

文章编号:1006-9941(2005)04-0225-04

## 含3,4-二硝基呋咱基氧化呋咱(DNTF) 推进剂的能量特性

罗阳, 高红旭, 赵凤起, 陈沛, 张志忠, 周彦水, 李上文

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

**摘要:** 利用国军标方法及CAD系统软件,在标准条件( $p_c/p_c = 70:1$ )下,计算了含3,4-二硝基呋咱基氧化呋咱(DNTF)的各类推进剂的能量特性,结果表明DNTF的单元推进剂比冲为 $2696.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ,比CL-20单元推进剂的理论比冲还高 $31.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ;用DNTF取代丁羟推进剂、改性双基推进剂以及GAP推进剂中的RDX或AP可以提高相应推进剂的理论比冲和特征速度。由于DNTF不含氯元素,且摩擦感度比RDX低得多,因此将DNTF引入推进剂中对提高推进剂的综合性能是有益的。

**关键词:** 物理化学; 3,4-二硝基呋咱基氧化呋咱(DNTF); 推进剂; 能量特性

**中图分类号:** TJ55; V512

**文献标识码:** A

### 1 引言

高能密度化合物可用于制造炸药、推进剂或火工品,几乎被所有的武器系统使用,其性能微小的改进,往往会对武器系统的效能产生很大影响。

目前,尽管合成出的新型含能化合物众多,但在综合性能上超过HMX的为数不多,其中具有代表性的物质是六硝基六氮杂异伍兹烷(CL-20)以及3,4-二硝基呋咱基氧化呋咱(DNTF)。CL-20是一种新型高能氧化剂,用于固体推进剂配方中能改善固体推进剂的综合性能<sup>[1,2]</sup>,王申等<sup>[3]</sup>曾计算了CL-20对NEPE推进剂的能量特性的影响。DNTF作为一种新的呋咱化合物<sup>[4]</sup>,具有许多独特的优点<sup>[5,6]</sup>,如威力大,熔点低,感度适中(摩擦感度为12%,比RDX的76%低得多),热安定性好,熔铸固化性能优良,能溶解在硝化甘油等极性硝酸酯中,可作为高能火药或炸药的混合增塑剂。另外DNTF比冲与CL-20相近且制造工艺更简便,价格低廉,因而是一种很有竞争力的高能密度化合物,预期它对提高推进剂能量水平和降低特征信号有巨大的潜力。

本文利用国军标方法及CAD系统软件<sup>[7]</sup>,在标准条件( $p_c/p_c = 70:1$ )下,计算了推进剂的能量特性参数,寻求DNTF对丁羟推进剂、双基系推进剂和GAP

推进剂能量特性的影响规律,评价了含DNTF的几种推进剂的能量水平。

### 2 DNTF和其它氧化剂的性能比较

表1和表2中列出了几种高能氧化剂的性能及其单元推进剂的能量特性,其中FOX-7(1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯)和FOX-12(*N*-脒基脒-二硝酰胺盐)均是新型的含能化合物,FOX-7性能与RDX接近,FOX-12具有感度低、不吸湿、热安定性非常好、不溶于水等优点。从表中数据可以看出:DNTF单元推进剂的理论比冲( $I_{sp}$ )为 $2696.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ,比CL-20单元推进剂的比冲还高 $31.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ ,但其燃烧产物的平均相对分子质量( $\bar{M}_w$ )(31.21)在几种含能化合物中也是最高的,其密度和有效含氧量均略高于RDX。

### 3 DNTF推进剂能量特性计算

#### 3.1 含DNTF的丁羟推进剂

为了考察DNTF取代RDX和AP给推进剂能量特性参数和燃烧产物带来的影响,在所研究的推进剂配方中,HTPB和Al的含量不变,分别为10%和5%。先保持AP含量不变,用DNTF逐步取代RDX,进而取代AP,当DNTF含量为55%~65%时,排气的平均分子量降至最低。其能量特性计算结果见表3。

从表3可以看出,当保持AP含量不变,用DNTF逐步取代RDX,燃烧温度( $T_c$ )、推进剂理论比冲和排气的平均相对分子质量( $\bar{M}_w$ )随着DNTF含量的增加而增加,当DNTF完全取代RDX后,推进剂的比冲约提高了 $15 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。当DNTF进一步取代AP时,

收稿日期:2004-12-17;修回日期:2005-03-24

基金项目:燃烧技术国家重点实验室基金资助项目(No. 51455030101)

作者简介:罗阳(1974-),工程师,学士,高分子材料专业。

e-mail: npecc@163.com

在 DNTF 含量为 45% ~ 55% 时,作为能量含量指标的比冲和火焰温度,增至最大,然后出现一个下降的趋势;而特征速度( $C^*$ )在 DNTF 含量为 55% ~ 65% 时,增至最大。从氧平衡看,当保持 AP 含量不变,用 DNTF 逐步取代 RDX 氧平衡逐渐升高,但当 DNTF 进

一步取代 AP 时,氧平衡又逐步降低,这说明,氧平衡为 -27.92 左右时,该种推进剂能量最佳。当然,随 AP 含量逐步降低,尾气中的 HCl 烟雾也越来越小,由此可见,用 DNTF 取代部分 AP 是实现丁羟推进剂高能化和少烟化的一个途径。

表 1 几种含能化合物的性质

Table 1 Properties of some energetic compounds

name	FOX-12	FOX-7	DNTF	RDX	AP	ADN	CL-20
chemical formula	$C_2H_7N_7O_5$	$C_2N_4H_4O_4$	$C_6N_8O_8$	$C_3H_6N_6O_6$	$NH_4ClO_4$	$NH_4N(NO_2)_3$	$C_6H_6N_{12}O_{12}$
relative molecular mass	209	148	312	222	117	124	438
oxygen balance/%	-26.8	-21.6	-20.5	-21.6	34.0	25.8	-10.1
melting point/ $^{\circ}C$	-	236	110	203	>150 (decomposition)	91.5	-
density/ $g \cdot cm^{-3}$	1.8	1.9	1.9	1.8	1.95	1.8	2.0
formation enthalpy/ $kJ \cdot mol^{-1}$	-355.3	-133.76	644.3	70.7	-290	-140	415.5

表 2 几种含能化合物单元推进剂的能量特性

Table 2 Energy characteristics of some monopropellants of energetic compounds

energetic materials	FOX-12	FOX-7	DNTF	RDX	AP	ADN	CL-20
$I_{sp}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$	2379.6	2343.6	2696.4	2610.2	1550.3	2002.5	2665.3
$C^*/m \cdot s^{-1}$	1517.6	1490.5	1671.8	1650.2	990.3	1282.6	1638.9
$T_c/K$	2798	2799	4069.0	3297.0	1433	2100	3590.0
$\bar{M}_w$	23.71	24.68	31.21	24.68	28.92	24.81	29.19
mole fraction of the main combustion products							
H <sub>2</sub>	0.15	0.15		0.15			0.12
N <sub>2</sub>	0.5	0.3	0.4	0.3	0.1	0.4	0.4
O <sub>2</sub>					0.3	0.2	
Cl <sub>2</sub>					0.1		
HCl					0.1		
H <sub>2</sub> O	0.2	0.2		0.2	0.4	0.4	0.1
CO <sub>2</sub>	0.1	0.15	0.2	0.15			0.2
CO	0.1	0.2	0.4	0.2			0.2

表 3 丁羟推进剂的燃烧和能量特性

Table 3 Combustion and energy characteristics of hydroxy-terminated polybutadiene propellant

AP	RDX	DNTF	$I_{sp}/N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*/m \cdot s^{-1}$	$T_c/K$	$\bar{M}_w$	$O_b/\%$
60	25	0	2542.35	1587.1	3209	26.16	-21.45
60	15	10	2548.93	1589.2	3271	26.75	-20.42
60	0	25	2557.54	1591.4	3362	27.69	-18.87
50	0	35	2561.89	1600.9	3376	27.20	-23.39
40	0	45	2563.96	1609.0	3385	26.73	-27.92
30	0	55	2563.69	1615.7	3384	26.27	-32.45
20	0	65	2559.91	1618.5	3359	25.83	-36.98
10	0	75	2518.12	1566.7	3130	26.53	-41.50
5	0	80	2506.25	1556.6	2942	27.26	-43.77
0	0	85	2506.78	1550.5	2974	28.11	-46.03

### 3.2 含 DNTF 的改性双基推进剂

#### 3.2.1 含 DNTF 的交联改性双基推进剂

以成熟的交联改性双基推进剂配方为基础,其中聚乙二醇(PEG)和硝化甘油(NG)的含量不变,分别为 8% 和 27%。用 DNTF 逐步取代 RDX,考察推进剂能量的变化规律。从表 4 可以看出,随 DNTF 含量增加,体系的理论比冲、特征速度、燃烧温度和排气平均相对分子质量均呈线性增加的趋势,当 DNTF 完全取代原配方中的 RDX 时,其理论比冲增加了 61.97  $N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ,特征速度增加了 23.8  $m \cdot s^{-1}$ 。这说明,将 DNTF 引入到交联改性双基推进剂对提高该推进剂中的能量是有益处的,另外由于 DNTF 的摩擦感度比 RDX 低得多,因此,研制 DNTF 交联改性双基

推进剂对改进交联改性双基推进剂的能量、工艺安全和特征信号是有价值的。

表 4 交联改性双基推进剂的燃烧和能量特性

Table 4 Combustion and energy characteristics of cross-link modified double base propellant

RDX	DNTF	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$\bar{M}_w$	$O_b$ /%
65	0	2584.63	1638.0	3185	23.85	-21.63
60	5	2589.86	1640.7	3219	24.10	-21.11
55	10	2595.03	1643.2	3254	24.35	-20.60
50	15	2600.15	1645.9	3288	24.60	-20.08
45	20	2605.14	1648.1	3322	24.86	-19.56
40	25	2610.10	1649.9	3355	25.12	-19.05
35	30	2614.95	1653.0	3389	25.39	-21.77
25	40	2624.44	1655.7	3457	25.95	-17.50
15	50	2633.57	1658.4	3524	26.54	-16.46
0	65	2646.60	1661.8	3627	27.46	-13.22

### 3.2.2 含 DNTF 的非交联改性双基推进剂

在典型的非交联改性双基推进剂配方中,其中 NG 含量不变,为 28%。用 DNTF 逐步取代 RDX 后,又向推进剂中引入另一种新型含能化合物 FOX-12,考察 DNTF 和 FOX-12 对推进剂能量特性参数的影响,推进剂配方和计算结果见表 5。

表 5 非交联改性双基推进剂的燃烧和能量特性

Table 5 Combustion and energy characteristics of non-crosslink modified double base propellant

NC	RDX	DNTF	FOX-12	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$\bar{M}_w$	$O_b$ /%
39	33	0	0	2480.16	1563.0	3144	26.15	-21.16
39	30	3	0	2483.13	1564.5	3164	26.33	-20.85
39	25	8	0	2488.01	1566.7	3197	26.63	-20.34
39	20	13	0	2492.80	1568.5	3229	26.93	-19.82
39	15	18	0	2497.44	1570.0	3261	27.24	-19.30
39	10	23	0	2501.96	1571.2	3293	27.56	-18.79
39	5	28	0	2506.35	1572.5	3324	27.89	-18.27
39	0	33	0	2510.57	1573.4	3354	28.22	-17.75
34	0	33	5	2520.60	1578.3	3365	28.19	-16.79
32	0	33	7	2524.59	1580.4	3368	28.18	-16.40

从表 5 可以看出,随着 DNTF 逐步取代 RDX,推进剂的理论比冲、特征速度、燃烧温度和排气平均相对分子质量也逐渐增大,当 DNTF 完全取代原配方中的 RDX 时,其理论比冲和特征速度仅增加了  $30.41 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ 、 $10.4 m \cdot s^{-1}$ 。这表明 DNTF 对提

高非交联改性双基推进剂的能量作用效果不显著。当将 FOX-12 引入体系中来取代部分 NC,从表 5 可以看出,推进剂的理论比冲、特征速度和燃烧温度仍保持继续增大的趋势,而燃气平均相对分子质量却变化很小。由于 FOX-12 燃烧性质与硝化纤维素(NC)相似,且能量比 NC 高,又具有较高的安定性,因此用 FOX-12 部分取代 NC 可能对提高非交联改性双基推进剂的综合性有利。

### 3.3 含 DNTF 的 GAP 基推进剂

GAP 推进剂的燃速高,但其能量相对较低,因此,用 DNTF 取代 RDX 来提高 GAP 推进剂的能量。从表 6 的计算结果可以看出,随着 DNTF 逐步取代 RDX,推进剂的各项能量特性参数逐渐增大,而当增大 GAP 的含量降低 DNTF 含量后,相应的推进剂理论比冲也降低了。这说明要根据所需的能量水平再结合其它性能来调节 GAP 与 DNTF 比例。

表 6 GAP 基推进剂的燃烧和能量特性

Table 6 Combustion and energy characteristics of GAP propellant

GAP	RDX	DNTF	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$\bar{M}_w$	$O_b$ /%
10	90	0	2528.97	1613.9	3045.0	22.97	-31.56
10	80	10	2540.96	1621.2	3122.0	23.43	-30.53
10	60	30	2564.52	1634.9	3279.0	24.40	-28.46
10	40	50	2587.48	1648.1	3442.0	25.45	-26.40
10	20	70	2610.20	1660.2	3617.0	26.60	-24.33
10	0	90	2633.59	1672.7	3824.0	27.86	-22.26
20	0	80	2532.29	1560.3	2726.0	21.50	-33.26
24	0	76	2484.76	1604.2	3239.0	24.28	-37.66
26	0	74	2464.54	1584.3	3145.0	24.14	-39.85
28	0	72	2447.36	1563.6	3052.0	24.08	-42.05

GAP 含量维持不变为 24%,为了进一步提高 GAP 推进剂的能量水平,在配方中添加 Al 粉构成少烟 GAP 推进剂体系,在保持 GAP 含量不变的情况下,用 Al 粉取代 DNTF,考察对能量参数的影响,推进剂和计算结果见表 7。可以看出,配方中 Al 粉含量增加,配方的理论比冲也增加,而当 Al 粉含量达到 8% 左右时,理论比冲反而下降,作为推进剂能量参数之一的特征速度也开始下降。因此,为了充分体现 DNTF 提高少烟 GAP 推进剂能量的优点,适当添加 Al 粉的含量(约 4%)是可以考虑的。

表 7 少烟 GAP 基推进剂的燃烧和能量特性  
Table 7 Combustion and energy characteristics  
of minimum smoke GAP propellant

DNTF	Al	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$\bar{M}_w$	$O_b$ /%
76	0	2484.76	1604.2	3239	24.28	-37.66
74	2	2510.97	1566.4	3110	25.36	-39.21
72	4	2522.80	1570.6	2998	26.62	-40.76
70	6	2517.17	1562.4	2973	27.74	-42.32
68	8	2506.38	1551.1	2992	28.27	-43.87
66	10	2495.62	1538.6	3010	28.82	-45.43
64	12	2484.86	1525.5	3026	29.40	-46.98
62	14	2474.01	1511.2	3041	29.99	-48.54
60	16	2461.49	1496.3	3055	31.03	-50.09
58	18	2445.48	1481.3	3068	32.12	-51.65

## 4 结 论

通过以上的计算不难看出, DNTF 的单元推进剂的理论比冲为  $2696.4 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ , 比 CL-20 单元推进剂的理论比冲还高  $31.1 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ , 用 DNTF 取代丁羟推进剂、改性双基推进剂、非交联改性双基推进剂以及 GAP 推进剂中的 RDX 或 AP 可以提高相应推进剂的理论比冲和特征速度。由于 DNTF 不含氯元素, 且摩擦感度比 RDX 低得多, 预计, 将 DNTF 引入推进剂中对提高推进剂的综合性能将是有益的。

### 参考文献:

[1] 王文俊, 张占权. 21 世纪固体推进剂发展趋势[J]. 推进技术, 2000, 21(6): 1-5.

WANG Wen-jun, ZHANG Zhan-quan. Prospect for solid propellant technologies at the beginning of the 21st century [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2000, 21(6): 1-5.

[2] 陈沛, 赵风起, 李上文, 等. 国外对高能量密度材料 CL-20 在固体推进剂中的应用研究[J]. 飞航导弹, 2002, (2): 57-60.

CHEN Pei, ZHAO Feng-qi, LI Shang-wen, et al. A study on the application of CL-20 in overseas solid propellants [J]. *Winged Missiles Journal*, 2002, (2): 57-60.

[3] 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, 25(1): 12-15.

WANG Shen, JING Shao-hua, SHENG Si-yuan, et al. Energetic level evaluation of NEPE solid propellant containing hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20) [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2002, 25(1): 12-15.

[4] 胡焕性, 覃光明, 张志忠, 等. 3,4-二硝基呋喃基氧化呋喃炸药 [P]. 专利号, 02101092.7, 2002.

HU Huan-xing, QIN Guang-ming, ZHANG Zhi-zhong, et al. 3, 4-dinitrofurazanfuroxan explosive [P]. China patent. 02101092.7, 2002.

[5] 王亲会. DNTF 基熔铸炸药的性能研究[J]. 火炸药学报, 2003, 26(3): 57-59.

WANG Qin-hui. Properties of DNTF-based melt-cast explosives [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2003, 26(3): 57-59.

[6] 胡焕性, 张志忠, 赵风起, 等. 高能量密度材料 3,4-二硝基呋喃氧化呋喃性能及应用研究[J]. 兵工学报, 2004, 25(2): 155-158.

HU Huan-xing, ZHANG Zhi-zhong, ZHAO Feng-qi, et al. A study on the properties and application of high energy density material DNTF [J]. *Acta Armamentarii*, 2004, 25(2): 155-158.

[7] 中华人民共和国国家军用标准. 推进剂能量计算方法[S]. GJB/Z84-96.

The National Military Standards of China. Calculation Methods of Propellant Energy [S]. NGJB/Z84-96.

## Energy Characteristics of Propellant Containing 3,4-Dinitrofurazanfuroxan (DNTF)

LUO Yang, GAO Hong-xu, ZHAO Feng-qi, CHEN Pei, ZHANG Zhi-zhong, ZHOU Yan-shui, LI Shang-wen

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

**Abstract:** Under standard condition ( $p_c/p_e = 70:1$ ), the energy parameters of the propellant containing 3, 4-dinitrofurazanfuroxan (DNTF) are calculated by CAD system of propellant energy calculation. Results show that the specific impulse of the DNTF monopropellant is  $2696.4 N \cdot s \cdot kg^{-1}$  and is similar to that of the CL-20 monopropellant. The theoretical specific impulse and characteristic velocity of propellants including hydroxy-terminated polybutadiene composite propellant, composite modified double base propellant and GAP propellant are increased by DNTF substituting the ingredient RDX or AP. DNTF has no chlorine and its friction sensitivity is much lower than that of RDX, therefore, DNTF introduced into the propellant composition is helpful for the comprehensive performance of the propellant.

**Key words:** physical chemistry; 3, 4-dinitrofurazanfuroxan (DNTF); propellant; energy characteristics