

文章编号:1006-9941(2009)02-0127-04

## 含能材料热点起爆临界温度的估算

胡荣祖<sup>1,2</sup>, 高红旭<sup>1</sup>, 赵凤起<sup>1</sup>, 张海<sup>2</sup>, 勾明<sup>2</sup>, 赵宏安<sup>3</sup>, 王喜军<sup>3</sup>, 马海霞<sup>4</sup>

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065; 2. 西北大学数学系/数据分析与计算化学研究所, 陕西 西安 710069;  
3. 西北大学信息科学与技术学院, 陕西 西安 710069; 4. 西北大学化工学院, 陕西 西安 710069)

**摘要:**推导了估算含能材料(EMs)热点临界起爆温度( $T_{cr}$ )的 Brucman-Guillet 表达式。提出了估算  $T_{cr}$  的数值方法。编制了相应的计算机程序。用所编程序算得的结果核实了 9 种 EMs (PETN、RDX、HMX、EDNA、tetryl、EDADN、AN、NG 和 TNT) 的  $T_{cr}$  文献值, 认为所编程序适用于  $T_{cr}$  值的快速计算, 本文报道的 11 种 EMs (TATB、HNS、HNDACO、HHTDD、BTNDNG、keto-RDX、BTNEDA、PBX-JH-94、PBX-JO-96、TB propellant M32 和 TB propellant SD) 的  $T_{cr}$  值在一定程度上可信。

**关键词:**物理化学; 含能材料; 热点起爆; 临界温度; 数值计算

**中图分类号:** TJ55; O64

**文献标识码:** A

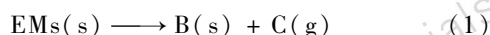
**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2009.02.001

### 1 引言

热点起爆临界温度 ( $T_{cr}$ ) 是评价含能材料 (EMs) 热安全性的重要参数。在估算这个参数方面, Bruckman 和 Guillet 提出了估算  $T_{cr}$  值的数学模型和影响  $T_{cr}$  值的因素<sup>[1]</sup>。为了用  $T_{cr}$  评估 EMs 的热安全性, 我们推导了计算  $T_{cr}$  值的 Brucman-Guillet 表达式, 编制了计算  $T_{cr}$  值的计算机程序, 用所编程序的计算结果核实了文献数据, 并报道了一些 EMs 的  $T_{cr}$  值。

### 2 球形热点起爆临界温度计算式的导出途径

由 EMs 放热分解反应的通式



和边界条件

$$\begin{aligned} t = 0 & \quad c_0 & \quad \alpha_0 = 0 & \quad H_0 = 0 \\ t = t & \quad c & \quad \alpha & \quad H \\ t = \infty & \quad c_\infty & \quad \alpha_\infty = 1 & \quad H_\infty \end{aligned} \quad (2)$$

知反应进度 ( $\alpha$ ) 与反应能量 ( $H$ ) 变化的关系<sup>[2]</sup>:

$$\frac{c_0 - c}{c_0 - c_\infty} = \frac{\alpha_0 - \alpha}{\alpha_0 - \alpha_\infty} = \frac{H_0 - H}{H_0 - H_\infty} \quad (3)$$

将边界条件(2)用于式(3), 得反应进度表达式:

$$\alpha = \frac{c_0 - c}{c_0 - c_\infty} = \frac{H - H_0}{H_\infty - H_0} \quad (4)$$

体系放热量表达式:

$$H = H_\infty \left( \frac{c_0 - c}{c_0 - c_\infty} \right) = H_\infty \left( 1 - \frac{c - c_0}{c_0 - c_\infty} \right) = V\rho Q \left( 1 - \frac{c - c_0}{c_0 - c_\infty} \right) \quad (5)$$

式中,  $c$  为  $t$  时反应物的分数;  $c_0$  和  $c_\infty$  分别为反应开始和反应结束时反应物的分数;  $\alpha$  为  $t$  时已反应物的分数;  $\alpha_0$  和  $\alpha_\infty$  分别为反应开始和反应结束时已反应物的分数;  $H$  为  $t$  时反应体系的放热量, J;  $H_0$  和  $H_\infty$  分别为反应开始和反应结束时反应体系的放热量, J;  $V$  为反应物的装填体积,  $\text{cm}^3$ ;  $\rho$  为反应物的密度,  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ;  $Q$  为反应物的分解热,  $\text{J} \cdot \text{g}^{-1}$ 。

视分解反应(1)为一级反应, 则反应速率可表示为:

$$-\frac{dc}{dt} = kc \quad (6)$$

式中,  $k$  为反应速率常数。

据此, 可知

$$-\frac{dc}{c} = kdt \quad (7)$$

$$-\int_{c_0}^c \frac{dc}{c} = \int_{t_0}^t Ae^{-E/RT} dt \quad (8)$$

$$-(\ln c - \ln c_0) = Ae^{-E/RT}(t - t_0) \quad (9)$$

$$\ln \left( \frac{c}{c_0} \right) = -Ae^{-E/RT}(t - t_0) \quad (10)$$

$$c = c_0 e^{[-(t-t_0)Ae^{-E/RT}]} \quad (11)$$

式中,  $k = Ae^{-E/RT}$ ,  $E$  为分解反应的表现活化能,  $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $A$  为表现指前因子,  $\text{s}^{-1}$ ;  $R$  为普适气体常量,  $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

式(10)代入式(4), 得球形热点产热表达式:

$$\begin{aligned} q_{\text{heat production}} &= H = V\rho Q \left( 1 - \frac{c - c_0}{c_0 - c_\infty} \right) \\ &= V\rho Q \{ 1 - \exp[-(t - t_0)Ae^{-E/RT}] \} \end{aligned}$$

收稿日期:2008-11-14; 修回日期:2008-12-16

基金项目:火炸药燃烧国防科技重点实验室基金(No. 9140C3501010601)

作者简介:胡荣祖(1938-), 男, 教授, 从事热化学、热分析研究。

e-mail: hurongzu@public.xa.sn.cn

$$= \left( \frac{4}{3} \pi a^3 \right) \rho Q \{ 1 - \exp[ - (t - t_0) A e^{-E/RT} ] \} \quad (12)$$

式中,  $a$  为热点半径, cm。

热点放出的热量, 经时间  $t$  后在热点外  $r$  处, 使厚度为  $dr$  的一薄层球壳材料得到  $4\pi r^2 \rho c_p \theta_r dr$  的热量。因此, 热点失热量应为

$$q_{\text{heat loss}} = \int_a^\infty S_{\text{球}} \rho c_p \theta_r dr = \int_a^\infty 4\pi r^2 \rho c_p \theta_r dr \quad (13)$$

式中,  $S_{\text{球}}$  为球面积,  $\text{cm}^2$ ;  $\theta_r$  为  $r$  处的温升, K;  $c_p$  为 EMs 的比热容,  $\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

为求式(13)中的  $\theta_r$  值, 考虑热传导方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \left[ \frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} \right] \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{t=0} = f(r), \quad r > a \\ \frac{\partial \theta}{\partial r} \Big|_{r=a} = \phi(t), \quad t > 0 \end{cases} \quad (14)$$

式中,  $\lambda$  为 EMs 的导热率,  $\text{J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

$$\text{令 } B = \frac{\lambda}{\rho c_p}, \theta = \theta_1 + \theta_2$$

$$\theta_1 \text{ 满足 } \begin{cases} \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = B \left[ \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \theta_1}{\partial r} \right] \\ \theta_1 \Big|_{t=0} = f(r), \quad r > a \end{cases} \quad (15)$$

$$\theta_2 \text{ 满足 } \begin{cases} \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = B \left[ \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \theta_2}{\partial r} \right] \\ \theta_2 \Big|_{r=a} = \phi(t), \quad t > 0 \end{cases} \quad (16)$$

令  $v_1 = r \cdot \theta_1$ , 所以  $v_1$  满足

$$\begin{cases} \frac{\partial v_1}{\partial t} = B \frac{\partial^2 v_1}{\partial r^2} \\ v_1 \Big|_{t=0} = rf(r), \quad r > a \end{cases} \quad (17)$$

$v_2 = r \cdot \theta_2$ ,  $v_2$  满足

$$\begin{cases} \frac{\partial v_2}{\partial t} = B \frac{\partial^2 v_2}{\partial r^2} \\ v_2 \Big|_{r=a} = a\phi(t), \quad t > 0 \end{cases} \quad (18)$$

$$\text{因为 } \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = B \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad -\infty < r < +\infty \\ u \Big|_{t=0} = rf(r) \end{cases}$$

的解为

$$u = \frac{1}{2\sqrt{\pi B t}} \int_{-\infty}^{+\infty} r' f(r') e^{-(r-r')^2/4Bt} dr' \quad (19)$$

所以半无界问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = B \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad r > 0 \\ u \Big|_{t=0} = rf(r) \end{cases}$$

的解为

$$u = \frac{1}{2\sqrt{\pi B t}} \int_0^{+\infty} r' f(r') [e^{-(r-r')^2/4Bt} - e^{-(r+r')^2/4Bt}] dr' \quad (20)$$

通过平移变换有  $r > a$  的半无界问题

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = B \frac{\partial^2 v}{\partial r^2}, \quad r > a \\ v \Big|_{t=0} = rf(r) \end{cases} \quad (21)$$

的解为

$$v = \frac{1}{2\sqrt{\pi B t}} \int_a^{+\infty} r' f(r') [e^{-(r-r')^2/4Bt} - e^{-(r+r'-2a)^2/4Bt}] dr' \quad (22)$$

进一步有

$$\begin{cases} \theta_1 = \\ \frac{1}{2r \cdot \sqrt{\pi B t}} \int_a^{+\infty} r' f(r') [e^{-(r-r')^2/4Bt} - e^{-(r+r'-2a)^2/4Bt}] dr' \end{cases} \quad (23)$$

因为

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = B \frac{\partial^2 u}{\partial r^2}, \quad r > 0 \\ u \Big|_{r=0} = a\phi(t) \end{cases}$$

的解为

$$u = \frac{r}{2\sqrt{\pi B}} \int_0^r \frac{e^{-r^2/4B(t-\lambda)}}{(t-\lambda)^{3/2}} d\lambda \quad (24)$$

$$\text{令 } \frac{r}{2\sqrt{B(t-\lambda)}} = \mu, t - \lambda = \frac{r^2}{4B\mu^2}$$

所以

$$u = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{r/2\sqrt{\pi B}}^{+\infty} a \cdot \phi \left( t - \frac{r^2}{4B\mu^2} \right) e^{-\mu^2} d\mu \quad (25)$$

通过平移变换, 问题

$$\begin{cases} \frac{\partial v_2}{\partial t} = B \frac{\partial^2 v_2}{\partial r^2} \\ v_2 \Big|_{r=a} = a\phi(t) \end{cases}$$

的解为

$$v_2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(r-a)/2\sqrt{\pi B}}^{+\infty} a \cdot \phi \left( t - \frac{(r-a)^2}{4B\mu^2} \right) e^{-\mu^2} d\mu \quad (26)$$

进一步有

$$\theta_2 = \frac{2a}{r\sqrt{\pi}} \int_{(r-a)/2\sqrt{\pi B}}^{+\infty} \phi \left( t - \frac{(r-a)^2}{4B\mu^2} \right) e^{-\mu^2} d\mu \quad (27)$$

最后  $\theta = \theta_1 + \theta_2$

有

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{1}{2r \cdot \sqrt{\pi B t}} \int_a^{+\infty} r' f(r') [e^{-(r-r')^2/4Bt} - e^{-(r+r'-2a)^2/4Bt}] dr' + \\ &\quad \frac{2a}{r\sqrt{\pi}} \int_{(r-a)/2\sqrt{\pi B}}^{+\infty} \phi \left( t - \frac{(r-a)^2}{4B\mu^2} \right) e^{-\mu^2} d\mu \end{aligned} \quad (28)$$

$t=0$  时,  $f(r) = \text{constant} = 0$ ,  $\phi(t) = \text{constant} = \theta_0$ ,

于是有

$$\theta_r = \frac{2a\theta_0}{r\sqrt{\pi}} \int_{(r-a)/2\sqrt{\pi B}}^{\infty} e^{-\mu^2} d\mu \quad (29)$$

$$\theta_r = \frac{a\theta_0}{r} \operatorname{erfc} \left[ \frac{r-a}{2\left(\frac{\lambda}{\rho c_p} t\right)^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (30)$$

由

$$q_{\text{heat production}} = q_{\text{heat loss}} \quad (31)$$

并考虑方程

$$\theta_0 = T_{\text{cr, hot spot}} - T_{\text{room}} \quad (32)$$

得

$$\begin{aligned} & \left( \frac{4}{3} \pi a^3 \right) \rho Q \{ 1 - \exp[ - (t - t_0) A e^{-E/RT_{\text{cr}}} ] \} \\ &= \int_a^{\infty} 4\pi r^2 \rho c_p \left[ \frac{a\theta_0}{r} \operatorname{erfc} \left[ \frac{r-a}{2\sqrt{Bt}} \right] \right] dr \\ &= \int_a^{\infty} 4\pi r^2 \rho c_p \left[ \frac{a(T_{\text{cr, hot spot}} - T_{\text{room}})}{r} \operatorname{erfc} \left[ \frac{r-a}{2\sqrt{\frac{\lambda}{\rho c_p} t}} \right] \right] dr \quad (33) \end{aligned}$$

式中,  $T_{\text{room}}$  为 EMs 的环境温度。

方程(33)称 Bruckman-Guillet 的一级分解反应热点起爆临界温度估算式。一旦从实验条件知  $\rho$  和  $T_{\text{room}}$ , 从热流曲线解得  $c_p$ 、 $\lambda$ 、 $Q$ 、 $E$  和  $A$ , 设定  $t - t_0 = 10^{-4} \text{ s}^{[1]}$ ,  $a = 10^{-3} \text{ cm}^{[1]}$ , 就可从方程(33)解得如图 1 所示的热点起爆临界温度  $T_{\text{cr}}$ 。 $T_{\text{cr},1}$  和  $T_{\text{cr},2}$  属方程(33)不合理

根被排除。

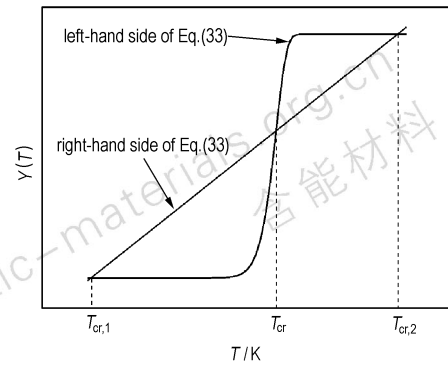


图 1 用方程  $Y(T) = [\text{Eq. (33)左端项}] - [\text{Eq. (33)右端项}] = 0$  求  $T_{\text{cr}}$  的示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the value of  $T_{\text{cr}}$  obtained by solving the Equation,  $Y(T) = [\text{the left-hand side of Eq. (33)}] - [\text{the right-hand side of Eq. (33)}] = 0$ .

### 3 本文计算值 ( $T_{\text{cr}}$ ) 与文献报道值 ( $T_{\text{cr},1}$ ) 的比较

为从方程(33)求  $T_{\text{cr}}$ , 编制了估算  $T_{\text{cr}}$  的软件, 进行了将表 1 中炸药参量 ( $a$ 、 $\rho$ 、 $t_0$ 、 $t - t_0$ 、 $c_p$ 、 $T_{\text{room}}$ 、 $\lambda$ )、热化学参量 ( $Q$ ) 和动力学参量 ( $E$ 、 $A$ ) 值代入方程(33)求  $T_{\text{cr}}$  的数值计算, 结果如表 1 所示。 $T_{\text{cr}}$  与  $T_{\text{cr},1}$  值相吻合, 表明利用所编软件求  $T_{\text{cr}}$  准确可靠, 可以付诸实用。

表 1 炸药参量<sup>1)</sup>和热点起爆临界温度的计算值  $T_{\text{cr}}$  与文献值 ( $T_{\text{cr},1}$ ) 的比较

Table 1 Explosive parameters<sup>1)</sup> and comparison of the calculated values  $T_{\text{cr}}$  in this work with literature ones  $T_{\text{cr},1}$

No.	explosive	heat of decomposition $Q_d^{2)}/\text{J} \cdot \text{g}^{-1}$	activation energy $E^{2)}/\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	pre-exponential factor $A^{2)}/\text{s}^{-1}$	$T_{\text{cr},1}^{2)}/\text{°C}$	$T_{\text{cr}}/\text{°C}$
1	pentaerythritol tetranitrate (PETN)	979.8	196648	$10^{19.80}$	377	376.7
2	cyclonite (RDX)	3861	198740	$10^{18.51}$	409	408.4
3	cyclotetramethylenetetranitramine (HMX)	3835	220497	$10^{19.70}$	430	429.5
4	ethylenedinitramine (EDNA)	2383	127612	$10^{12.80}$	449	449.0
5	tetryl	801.8	160666	$10^{15.40}$	568	500.9
6	ethylenediamine dinitrate (EDADN)	3067	169452	$10^{13.11}$	662	662.5
7	ammonium nitrate (AN)	706.1	169452	$10^{13.80}$	683	671.3
8	nitroglycerine (NG)	2101	200832	$10^{20.48}$	344	344.3
9	trinitrotoluene (TNT)	2101	143930	$10^{11.40}$	736	735.3

Note: 1)  $a = 10^{-3} \text{ cm}$ ,  $\rho = 1.0 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,  $t_0 = 0 \text{ s}$ ,  $t - t_0 = 10^{-4} \text{ s}$ ,  $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ,  $c_p = 1.255 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ,  $T_{\text{room}} = 293.15 \text{ K}$ ,  $\lambda = 12.55 \times 10^{-4} \text{ J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ , cited from Reference [1]; 2) cited from Reference [1].

### 4 应用实例

同理, 依据表 2 所列  $Q$ 、 $E$ 、 $A$  值和表 1 炸药参量值, 可得表 2 中所列的 11 种 EMs 的  $T_{\text{cr}}$  值。据此, 可知:

(1) 7 个单质炸药的对热抵抗能力:  $\text{TATB} > \text{HNS} >$

$\text{HNDACO} > \text{HHTDD} > \text{BTNDNG} > \text{Keto-RDX} \approx \text{BTNEDA}$ 。

(2)  $T_{\text{cr}}(\text{PBX-JH-94}) \gg T_{\text{cr}}(\text{RDX})$ , 表明 RDX 经高聚物黏结后其  $T_{\text{cr}}$  值可大幅提升。

(3)  $T_{\text{cr}}(\text{TB propellant SD}) < T_{\text{cr}}(\text{TB propellant M32})$ , 表明三基发射药 SD 比 M32 更易从热分解转向热爆炸。

表2 11种含能材料的 $Q_d$ 、 $A$ 、 $E$ 值和 $T_{cr}$ 的计算值  
Table 2 The values of  $Q_d$ ,  $A$ ,  $E$  and calculated values  $T_{cr}$  for 11 EMs

No.	explosive	heat of decomposition $Q_d^{1)}/J \cdot g^{-1}$	activation energy $E^{2)}/J \cdot mol^{-1}$	pre-exponential factor $A^{2)}/s^{-1}$	$T_{cr}/^{\circ}C$
1	1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene(TATB)	1389	214700	$10^{15.1}$	780.2
2	hexanitrostilbene(HNS)	1389	289000	$10^{22.63}$	538.6
3	1,3,3,5,7,7-hexanitro-1,5-diazacyclooctane(HNDACO)	2928	210700	$10^{18.2}$	475.2
4	2,4,6,8,10,12-hexanitro-2,4,6,8,10,12-hexaazatricyclo [7·3·0·0 <sup>3,7</sup> ] dodecane-5,11-dione(HHTDD)	3163	168500	$10^{15.7}$	443.5
5	2,6-bis(trinitroethyl)-4,8-dinitroglycoluril(BTNDNG)	693	206600	$10^{20.7}$	422.9
6	2,4,6-trinitro-2,4,6-triazacyclohexanone(keto-RDX)	2690	184700	$10^{18.6}$	361.2
7	bis(2,2,2-trinitroethyl- <i>N</i> -nitro) ethylene diamine(BTNEDA)	874	200700	$10^{20.6}$	360.1
8	PBX-JH-94(94/3/2/1-RDX/TNETB/PVAC/SA) <sup>3)</sup>	2153	128900	$10^{11.25}$	634.2
9	PBX-JO-96(96.5/2/1.5-HMX/binder/plasticizer)	2858	442000	$10^{40.05}$	356.0
10	TB propellant M32(45/23/30/5-NC/NG/DMATMH/additive) <sup>4)</sup>	1757	175800	$10^{17.5}$	390.1
11	TB propellant SD(32/23/40/5-NC/NG/NGU/additive)	1600	206400	$10^{20.9}$	351.7

Note: 1)  $Q_d$ , taking a half of the explosion heat; 2) cited from Reference [3]; 3) TNETB, 2,2,2-trinitroethyl-4,4,4-trinitrobutyrate; PVAC, polyvinyl acetate; SA, stearic acid; 4) DMATMH, 1,1'-dimethyl-5,5'-azotetrazole monohydrate.

#### 参考文献:

- [1] Bruckman H J, Guillet J E. Theoretical calculations of hot-spot initiation in explosives[J]. *Can J Chem*, 1968, 41: 3221-3228.
- [2] 邓郁. 热动力学的研究(I): 热动力学的理论和方法[J]. 高等学校化学学报, 1985, 6(7): 621-626.
- DENG Yu. Studies on thermokinetics (I): Theory and method of thermokinetics[J]. *Chem J Chinese U*, 1985, 6(7): 621-626.
- [3] 董海山, 胡荣祖, 姚朴, 等. 含能材料热谱集[M]. 北京: 国防工业出版社, 2001.
- DONG Hai-shan, HU Rong-zu, YAO Pu, et al. Collection of Thermospectrum of Energetic Materials [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2001.

## Estimation of Critical Temperatures of Hot-spot Initiation in Energetic Materials

HU Rong-zu<sup>1,2</sup>, GAO Hong-xu<sup>1</sup>, ZHAO Feng-qi<sup>1</sup>, ZHANG Hai<sup>2</sup>,  
GOU Ming<sup>2</sup>, ZHAO Hong-an<sup>3</sup>, WANG Xi-jun<sup>3</sup>, MA Hai-xia<sup>4</sup>  
(1. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China;

2. Department of Mathematics/Institute of Data Analysis and Computation Chemistry, Northwest University, Xi'an 710069, China;

3. College of Communication Science and Engineering, Northwest University, Xi'an 710069, China;

4. College of Chemical Engineering, Northwest University, Xi'an 710069, China)

**Abstract:** Bruckman-Guillet's formula for calculating the critical temperature of hot-spot initiation ( $T_{cr}$ ) in energetic materials (EMs) was derived. A numerical method of estimating the value of  $T_{cr}$  was presented. The corresponding computer program was programmed. The literature values of  $T_{cr}$  of nine EMs: PETN, RDX, HMX, EDNA, tetryl, EDADN, AN, NG and TNT, were certificated with the programmed program, considering that the programmed program is suitable for fast computation of  $T_{cr}$  and reported values of  $T_{cr}$  for eleven EMs: TATB, HNS, HNDACO, HHTDD, BTNDNG, keto-RDX, BTNEDA, PBX-JH-94, PBX-JO-96, TB propellant M32 and TB propellant SD are believable to a certain extent.

**Key words:** physical chemistry; energetic materials; hot-spot initiation; critical temperature; numerical computation