	$\text{C}_4\text{N}_{10}\text{O}_4$	860	2.10	-25.4
dinitroazobitriazole	$\text{C}_4\text{H}_2\text{N}_{10}\text{O}_4$	396	1.81	-31.5
tetranitroazobitriazole	$\text{C}_4\text{N}_{12}\text{O}_8$	800	2.10	0
dinitroazotetrazole	$\text{C}_4\text{N}_{12}\text{O}_4$	600	1.90	-22.9
dinitroazotriazole-dioxides	$\text{C}_4\text{N}_{12}\text{O}_6$	799	2.20	-10.3
nitrotetrazole-monoxide	$\text{CH}_4\text{N}_6\text{O}_4$	168	1.87	0
nitrotetrazole-dioxides	$\text{CH}_4\text{N}_6\text{O}_5$	210	2.00	8.9
dinitrourea	$\text{CH}_2\text{N}_4\text{O}_5$	-70	1.98	21.3
dinitroazotetrazole	$\text{C}_2\text{N}_{12}\text{O}_4$	2000	1.90	0

### 2.5 贮氢合金燃烧剂的加入

贮氢合金是一种能在晶体的空隙中大量贮存氢原子的功能材料<sup>[12]</sup>。这种合金具有可逆吸放氢的神奇性质。它可以贮存相当于合金自身体积上千倍的氢气, 其吸氢密度超过液态氢和固态氢密度<sup>[13-14]</sup>。目前有关贮氢合金的研究多集中在氢燃料汽车、镍氢电池等方面<sup>[15-17]</sup>, 有关贮氢合金在固体推进剂中的应用研究尚未见报道。

贮氢合金在氧化环境中被加热到氢释放温度(一般期望控制在  $200 \text{ }^\circ\text{C}$  以上)时, 贮氢合金中的氢释放并燃烧, 产生热量和水蒸气, 并进而引燃合金粉发生

剧烈的金属燃烧反应, 释放出更多的热量, 起到类似金属氢化物的作用。因此, 贮氢合金可以作为一种特殊的金属燃烧剂——贮氢合金燃烧剂加以使用。

## 3 实验方法及说明

推进剂的配方组成为:

黏合剂: 环氧乙烷-四氢呋喃共聚醚 (PET)、聚叠氮缩水甘油醚 (GAP);

增塑剂: 硝化甘油 (NG)、一缩二乙二醇二硝酸酯 (DEGDN)、硝酸酯乙基硝酸胺 (NENA);

氧化剂: 高氯酸铵 (AP)、六硝基六氮杂异伍兹烷

(CL-20), 呋咱、唑类;

金属燃烧剂: 铝粉(Al)、贮氢合金燃烧剂。

研究采用怀特(White)最小自由能法分析上述组成推进剂的能量水平, 重点考察含能组分的含量以及组分间的配比对推进剂理论比冲( $I_{sp}$ )的影响。主要以氧系数( $\varphi$ )、密度( $\rho$ )和理论比冲( $I_{sp}$ )来共同表征和评定推进剂的能量特性。理论比冲值均为膨胀压力比  $p_c/p_0$  为 70/1 (即在 6.86 MPa/0.09807 MPa) 时的标准理论比冲。

## 4 结果与讨论

### 4.1 含 NENA 的推进剂的能量计算

在 NEPE 推进剂现有配方的基础上引入含能增塑剂 NENA 来取代 NG/DEGDN, 具体计算结果如表 4 所示。

计算结果表明, 固含量为 75% 时, PET/Al/AP/NG/DEGDN 体系的理论比冲为 263.58 s。在 PET/Al/AP 体系中引入含能增塑剂 NENA 来取代 NG/DEGDN 后, 推进剂的理论比冲有大幅度的提高, 其中增幅最大的为 MeNENA, 理论比冲达到 281.51 s, 提高了 17.93 s, 涨幅为 6.8%, 此时相应的密度和氧系数分别为  $1.828 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$  和 0.707, 均满足新型高能固体推进

剂的设计要求。

由于 EtNENA、PrNENA、BuNENA 和 PentylNENA 的密度与 NG 存在一定的差距, 因此将配方的固含量提高至 77%, 发现含 NENA 推进剂的理论比冲与 PET/Al/AP/NG/DEGDN 体系相比仍有大幅度的提高。与固含量为 75% 的配方相比, 尽管理论比冲略有下降, 但氧系数和密度有所提高。

多铝体系 ( $\text{Al} \geq 18\%$ ) 一般需氧量较高, 推进剂中的氧必须能将全部 Al 氧化成凝聚相粒子  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ; 任何氧化剂应用于推进剂中时, 体系都存在着一个氧系数的临界点, 即氧化剂在配方中要考虑氧系数的限制。从表 4 中可以看出, 由于 PET 自身为负氧黏合剂 (-220.4%), 当其含量由 8.3% 降至 6.3% (相应的 Al 含量由 18% 提升至 20%), 体系的氧系数就会有所提高, 同时由于 Al 粉含量的增大, 体系的密度也有所提高。这有利于进一步加入高能量密度材料 (HEDM) 来取代 AP 以提高体系的理论比冲, 同时维持体系有较富裕的氧平衡。

### 4.2 含 CL-20 的推进剂的能量计算

在现有新型含能增塑剂 NENA 配方的基础上引入 CL-20, 计算结果如表 5 所示。

表 4 PET/NENA 类增塑剂/Al/AP 推进剂配方能量计算结果

Table 4 Energy properties of PET/NENA/Al/AP propellants

solid content/%	plasticizer	mass content/%		$\varphi$	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$I_{sp}$ /s
		PET	Al			
75	NG/DEGDN	8.3	18	0.707	1.816	263.58
75	MeNENA	8.3	18	0.651	1.828	281.51
75	EtNENA	8.3	18	0.610	1.772	278.53
75	PrNENA	8.3	18	0.578	1.754	275.55
75	BuNENA	8.3	18	0.552	1.736	272.81
75	PentylNENA	8.3	18	0.531	1.725	270.39
77	NG/DEGDN	6.3	20	0.736	1.856	261.60
77	MeNENA	6.3	20	0.676	1.867	279.80
77	EtNENA	6.3	20	0.632	1.809	276.74
77	PrNENA	6.3	20	0.597	1.791	274.77
77	BuNENA	6.3	20	0.569	1.772	272.74
77	PentylNENA	6.3	20	0.547	1.760	270.94

Note: 1)  $\varphi, \rho, I_{sp}$  are oxygen coefficient, density, specific impulse, respectively; 2) plasticizer and AP content are 16.7% and 57%.

表 5 CL-20 对含 NENA 推进剂能量水平的影响

Table 5 Effect of CL-20 on energetic level of NENA-based propellants

solid content /%	plasticizer	mass content/%					$\varphi$	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$I_{sp}$ /s
		GAP	PET	Al	AP	CL-20			
75	MeNENA	8.3	-	15	30	30	0.621	1.889	287.49
75	MeNENA	-	8.3	15	45	15	0.621	1.825	285.17
75	EtNENA	8.3	-	18	22	35	0.518	1.847	284.46
77	EtNENA	-	6.3	20	42	15	0.561	1.820	280.37
75	PrNENA	8.3	-	18	27	30	0.510	1.824	280.53

Note: plasticizer content is 16.7%.

对比表 5 和表 4 可以看出, CL-20 的加入使得推进剂的比冲和密度有大幅度的提高。加入 CL-20 提高比冲的原因主要是其分子中张力能的存在, 使其生成热正值增加, 从而有利于燃烧温度的提高; 分子中氮杂原子的引入, 有利于降低燃气平均分子量, 从而使比冲增大。但是由于 CL-20 分子中含氧量较低, 当 Al 粉含量较大时 ( $\geq 15\%$ ), 此时体系处于贫氧状态, 因而它只能部分取代推进剂中的 AP。

表 5 的计算结果表明, 在 MeNENA (或 EtNENA、PrNENA)/AP/Al/GAP (PET) 体系中引入高能量密度材料 CL-20, 推进剂理论比冲和密度均满足新型高能固体推进剂的设计要求。

### 4.3 含咪唑类化合物的推进剂的能量计算

表 6 的计算结果表明, 用咪唑类化合物取代推进剂中的常用氧化剂 AP 来提高推进剂的能量, 除 DNAF 之外, 其余的咪唑化合物尽管生成热较大, 但是由于自身的密度和氧平衡与 AP 的相比还有一定的差距, 只有由

DNAF 组成的推进剂体系才能满足理论比冲达到 280 s, 密度大于  $1.80 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ , 氧系数大于 0.5 的设计要求。

在现有新型含能增塑剂 NENA 配方的基础上引入 DNAF, 计算结果如表 7 所示。

3,3'-二硝基-4,4'-偶氮呋喃 (DNAF) 是一种高能氧化剂, 其生成热和氧系数均优于 CL-20。通过表 7 与表 5 的比较能说明这一点, 体系理论比冲有很大提高。

### 4.4 含唑类富氮化合物的推进剂的能量计算

一种新的含能材料能否提高固体推进剂的能量, 首先取决于它的能量水平。而能量水平则主要取决于三个性能参数: 真密度、标准生成焓及氧平衡<sup>[18]</sup>。一般而言, 真密度越高, 氧平衡就越接近于零; 标准生成焓为高正值的含能材料, 其能量水平越高。唑类富氮含能化合物具有高生成热和密度的特征, 因此在固体推进剂中采用唑类高氮含能材料部分取代或全取代 NEPE 推进剂中的氧化剂 AP, 以提高其能量。计算结果见表 8 和表 9。

表 6 DNAF 推进剂配方能量计算结果

Table 6 Energy properties of DNTF propellants

mass content/%						furanan compounds		$\varphi$	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$I_{sp}$ /s
GAP	HTPB	NG	DEGDN	AP	Al	name	content			
12.3	-	8.35	8.35	-	12	DNAF	59	0.572	1.839	280.01
9.3	-	5.35	5.35	-	11	DNOAF	69	0.573	1.833	279.62
18	-	-	-	4	11	DNAF	67	0.536	1.882	280.24
14	-	-	-	4	11	DNOAF	71	0.533	1.850	278.31
13	-	-	-	-	-	DNAF	87	0.721	1.884	280.11
-	8	-	-	-	-	DNAF	92	0.616	1.837	281.41

表 7 DNAF 对含 NENA 推进剂能量水平的影响

Table 7 Effect of DNAF on energetic level of NENA-based propellants

solid content/%	plasticizer	mass content/%					$\varphi$	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$I_{sp}$ /s
		GAP	PET	Al	AP	CL-20			
69	MeNENA	14.3	-	11	25	33	0.599	1.813	291.20
75	MeNENA	-	8.3	15	30	30	0.582	1.831	289.71
71	EtNENA	12.3	-	18	25	28	0.514	1.803	284.68
77	EtNENA	-	6.3	20	30	27	0.535	1.825	283.26
75	PrNENA	8.3	-	18	20	37	0.513	1.824	282.55

Note: plasticizer content is 16.7%.

表 8 唑类富氮化合物对 NEPE 推进剂能量水平的影响

Table 8 Effect of zole nitrogen-rich compounds on energetic level of NEPE propellants

mass content/%						nitrogen-rich compounds		$\varphi$	$\rho$ / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$I_{sp}$ /s
PET	GAP	NG	DEGDN	Al	AP	name	content			
8.3	-	8.35	8.35	18	-	nitrotetrazole-dioxides	57	0.538	1.841	282.51
8.3	-	8.35	8.35	18	31	dinitroazotetrazole	26	0.571	1.805	283.82
-	12.3	6.35	6.35	15	-	nitrotetrazole-dioxides	60	0.589	1.867	282.77
-	14.3	8.35	8.35	19	22	dinitroazotetrazole	28	0.512	1.808	284.95

表9 唑类/AP/Al/NENA 推进剂配方能量计算结果  
Table 9 Energy properties of tetrazole/AP/Al/NENA propellants

AP content/%	nitrogen-rich compounds		$\varphi$	$\rho$ /g · cm <sup>-3</sup>	$I_{sp}$ /s
	name	content/%			
57	-	-	0.651	1.828	281.51
47	dinitrobitriazole	10	0.571	1.832	283.50
37	tetranitrobitriazole	20	0.571	1.853	284.95
42	dinitrobitriazole-tetranitrozene	15	0.544	1.846	285.51
47	dinitroazobitriazole	10	0.573	1.815	282.99
37	tetranitroazobitriazole	20	0.567	1.853	285.81
42	dinitroazotetrazole	15	0.544	1.821	282.95
40	dinitroazotriazole-dioxides	17	0.557	1.861	284.92
37	nitrotetrazole-monoxide	20	0.569	1.813	287.66
27	nitrotetrazole-dioxides	30	0.564	1.841	291.53
-	dinitrourea	57	0.581	1.843	288.23
48	dinitroazotetrazole	9	0.606	1.824	288.46

Note: mass content: PET 8.3%, MeNENA 16.7%, Al 18%.

表10 贮氢合金与 Al 对 NEPE 推进剂能量的贡献对比

Table 10 Contribution of hydrogen storage alloy and Al to the energetic level of NEPE propellant

$P_1/P_0$	metal incendiary agent		mass content/%				$\varphi$	$\rho$ /g · cm <sup>-3</sup>	$I_{sp}$ /s
	name	content/%	GAP	PET	AP	RDX			
2.0	hydrogen storage alloy	20	8.3	-	22	33	0.546	1.820	283.05
2.0	Al	20	8.3	-	22	33	0.552	1.836	271.75
2.0	hydrogen storage alloy	20	-	8.3	22	33	0.518	1.834	281.27
2.0	Al	20	-	8.3	22	33	0.523	1.851	271.06

#### 4.5 含贮氢合金的推进剂的能量计算

本课题组研究设计了一种高含能贮氢合金燃烧剂,它密度大、燃烧热值高、与常用含能材料相容性好,作为金属燃烧剂引入推进剂中能带来意想不到的效果。表10的计算结果表明,贮氢合金体系与 Al 体系相比,理论比冲有大幅度的提高。含贮氢合金的 NEPE 推进剂能量和密度均满足新型高能推进剂的要求,可以作为候选途径之一。

## 5 结论

通过理论计算,提供了理论比冲达到 280 s,密度为 1.80 g · cm<sup>-3</sup>左右,氧系数大于 0.5 的新型高能推进剂基础配方技术途径:

(1) 新型含能增塑剂 NENA/常规(或叠氮)黏合剂/CL-20/AP/Al 配方体系;

新型含能增塑剂包括:硝酸酯基 + 硝胺基增塑剂 Me-NENA、Et-NENA、Pr-NENA 等。

(2) 氮杂环唑类化合物/叠氮黏合剂/AP/Al 配方体系;

(3) 氮杂环唑类化合物/叠氮黏合剂/常规含能增塑剂/Al 配方体系;

(4) 氮杂环唑类化合物/常规(或叠氮)黏合剂配方体系;

(5) 氮杂环唑类化合物/常规(或叠氮)黏合剂/新型含能增塑剂/AP/Al 配方体系;

(6) 唑类氮杂环化合物/常规(或叠氮)黏合剂/常规含能增塑剂/AP/Al 配方体系;

(7) 唑类氮杂环化合物/常规(或叠氮)黏合剂/新型含能增塑剂/AP/Al 配方体系;

(8) 叠氮(或常规)黏合剂/含能增塑剂/AP/RDX/贮氢合金燃烧剂配方体系。

#### 参考文献:

- [1] 罗运军,刘晶如. 高能固体推进剂研究进展[J]. 含能材料,2007,15(4): 407-410.  
LUO Yun-jun, LIU Jing-ru. Research progress of high energy solid propellant[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2007, 15(4): 407-410.
- [2] 王申,金韶华,盛思源,等. 含 CL-20 的 NEPE 推进剂能量水平分析[J]. 火炸药学报,2002,(1): 12-15.  
WANG Shen, JIN Shao-hua, SHENG Si-yuan, et al. Energetic level evaluation of NEPE solid propellant containing hexanitrohexaazaisowurtzitan (CL-20)[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2002, (1): 12-15.
- [3] 洪伟良,赵凤起,刘剑洪,等. 含硝仿胍的固体推进剂能量特性研究[J]. 火炸药学报,2000,(3): 22-24.

- HONG Wei-liang, ZHAO Feng-qi, LIU Jian-hong, et al. Study on the energy characteristic of solid propellant containing hydrazinium nitroformate [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2000, (3): 22 - 24.
- [4] 刘剑洪, 田德余, 赵彦晖, 等. 二硝酰胺铵推进剂的能量特性[J]. 火炸药学报, 2000, (2): 1 - 3.
- LIU Jian-hong, TIAN De-yu, ZHAO Yan-hui, et al. Energetic characteristic of ammonium dinitramide propellants [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2000, (2): 1 - 3.
- [5] 罗阳, 高红旭, 赵凤起, 等. 含 3,4-二硝基呋喃基氧化呋喃(DNTF)推进剂的能量特性[J]. 含能材料, 2005, 13(4): 225 - 228.
- LUO Yang, GAO Hong-xu, ZHAO Feng-qi, et al. Energy characteristics of propellant containing 3,4-dinitrofurazanfuroxan(DNTF)[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2005, 13(4): 225 - 228.
- [6] Politzer P. Computational studies of energetic nitramines [R]. AD-A 241870, 1991.
- [7] Bourasseau Serge. A systematic procedure for estimating the standard heats of formation in the condensed state of non aromatic polynitro compounds [J]. *Journal of Energetic Materials*, 1990, 8(4): 266 - 291.
- [8] Sheremeteev A B. Chemistry of furazans fused to five-membered rings [J]. *J Heterocyclic Chem*, 1995, 32: 371 - 385.
- [9] Pivina T S, Sukhachev D V, Evtushenko A V, et al. Comparative characteristic of energy content calculating methods for the furazan series as an example of energetic materials[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 1995, 20: 5 - 10.
- [10] Novikova T S, Melnikova T M, Kharitonova O V, et al. An effective method for the oxidation of aminofurazans to nitrofurazans [J]. *Mendeleev Communication*, 1994, (4): 138 - 139.
- [11] Hiskey M, Chavez D. Insensitive high-nitrogen compounds [R]. DE 2001776133.
- [12] 徐光宪. 稀土·下册·贮氢材料[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1995.
- XU Guang-xian. Lanthanum · Volume 2 · Hydrogen Storage Materials [M]. Beijing: Metallurgy Industry Press, 1995.
- [13] 蓝亭. 贮氢合金的种类及制取方法[J]. 现代机械, 2004, 4: 63.
- LAN Ting. Types and preparation of hydrogen storage alloys [J]. *Modern Machine*, 2004, 4: 63.
- [14] 郑福生. 金属氢化物性质与应用[J]. 南方钢铁, 1997, (97): 30.
- ZHENG Fu-sheng. The characters and application of metal hydrides [J]. *Nanfang Gangtie*, 1997, (97): 30.
- [15] Kuochih Hong. The development of hydrogen storage electrode alloys for nickel hydride batteries [J]. *Journal of Power Sources*, 2001, (96): 85 - 89.
- [16] S E Hsu. Preparation of hydrogen storage alloys for applications of hydrogen storage and transportation [J]. *Journal of alloys and compounds*, 2002, (330 - 332): 82 - 88.
- [17] 李全安, 陈云贵, 王丽华, 等. 贮氢合金的开发与应用[J]. 材料开发与应用, 1999, 14(3): 33 - 36.
- LI Quan-an, CHEN Yun-gui, WANG Li-hua, et al. Development and application of hydrogen storage alloys [J]. *Development and Application of Materials*, 1999, 14(3): 33 - 36.
- [18] 任特生. 硝胺及硝酸酯化学与工艺学[M]. 北京: 兵器工业出版社, 1994.
- REN Te-sheng. Chemistry and Technology of Nitramines and Nitrate Esters [M]. Beijing: Weapon Industry Press, 1994.

## Energetic Characteristics Calculation of a New Generation of High Energy Solid Propellant

LIU Jing-ru, LUO Yun-jun, YANG Yin

(School of Materials Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract:** Based on analyzing characteristics of five kinds of energetic materials including nitroethylnitramine (NENA), hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20), furazan compounds, zole nitrogen-rich compounds and hydrogen storage alloy, energetic level of NEPE solid propellant composed of normal (or energetic) binder/energetic plasticizer/high energy density material/metal incendiary agent was calculated with the code based on the minimum free energy method. The technical routes and consideration of novel high energy solid propellants were explored. The effects on energetic properties resulted from these approaches were discussed. Eight methods of forming high energy propellant were supplied.

**Key words:** physical chemistry; solid propellant; high energy; energetic materials; energy characteristics; theoretical calculation