

文章编号: 1006-9941(2015)09-0865-06

含 2-偕二硝甲基-5-硝基四唑羟胺盐的推进剂能量特性计算

张敏, 毕福强, 许诚, 刘庆, 葛忠学, 王伯周, 汪伟, 朱勇

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 采用最小自由能法, 在标准状态下(膨胀比为 70/1), 计算了含 2-偕二硝甲基-5-硝基四唑羟胺盐(HADNMNT)的丁羟复合推进剂和改性双基推进剂的能量特性。理论计算可知, HADNMNT 单元推进剂的密度比冲为 $4936.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{dm}^{-3}$, 高于黑索今(RDX), 低于奥克托今(HMX)和六硝基氮杂异伍兹烷(CL-20); 利用 HADNMNT 完全取代高氯酸铵(AP)后, 丁羟复合推进剂的比冲提高了 $428.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$; 绘制了 HADNMNT 与 RDX、Al 组成的丁羟复合推进剂的等比冲三角图, 直观的反映了比冲与配方的关系, HTPB、HADNMNT、RDX 及 Al 的含量分别为 10%、60%~62%、14%~16% 以及 14%~15% 时, 获得推进剂的最高理论比冲为 $2778.9 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。利用 HADNMNT 完全取代 RDX 后, 改性双基推进剂的比冲为 $2522.9 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$; 通过添加 Al 并调节 HADNMNT 与 Al 在改性双基推进剂中的含量, 获得推进剂的优化配方为: NC 25%, NG 33%, HADNMNT 11%, Al 20%, DINA 3.5%, 其他助剂 7.5%, 其理论比冲为 $2598.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

关键词: 2-偕二硝甲基-5-硝基四唑羟胺盐(HADNMNT); 氧化剂; 高能推进剂; 能量特性

中图分类号: TJ55; O64

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.09.006

1 引言

氮杂环化合物(呋咱类、咪唑类、三唑类、四唑类等)具有较高的氮含量, 较高的密度及高正生成焓等特点, 同时具有热稳定性和安定性较好的优点, 对大幅度提高推进剂的能量水平具有重要的意义^[1-3]。我们研究组^[4-5]合成出一种国内外未见文献报道的四唑类含能化合物——2-偕二硝甲基-5-硝基四唑羟胺盐(HADNMNT, $\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_8\text{O}_7$), 该化合物不含卤素, 具有较高的正氧平衡(6.35%), 理论计算结果表明其能量水平与奥克托今(HMX)相当^[5]。因此, 利用 HADNMNT 取代高氯酸铵(AP)用于推进剂中, 则有望实现提高推进剂能量、降低特征信号、减少环境污染的目标。

本研究理论计算了 HADNMNT 和其他高能氧化剂的能量特性, 利用美国 NASA-CEA 软件^[6]计算了推进剂的能量特性参数, 主要选取丁羟复合推进剂(HTPB)和改性双基推进剂(CMDB)两种体系, 考察添加不同含量 HADNMNT 时, HTPB 和 CMDB 推进剂能量特

性的变化规律, 并评价了几种含 HADNMNT 推进剂配方的能量性能。

2 HADNMNT 及其它含能材料的性能

为了比较 HADNMNT 与 AP、二硝酰胺铵盐(ADN)等氧化剂及黑索今(RDX)、奥克托今(HMX)等高能组分的性能, 利用量子化学方法^[7-14]计算了 HADNMNT 的密度(ρ)和固相生成焓($\Delta_f H$), 并采用美国 NASA-CEA 软件^[6], 在标准状态下(压强为 6.86 MPa, 膨胀比为 70/1), 对各化合物单元推进剂的氧系数(Φ)、燃温(T_c)、产物平均分子质量(\bar{M}_w)、特征速度(C^*)、理论比冲(I_{sp})及密度比冲(I_p)进行计算, 结果见表 1。

表 1 中列出了 HADNMNT、RDX 及 AP 等各化合物的能量性能, HADNMNT 的特征速度远远高于 AP 和 ADN, 低于 HMX、RDX 及 CL-20; HADNMNT 具有较高的单元比冲, 仅低于 CL-20; 而就密度比冲而言, HADNMNT 的密度比冲高于 AP、AND 及 RDX, 低于 HMX 与 CL-20。与 RDX、HMX、CL-20 等高能炸药相比, HADNMNT 的氧系数为 1.167, 均有较大提高; 与 AP、ADN 等氧化剂相比, HADNMNT 的氧系数低, 但具有较高的生成焓, 且其分子中不含卤素, 燃烧产物清洁。因此, HADNMNT 是一种能量较高、正氧平衡的

收稿日期: 2013-11-26; 修回日期: 2014-03-18

基金项目: 国家自然科学基金资助(21373157)

作者简介: 张敏(1990-), 女, 实习研究员, 主要从事含能材料的合成研究。e-mail: 631520072@qq.com

通信联系人: 葛忠学(1966-), 男, 研究员, 主要从事含能材料的合成与性能研究。e-mail: gzx204@sina.com.cn

含能化合物,可作为含能氧化剂或高能组分应用于推进剂配方中,部分或全部取代常用氧化剂 AP 或高能炸药组分 RDX、HMX 等,有望实现推进剂的高能化和少烟化。

3 含 HADNMNT 的丁羟复合推进剂能量特性计算

3.1 含 HADNMNT 的丁羟复合推进剂

考察了 HADNMNT 取代 AP 后,对丁羟复合推进剂能量性能的影响规律。实际采用的丁羟复合推进剂配方(质量分数)为^[16]: HTPB 10%, Al 5%, AP 85%。保持 HTPB 的含量不变,利用 HADNMNT 逐步取代 AP,对推进剂能量性能进行计算,结果列于表 2 中。

由表 2 可知,利用 HADNMNT 逐步取代 AP 时,随着体系中 HADNMNT 含量增加, T_c 逐渐提高, \bar{M}_w 不断降低。 T_c 愈大,用来转换成燃气动力所提供的热量就愈多; \bar{M}_w 愈小,单位质量推进剂所产生的气体体积愈大,均有利于推进剂比冲的提高。因此,当 HADNMNT 完全取代 AP 后,丁羟复合推进剂的能量性能最优, I_{sp} 为 2760.0 N·s·kg⁻¹, C^* 为 1676 m·s⁻¹,分别较原配

方提高了 428.7 N·s·kg⁻¹ 和 246 m·s⁻¹。HADNMNT 的氮含量、碳含量较 AP 高,氢含量较 AP 低,因而,随其含量增加,燃烧产物中 N₂、CO 的生成量不断增加, H₂O 含量不断下降。同时, HADNMNT 的氧平衡较 AP 低,随其含量增加,推进剂的 ϕ 值逐步降低,但在 $\phi > 1$ 时,富余的 O 可将 CO 氧化成 CO₂,使产物中 CO₂ 的含量不断增大,当 $\phi < 1$ 时, CO₂ 含量则不断降低,燃烧产物中 O₂ 含量也不断降低。随着 HADNMNT 取代 AP,燃烧产物中腐蚀性气体 HCl 的含量不断下降。因此,该配方丁羟复合推进剂中,可利用高能氧化剂 HADNMNT 完全取代常规氧化剂 AP,兼顾了对推进剂环境友好及高能的要求。

3.2 HADNMNT 与高能组分复配的丁羟复合推进剂

在推进剂实际配方中,通常采用高能炸药与氧化剂配合使用,以达到提高推进剂能量性能的目的。鉴于上述结论,考察了固定 HTPB 含量为 10%, Al 含量为 5%,利用氧化剂 HADNMNT 分别与高能炸药 RDX、HMX 及 CL-20 等进行复配(总含量 85%)的推进剂能量性能。结果列于图 1。

表 1 HADNMNT 和其他含能材料的性能比较

Table 1 Performance parameters of HADNMNT and some energetic materials

compd.	$\rho^{1)}/g \cdot cm^{-3}$	$\Delta_f H^{2)}/kJ \cdot mol^{-1}$	$\phi^{3)}$	$T_c^{4)}/K$	$\bar{M}_w^{5)}$	$C^*^{6)}/m \cdot s^{-1}$	$I_{sp}^{7)}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$I_p^{8)}/N \cdot s \cdot dm^{-3}$
HADNMNT	1.87	299.40	1.167	3462	27.45	1609.0	2639.8	4936.4
RDX	1.82	61.55 ^[15]	0.667	3277	24.27	1645.0	2608.9	4748.2
HMX	1.90	75.02 ^[15]	0.667	3269	24.28	1642.0	2604.1	4947.8
CL-20 ^[3]	2.04	415.5	0.800	3586	27.36	1638.0	2673.3	5453.5
AP ^[3]	1.95	-290.45	2.666	1433	27.92	990.3	1550.3	3034.2
ADN ^[3]	1.82	-149.80	2.000	2096	24.80	1282.1	2008.5	3614.3

Note: 1) density; 2) enthalpy of formation; 3) oxygen balance; 4) chamber temperature; 5) relative average molecular mass of products; 6) characteristic velocity; 7) specific impulse; 8) density impulse.

表 2 HADNMNT 含量对 HTPB 推进剂的能量特性及燃烧产物的影响

Table 2 Effect of HADNMNT content on energy characteristics and combustion products of HTPB propellant

content/%		ϕ	energy characteristics			$C^*/m \cdot s^{-1}$	mole fraction of combustion product /%					
HADNMNT	AP		T_c/K	\bar{M}_w	$I_{sp}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$		H ₂ O	CO ₂	CO	O ₂	N ₂	HCl
0	85	1.413	3005	30.10	2331.3	1430	40.53	10.09	0	13.93	10.81	21.00
10	75	1.321	3150	29.95	2407.9	1471	39.35	12.53	0.02	11.27	14.34	18.31
20	65	1.238	3270	29.73	2475.2	1507	38.02	14.90	0.12	8.58	17.89	15.56
30	55	1.162	3372	29.45	2533.7	1538	36.42	16.98	0.51	6.04	21.43	12.86
40	45	1.092	3459	29.14	2584.4	1566	34.60	18.64	1.30	3.87	25.00	10.40
50	35	1.028	3536	28.80	2630.2	1593	32.38	19.36	2.92	2.27	28.45	7.99
60	25	0.968	3606	28.46	2671.1	1619	29.91	19.14	5.36	1.27	31.75	5.66
70	15	0.913	3671	28.10	2708.4	1641	27.35	18.29	8.31	0.67	34.91	3.38
80	5	0.861	3733	27.74	2743.3	1665	24.76	17.04	11.58	0.34	37.93	1.13
85	0	0.837	3764	27.57	2760.0	1676	23.46	16.30	13.28	0.23	39.38	0

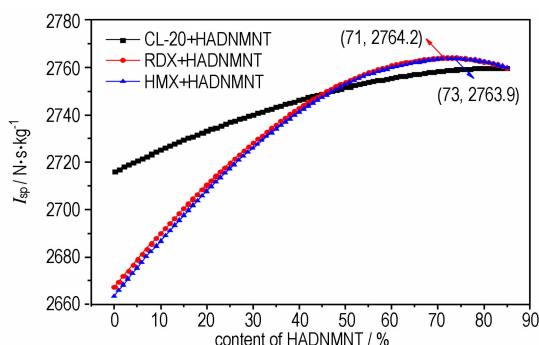


图 1 HADNMNT 含量对 HTPB 推进剂理论比冲的影响

Fig. 1 Effect of HADNMNT content on the specific impulse of HTPB propellant

图 1 中三条曲线分别表示高能氧化剂 HADNMNT 与高能炸药 CL-20、RDX 及 HMX 复配时，HADNMNT 含量对推进剂理论比冲的影响规律。由图可知，在 HADNMNT 与 CL-20 复配时，随着 HADNMNT 含量增加，推进剂的 I_{sp} 不断增加；HADNMNT 与 RDX 及 HMX 分别进行复配时，随着 HADNMNT 含量不断增加，丁羟复合推进剂的 I_{sp} 先不断提高，并分别在 HADNMNT 含量为 71% 和 73% 达到最大值 2764.2 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ 和 2763.9 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ，继续增加 HADNMNT 的含量至 85%， I_{sp} 则小幅降低。因此，选取高能氧化剂 HADNMNT 与高能炸药 RDX 进行复配，获得优化的推进剂配方为：HTPB 10%，Al 5%，HADNMNT 71%，RDX 14%。

3.3 Al 含量对含 HADNMNT 的丁羟复合推进剂的影响

实际配方中，为提高推进剂的能量，往往需要向推进剂中加入单位质量放热量大的 Al 粉，因此，进一步对以 HTPB、Al、HADNMNT 及 RDX 为主要组分的丁羟复合推进剂的能量性能进行计算，固定 HTPB 含量为 10%，Al、RDX 及 HADNMNT 的总含量为 90%（金属 Al 粉的最大含量为 23%），考察了 Al、RDX 及 HADNMNT 的含量对推进剂理论比冲的影响，绘制了推进剂的等比冲三角图，如图 2 所示。

由图 2 中曲线可见，HADNMNT 含量一定时， I_{sp} 随着 Al 含量增加呈现出先提高后降低的趋势（转折区间在 Al 含量为 15%~16% 范围内），其原因可能为，推进剂中高能燃料 Al 粉的加入，有利于提高 I_{sp} ，但当 Al 含量过大时，推进剂体系的氧系数逐渐降低，造成不完全燃烧加剧，从而使 I_{sp} 下降。由图 2 可见，推进剂高比冲

配方有较大的调节范围，推进剂 $I_{sp} > 2770.0 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ 的优化配方为 HADNMNT 含量为 35%~80%，RDX 含量为 0%~40%，Al 粉含量为 7%~16%。丁羟复合推进剂的最高理论比冲为 2778.9 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ，其配方范围为 HADNMNT 的含量为 60%~62%，RDX 及 Al 粉含量分别为 14%~16% 和 14%~15%。

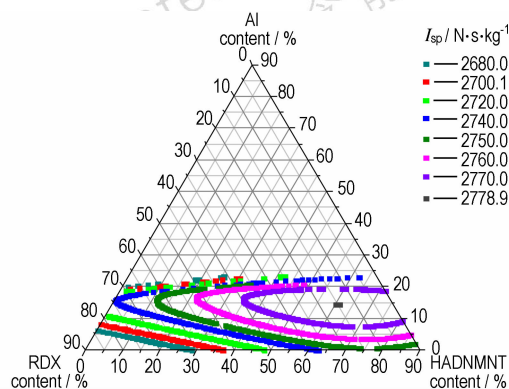


图 2 HTPB/HADNMNT/RDX/Al 组成的丁羟复合推进剂的等比冲三角图

Fig. 2 Iso-impulse trigonal figure of the HTPB/HADNMNT/RDX/Al propellant

4 含 HADNMNT 的改性双基推进剂能量特性计算

4.1 含 HADNMNT 的改性双基推进剂

考察了微烟改性双基推进剂中，利用 HADNMNT 逐步取代高能炸药 RDX 对推进剂能量特性的影响。实际采用的 CMDB 推进剂配方（质量分数）为^[17]：硝化棉（NC，含氮量 12.6%）25%，硝化甘油（NG）33%，RDX 31%，DINA 3.5%，其他助剂 7.5%。保持 NC、NG、DINA 及其他助剂的含量不变，利用 HADNMNT 逐步取代 RDX，CMDB 推进剂的能量性能列于表 3 中。

由表 3 可知，与 RDX 相比，HADNMNT 具有较高的氮含量和氧平衡，随着配方中 HADNMNT 含量增加，氧系数由 0.679 增加至 0.763，使得燃烧更加充分，燃气产物中 H_2O 、 CO_2 的含量增加， N_2 生成量增加，使得 \bar{M}_w 小幅度增加，但同时燃烧放热增加， T_c 变大，有利于提高推进剂的能量。因此，该配方中，HADNMNT 作为高能组分取代 RDX 时，随着 HADNMNT 含量增加，推进剂的理论比冲和特征速度均提高。HADNMNT 完全取代 RDX 后，推进剂的 I_{sp} 和 C^* 达到最大值 2522.9 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ 和 1576 $m \cdot s^{-1}$ ，较原配方提高了 91.3 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ 和 42 $m \cdot s^{-1}$ 。

表 3 HADNMNT 含量对 CMDB 推进剂能量性能的影响

Table 3 Effect of HADNMNT content on energy characteristics of CMDB propellant

content/%		ϕ	energy characteristics			$C^*/m \cdot s^{-1}$	mole fraction of combustion product /%				
HADNMNT	RDX		T_c/K	\bar{M}_w	$I_{sp}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$		H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	N ₂
0	31	0.679	2969	24.98	2431.6	1534	14.26	21.61	25.87	18.70	19.56
3	28	0.686	3000	25.13	2441.4	1539	13.57	22.12	25.50	18.94	19.87
6	25	0.694	3030	25.27	2451.0	1544	12.88	22.62	25.11	19.19	20.18
9	22	0.702	3058	25.42	2460.5	1549	12.21	23.11	24.70	19.48	20.50
12	19	0.709	3086	25.56	2469.7	1554	11.54	23.59	24.27	19.78	20.83
15	16	0.717	3112	25.70	2478.7	1558	10.89	24.05	23.80	20.11	10.89
18	13	0.726	3137	25.84	2487.6	1562	10.24	24.49	23.32	20.47	21.48
21	10	0.734	3160	25.97	2496.1	1566	9.61	24.93	22.80	20.85	21.82
24	7	0.743	3182	26.11	2504.5	1570	8.99	25.34	22.25	21.26	22.16
27	4	0.751	3203	26.24	2512.5	1573	8.39	25.74	21.68	21.69	22.51
30	1	0.760	3222	26.37	2520.3	1575	7.80	26.12	21.07	22.16	22.86
31	0	0.763	3228	26.42	2522.9	1576	7.60	26.25	20.86	22.32	22.97

4.2 Al 含量对含 HADNMNT 的改性双基推进剂的影响

向推进剂中加入高能燃烧剂,利用其燃烧时放出的大量热能,提高推进剂的燃温,从而达到提高理论比冲与特征速度的目的。考察高能燃烧剂铝粉含量对含 HADNMNT 的 CMDB 推进剂的能量特性影响规律。采用上述优化的推进剂配方:硝化棉(NC,含氮量 12.6%)25%,硝化甘油(NG)33%,HADNMNT 31%,DINA 3.5%,其他助剂 7.5%。利用 Al 粉逐步取代 HADNMNT,考察了添加不同含量 Al 粉对含 HADNMNT 的 CMDB 推进剂能量性能的影响,结果列于表 4 中。

由表 4 可见,利用高能燃烧剂 Al 替代高能组分 HADNMNT 的过程中,随着 Al 含量增加,推进剂 ϕ 值明显降低, T_c 先增加后降低, \bar{M}_w 不断增大, I_{sp} 和 C^* 均呈现先增加后减小的趋势。Al 含量为 20%,HADNMNT 含量为 11%,获得推进剂的较高比冲为 2598.5 $N \cdot s \cdot kg^{-1}$,继续增加金属 Al 粉的含量,推进剂 I_{sp} 和 C^* 均出现明显下降。造成上述现象的原因,Al 的燃烧效率较高,氧含量较高时,增加 Al 含量,有利于提高推进剂的能量;而当 Al 含量过多时,不完全燃烧现象加剧,使得推进剂的能量急剧下降。同时,Al 含量增加的过程中,伴随推进剂的氧平衡下降,燃气产物中 Al_2O_3 含量不断增加。因而,推进剂配方中

表 4 Al 含量对 CMDB 推进剂能量性能的影响

Table 4 Effect of Al content on energy characteristics of CMDB propellant

content/%		ϕ	energy characteristics			$C^*/m \cdot s^{-1}$	mole fraction of combustion product /%					
HADNMNT	Al		T_c/K	\bar{M}_w	$I_{sp}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$		H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂	N ₂	Al ₂ O ₃
31	0	0.763	3228	26.42	2522.9	1576	7.60	26.25	20.86	22.32	22.97	0
27	4	0.718	3347	27.26	2553.4	1582	9.44	24.02	25.95	16.98	21.57	2.03
23	8	0.675	3467	28.14	2576.2	1586	11.85	21.19	30.64	12.03	20.12	4.12
19	12	0.634	3582	29.06	2590.5	1589	15.08	17.46	34.67	7.71	18.61	6.26
15	16	0.596	3686	30.01	2595.9	1589	19.35	12.56	37.73	4.31	17.05	8.46
11	20	0.559	3758	30.97	2598.5	1585	24.85	6.58	39.91	1.84	15.47	10.73
7	24	0.524	3732	31.81	2580.4	1562	30.41	0.11	41.30	0.02	13.79	12.81
3	28	0.491	3540	32.40	2464.0	1502	30.24	0.01	40.93	0	11.32	11.46
0	31	0.467	3318	32.73	2381.3	1441	29.82	0.01	40.66	0	8.43	10.70

引入 Al 粉,一方面可以提高推进剂的能量性能,但另一方面却导致推进剂燃烧时产生可见烟雾和羽焰闪光,Al 粉燃烧时产生的浓烟则干扰制导信号、污染环境等。因此,基于该配方的改性双基推进剂设计,应结合实际进行,在高能量和低信号特征两者之间进行权衡。

5 结 论

(1) HADNMNT 的氧系数为 1.167,低于 AP,高于 RDX、HMX 及 CL-20。其密度比冲为 $4936.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{dm}^{-3}$,高于 RDX,低于 HMX 及 CL-20,因此,是一种兼顾氧平衡和高能量的化合物,可分别作为含能氧化剂及高能组分应用于推进剂配方设计中。

(2) 丁羟复合推进剂中,用 HADNMNT 完全取代 AP,可提高推进剂的理论比冲和特征速度。HADNMNT 与高能炸药 RDX 进行复配,实现了提高推进剂能量的目的。通过改变 HADNMNT、RDX 及 Al 含量,获得推进剂的等比冲三角图,获得了最高比冲的推进剂配方: HADNMNT 含量为 60%~62%, RDX 含量为 14%~16%, Al 粉含量为 14%~15%, I_{sp} 为 $2778.9 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

(3) 用 HADNMNT 完全取代改性双基推进剂中的 RDX,可以提高推进剂的理论比冲和特征速度。通过进一步加入 Al 粉,调节 HADNMNT、Al 的含量分别为 11% 和 20% 时,最高理论比冲可达 $2598.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

参考文献:

- [1] 刘晶如, 罗运军, 杨寅. 新一代高能固体推进剂的能量特性计算研究[J]. 含能材料, 2008, 16(1): 94-99.
LIU Jing-ru, LUO Yun-jun, YANG Yin. Energetic characteristics calculation of a new generation of high energy solid propellant [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2008, 16(1): 94-99.
- [2] 何春林, 杜志明, 丛晓民, 等. 偶氮四唑二胍的表征及性能研究[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2009, 7(6): 31-34.
HE Chun-lin, DU Zhi-ming, CONG Xiao-min, et al. Study on characterization and performance of guanidinium azotetrazolate [J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2009, 7(6): 31-34.
- [3] 罗阳, 高红旭, 赵凤起, 等. 含 2,4-二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.
- [4] 张敏, 葛忠学, 毕福强, 等. 2-偕二硝甲基-5-硝基四唑的合成与性能[J]. 含能材料, 2013, 21(5): 688-690.
ZHANG Min, GE Zhong-xue, BI Fu-qiang, et al. Synthesis and Properties of 2-Dinitromethyl-5-nitrotetrazole [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2013, 21(5): 688-690.
- [5] 张敏, 毕福强, 许诚, 等. 2-偕二硝甲基-5-硝基四唑羟胺盐的合成与性能研究[J]. 含能材料, 2015, 23(7): 653-656.
ZHANG Min, BI Fu-qiang, XU Cheng, et al. Synthesis and Theoretical Study of Hydroxylammonium 2-dinitromethyl-5-nitrotetrazolate [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2015, 23(7): 653-656.
- [6] Gordon S, McBride B J. Computer program for calculation chemical equilibrium compositions and applications: I Analysis, NASA RP-1311 [R]. Washington D C: NASA, 1994.
- [7] Becke A D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange[J]. *Journal of Chemical Physics*, 1993, 98(7): 5648-5652.
- [8] Lee C, Yang W, Parr R G. Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density [J]. *Physical Review B: Condensed Matter*, 1988, 37: 785-789.
- [9] GAO Hai-xiang, Ye Cheng-feng, Piekarski C M, et al. Computational Characterization of Energetic Salts [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2007, 111: 10718-10731.
- [10] Curtiss L A, Raghavachari K, Redfern P C, et al. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1997, 106(3): 1063.
- [11] Byrd E F C, Rice B M. Improved prediction of heats of formation of energetic materials using quantum chemical methods [J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2006, 110(3): 1005-1013.
- [12] Rice B M, Pai S V, Hare J. Predicting heats of formation of energetic materials using quantum chemical calculations [J]. *Combustion and Flame*, 1999, 118(3): 445-458.
- [13] Ochterski J W, Petersson G A, Montgomery J A. A complete basis set model chemistry V. extension to six or more heavy atoms [J]. *Journal of Chemical Physics*, 1996, 104(7): 2598-2619.
- [14] Montgomery J A, Frisch M J, Ochterski J W, et al. A complete basis set model chemistry VII. Use of the minimum population localization method [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2000, 112(15): 6532-6542.
- [15] Stull D R, Westrum E F, Sinke G C. The chemical thermodynamics of organic compounds [M]. John Wiley & Sons Inc, New York, 1969: 807.
- [16] 刘晶如, 杨寅, 辛伟. 含 1,3,3-三硝基氮杂环丁烷 (TNAZ) 推进剂能量特性计算研究[J]. 固体火箭技术, 2009, 32(3): 318-322.
LIU Jing-ru, YANG Yin, XIN Wei. Computational investigation of energy characteristics of propellant containing 1, 3, 3-trinitroazetidene (TNAZ) [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2009, 32(3): 318-322.
- [17] FAN Xue-zhong, LI Ji-zhen, ZHANG Ya-jun, et al. Characteristics of the smokeless CMDB propellants with 1, 3, 3-trinitroazetidene [J]. *Chinese Journal of Explosive & Propellants*, 2005, 28(4): 35-40.

Computational Investigation of Energy Characteristics of Propellant Containing Hydroxylammonium 2-Dinitromethyl-5-nitrotetrazolate

ZHANG Min, BI Fu-qiang, XU Cheng, LIU Qing, GE Zhong-xue, WANG Bo-zhou, WANG Wei, ZHU Yong

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

Abstract: Under the standard condition (ratio of chamber pressure to exit pressure ($p_c:p_e$) is 70/1), the energy parameters of HTPB and CMDB propellants containing hydroxylammonium 2-dinitromethyl-5-nitrotetrazolate (HADNMNT) were calculated by minimum free energy method. The density impulse of the HADNMNT monopropellant is $4936.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{cm}^{-3}$, which is higher to that of the RDX and lower to HMX and CL-20. Replacing AP with HADNMNT in HTPB propellant can increase specific impulse by $428.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$. The iso-impulse trigonal figure of the HTPB propellant is drawn out, and the relationship between specific impulse and ingredients was discovered. The impulse of HTPB propellant is up to $2778.9 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, when the mass fractions of HTPB, HADNMNT, RDX and Al powder are 10%, 60%–62%, 14%–16% and 14%–15%, respectively. Replacing RDX with HADNMNT in smokeless CMDB propellant, the specific impulse increases to $2522.9 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$. Moreover, the specific impulse of CMDB propellant can be remarkably improved through adjusting the mass fractions of HADNMNT and Al powder. The impulse of CMDB propellant reaches $2598.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, when the mass fractions of NC, NG, HADNMNT, Al, DINA and Al powder are 25%, 33%, 11%, 20%, 3.5% and 7.5%, respectively.

Key words: hydroxylammonium 2-dinitromethyl-5-nitrotetrazolate (HADNMNT); oxidizer; high energy propellant; energy characteristics

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.09.006



《含能材料》高效毁伤弹药专栏征稿

高效毁伤弹药以“利用最小化成本获得最大化效果”为目标,对含能材料的性能和能量提出了更高的要求。为进一步促进高效毁伤弹药及其技术的研究,本刊将于2015年增设高效毁伤弹药专栏,内容涉及(1)传统含能材料的优化和改进以及先进含能材料的开发和应用,包括:传统含能材料合成、制造、处理和应用的新技术与新技术,新的CHON含能材料的开发和应用,金属化炸药,非传统概念炸药(如燃料空气炸药、温压炸药),高能量密度材料;(2)含能材料能量的控制输出研究,包括:能量输出增强(如组合装药),能量输出聚焦/定向,能量输出模式可控(如多模装药),能量输出范围可控(如低附带毁伤炸药)。欢迎广大学者投稿,来稿时请选择对应的专栏。

《含能材料》编辑部