

文章编号: 1006-9941(2015)10-0919-05

氧化高氮杂环羟胺盐在固体推进剂中的能量性能分析

曹一林¹, 刘建平²

(1. 航天科技集团公司四院四十二所, 湖北 襄阳 441003; 2. 总参陆航部驻洛阳地区军事代表, 河南 洛阳 471000)

摘要: 为评价新的氧化高氮杂环羟胺盐作为复合固体推进剂组分的能量潜力, 采用推进剂性能评估程序 PEP 模拟计算了 3,3'-二硝基-5,5'-联-(1-氧-1,2,4-三唑)二羟铵(DHDNBT)、5,5'-联-1,1'-二氧-四唑二羟铵(TKX-50)和 5,5'-偶氮联-(1-氧四唑)二羟铵(DHABT)取代 AP/Al/HTPB 和 AP/Al/GAP+NE 两种复合固体推进剂体系中 AP 后的能量效果, 并与 HMX 进行了比较。结果显示, 在高固体含量的 AP/Al/HTPB 体系中, TKX-50 和 DHABT 取代部分 AP 所得到的配方在很大的配方调节范围内能量性能与 HMX 取代 AP 配方相当, DHDNBT 取代 AP 所得配方能量特性与同样含量 HMX 取代 AP 所得配方相当。在 AP/Al/GAP+NE 体系中, DHDNBT 配方能量性能与同样含量 HMX 配方相同。含 TKX-50 和 DHABT 配方能量性能优于含 HMX 配方。含 TKX-50 和 DHABT 配方最高冻结流比冲分别为 $2662.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 和 $2696.0 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比 HMX 取代同体系中 AP 所得配方的最高冻结流比冲 ($2622.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$) 高 $40.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (TKX-50) 和 $73.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (DHABT)。用设想的双-(1-氧-四唑)胺二羟铵(DHBTA)取代 AP/Al/GAP+NE 体系中 AP 可使最高冻结流比冲达到 $2708.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比 HMX 取代同体系中 AP 所得的最高冻结流比冲高 $86.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 且在很大配方调节范围内有比 HMX 配方更高的能量特性。

关键词: 固体推进剂; 高能氧化剂; 氧化四唑羟胺盐; 氧化三唑羟胺盐

中图分类号: TJ55; V512

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.10.001

1 引言

固体推进剂能量提高是推进剂组份生成焓提高、燃烧产物生成焓降低和单位质量推进剂燃烧气体产物摩尔数增加三方面的综合结果^[1-2]。氧化剂在固体推进剂中的质量分数最大, 它对配方总焓和单位推进剂燃烧产物摩尔数影响最大。目前, 复合固体推进剂中通用的氧化剂为高氯酸铵(AP), 其生成焓较低(约为 $-2500 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$), 燃烧产物中有大量的 HCl 气体, 这两点都不利于提高推进剂能量性能。采用高能添加剂 HMX(1,3,5,7-四硝基-1,3,5,7-四氮杂辛环)和 RDX(1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂己环)取代部分 AP 可得到总焓相对较高、燃烧气态产物平均分子量相对较低的配方, 从而提高固体推进剂的能量性能。目前, 用 HMX 取代 AP/Al/HTPB 三组元推进剂中的部分 AP, 可获得能量性能更高的 AP/Al/HMX/HTPB 四组元配方。

文献[3-5]报道了 3,3'-二硝基-5,5'-联-(1-氧-1,2,4-三唑)二羟铵(DHDNBT)、5,5'-联-1,1'-二氧-

四唑二羟铵(TKX-50)和 5,5'-偶氮联-(1-氧-四唑)二羟铵(DHABT)三个热稳定性和安全性能优良的含能化合物, 给出了其合成方法和基本理化特性, 其研究结果表明, TKX-50 和 DHABT 标准生成焓分别为 $1891.17 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 和 $2766.88 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 远高于 HMX。氢含量分别 3.39% 和 3.03%, 远高于 HMX。DHDNBT 标准生成焓为 $657.0 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 高于 HMX, 但氢含量 2.47%, 低于 HMX, 因此用这三个新型含能物质取代 AP/Al/HTPB 和高氯酸铵/铝粉/端羟基缩水甘油醚预聚物+混合硝酸酯(AP/Al/GAP+NE)两个复合固体推进剂配方体系中的部分 AP, TKX-50 和 DHABT 有可能得到能量性能优于 HMX 的配方, DHDNBT 则有可能得到能量性能与 HMX 相当的配方。为此, 本研究采用推进剂性能评估程序(propellant performance evaluation program)^[6], 模拟比较这三个新型含能物质和 HMX 逐渐取代 AP/Al/HTPB 和 AP/Al/GAP+NE 中 AP 所得配方的能量特性变化情况, 评估其作为固体推进剂组分的能量潜力。

2 新型氧化四唑羟胺盐能量性能分析

2.1 新物质在 AP/Al/HTPB 体系中的能量性能分析

理论上能量性能最优的 HTPB 三组元推进剂配方

收稿日期: 2014-10-08; 修回日期: 2015-03-23

基金项目: 航天科技集团公司航天支撑项目(617010406)

作者简介: 曹一林(1963-), 男, 研究员, 主要从事含能材料和固体推进剂新型高能组分的开发和应用研究。e-mail: yilin20072007@163.com

为 68% AP/18% Al/14% HTPB, 理论冻结流比冲为 $2518.6 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (因为小型发动机试验结果与冻结流比冲计算结果更接近, 本研究所有比冲都采用冻结流比冲)。采用 HMX 取代 AP/Al/HTPB (Al 含量为 18%, HTPB 为 10%, 12%, 14%) 中的 AP, 其比冲变化情况如图 1 所示。

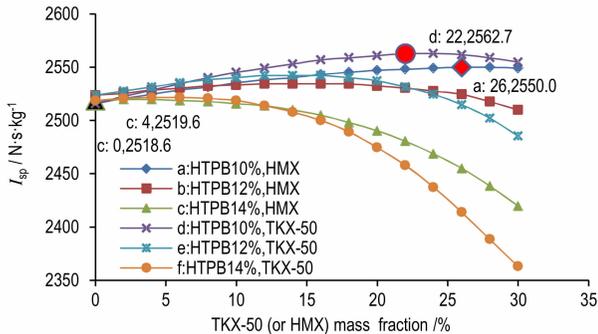


图 1 AP/Al/HTPB 配方中比冲随 TKX-50 (或 HMX) 取代量变化 (Al 含量均为 18%)

Fig. 1 Specific impulses (I_{sp}) of AP/Al/HTPB varying with contents of substitutes (TKX-50 or HMX) (Al content: 18%)

从图 1 曲线 a 和曲线 b 可以看出, 降低 HTPB 含量可提高 HMX 的有效添加量和发挥 HMX 在配方中提高比冲的效果; 固含量达 90% 的 HTPB 配方中, HMX 有效取代 AP 的量可达到 26%, 理论比冲最高可达到 $2550.0 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比 AP/Al/HTPB 三组元配方最高比冲 ($2518.6 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$) 高出 $31.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。从图 1 曲线 c 可以看出, 在 18% 铝含量的 86% 固含量配方中用 HMX 取代 AP, 只有在 HMX 量较低时 (5% 以下), 比冲提高约 $1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。其原因是 HMX 取代 AP 后, 配方氧含量降低, 取代量较小时, 氧含量的降低可通过减少燃气中 CO_2 和 H_2O 解决, 而取代量达到一定程度后, 氧含量的减少将影响到 Al 粉的正常氧化, 因此比冲就会呈现下降趋势。热力计算结果显示, 基础配方燃气组分中 H_2O 和 CO_2 含量已经很少; 随 HMX 取代量增加, 两者含量进一步降低, 并开始出现 AlCl_3 、 AlCl_2 、 AlCl 和 AlOCl 等生成焓较高的含铝物质。HTPB 是一种耗氧量很大的粘合剂, 因此降低粘合剂含量是缓解大量 HMX 引入影响铝粉正常氧化的有效方法。

同样用 TKX-50 取代上述 AP/Al/HTPB 配方中的 AP, 其比冲变化情况见图 1 曲线 d、e 和 f。从图 1 中曲线 e 和曲线 f 可以看出, 在 HTPB 含量 12% 和 14% 的配方中, 少量 TKX-50 取代 AP, 其比冲变化效果与

HMX 相当或略优; 但是, 随取代量增大, 到一定值后其效果会不如 HMX。这是因为 TKX-50 有效氧含量比 HMX 低, 会影响 Al 粉的正常氧化反应。HTPB 含量为 10% 的配方中, 在一定范围内用 TKX-50 取代 AP 比 HMX 有一定能量增益, 但最高时理论比冲仅比 HMX 配方高约 $12.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

从以上模拟结果可以看出在 HTPB 体系中 TKX-50 对 HMX 的能量性能优势非常微小, 而且由于其有效氧含量低于 HMX, 能量优势只有在高固体含量时才可能表现出来, 最高比冲比 HMX 取代所能达到的最高比冲高约 $12.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

与 TKX-50 同时期出现的另一个稳定性和安全性优良的氧化氮杂环胺盐是 DHDNBT。由于硝基的引入, 其有效氧含量和 H 含量都与 HMX 较接近, 但其生成焓高于 HMX, 低于 TKX-50。对其在 AP/Al/HTPB 中取代 AP 的能量性能变化模拟结果见图 2。

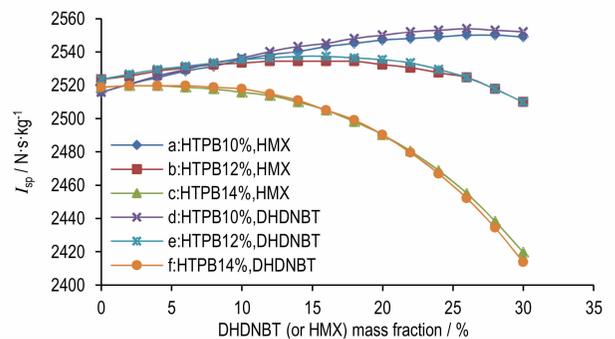


图 2 AP/Al/HTPB 比冲随 DHDNBT (或 HMX) 取代量变化情况 (Al 含量均为 18%)

Fig. 2 I_{sp} of AP/Al/HTPB varying with contents of substitute (DHDNBT or HMX) (Al content: 18%)

从图 2 可以看出, 用 DHDNBT 取代 AP 与 HMX 取代 AP 的能量效果几乎相同, 这是因为 DHDNBT 密度、组成和有效氧含量均与 HMX 相近, 不失为一种较好的 HMX 替代物。

在上述两种物质的两个高氮杂环之间加入偶氮连接可得到两个新的含能物质, 5, 5'-偶氮联-(1-氧-四唑)二羟胺盐 (DHABT) 和 3, 3'-二硝基-5, 5'-偶氮联-(1-氧-1, 2, 4-三唑)二羟胺 (DHADNBT)。采用 HMX 和 DHABT 逐步取代上述 AP/HTPB/A 三组元配方中的 AP, 其比冲变化情况见图 3。由图 3 可见, DHABT 取代配方中 AP 配方能量性能变化情况与 TKX-50 取代 AP 相同, 但在高固体含量中比 TKX-50 取代的能量优势稍大, 含 DHABT 配方最高比冲比含 HMX 配方最

高比冲约高 $27.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

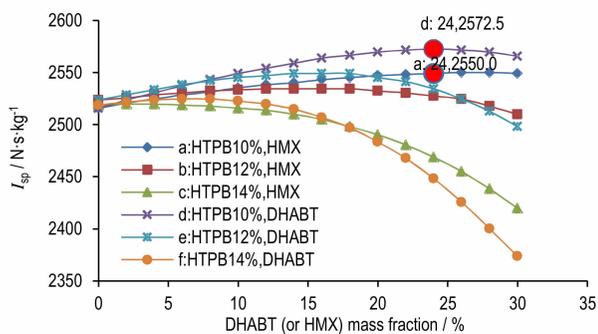


图3 AP/Al/HTPB 比冲随 DHABT(或 HMX)取代 AP 量变化情况 (Al 含量均为 18%)

Fig. 3 I_{sp} of AP/Al/HTPB varying with contents of substituent (DHABT or HMX) (Al content: 18%) instead of AP

从上面的模拟分析可知,在 HTPB 体系中,TKX-50、DHDNBT 与 HMX 相比,能量性能没有明显优势,TKX-50 在高固含量配方中理论比冲最高,比 HMX 高 $14.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

2.2 新物质在 AP/Al/GAP+NE 体系的能量性能分析

GAP+NE 是最新研制的用于固体推进剂的富氧粘合剂体系。因 GAP 具有高的正生成焓,理论上,AP/Al/HMX/GAP+NE 的最高比冲比在研的 AP/Al/HMX/PEG+NE (PEG: 端羟基聚乙二醇) 配方高 $19.6 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。用 TKX-50, DHDNBT 和 DHABT 分别逐步取代 AP/Al/GAP+NE 中 (配方中 PEG 或 GAP 含量均为 6.0%, NE 为 2:1 的硝化甘油和丁三醇三硝酸酯混合物,增塑剂与粘合剂之比为 3:1) 的 AP, 计算体系比冲能量变化,并与 HMX 取代 AP 的比冲变化情况相比较,结果如图 4~图 6 所示。

图 4 显示,TKX-50 取代 AP/Al/GAP+NE 中的 AP,在很大的配方调节范围内比冲明显高于 HMX; 比冲最高可达到 $2662.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (14% 铝含量的全取代配方); 比 HMX 取代 AP 所能达到的最高比冲高 $40.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。由于 TKX-50 氧含量和有效氧含量均低于 HMX, Al 含量 18% 以上配方中,当 TKX-50 含量达到约 45% 时,配方比冲会随其含量增加而降低,而 HMX 取代 AP 时,这种情况只在 Al 含量大于 20% 的配方中出现。

DHDNBT 分子组成、氧含量和有效氧含量均与 HMX 较接近,图 5 显示其在 AP/Al/GAP+NE 在配方中取代 AP 的比冲变化也与 HMX 相近,在多数情况下, DHDNBT 取代 AP 所得配方比冲略高于 HMX 取代 AP

所得配方,其所能达到的最高比冲为 $2632.3 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 仅比 HMX 取代 AP 所能达到的最高比冲高约 $10 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 由于其密度也与 HMX 相近,如果在燃烧性能和其它性能上有优势,在 GAP+NE 体系中它是一种较好的 HMX 替代物。

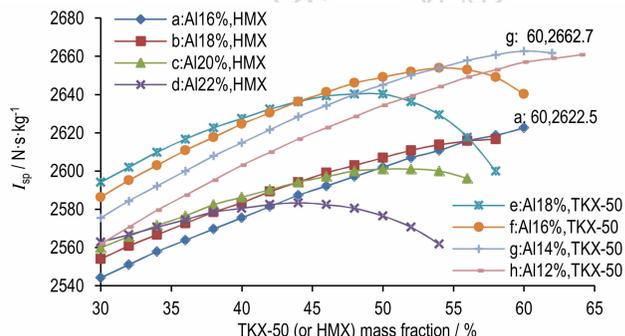


图4 AP/Al/GAP+NE 比冲随 TKX-50(或 HMX)取代 AP 量变化
Fig. 4 I_{sp} of GAP+NE/Al/AP varying with contents of substitutes (TKX-50 or HMX) instead of AP

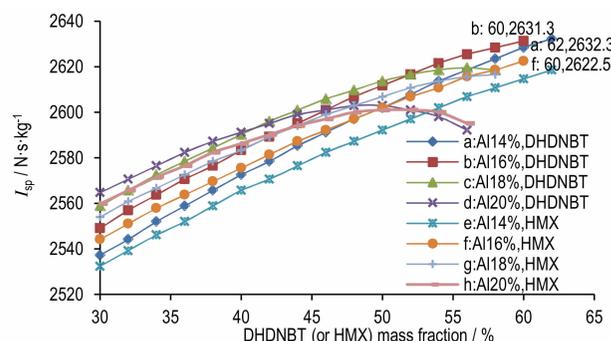


图5 AP/Al/GAP+NE 比冲随 DHDNBT(或 HMX)取代 AP 量变化
Fig. 5 I_{sp} of AP/Al/GAP+NE varying with contents of substitutes (DHDNBT or HMX) instead of AP

DHABT 与 TKX-50 仅有一个偶氮单元的差别, HABT 取代 AP/Al/GAP+NE 中 AP 的比冲模拟计算结果见图 6。从图 6 可以看出,AP/Al/GAP+NE 中,比冲随 DHABT 取代 AP 量变化情况与 TKX-50 相似,但最高比冲配方为 12% 铝含量的全取代配方,比冲可达到 $2696.0 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比 HMX 取代所能达到的最高比冲高 $73.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 在 14% 铝含量配方中, DHABT 取代 AP, 最高可将比冲提高至 $2685.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比 HMX 取代 AP 的最高比冲提高了 $62.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。而且在很大的配方调节范围内, DHABT 取代 AP 配方比冲明显高于 HMX 取代 AP 配方。

AP/Al/GAP+NE 体系中,用 TKX-50 和 DHABT 取代 AP,在很大的配方调节范围内,比 HMX 取代 AP

有 $30 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 以上的比冲增益。由于这两个新物质氧含量和有效氧含量均低于 HMX, 而 AP/Al/GAP+NE 体系缓解氧含量不足只有通过降低 Al 含量解决, 因此这两个物质较适合于铝含量低 (12% ~ 16%) 的配方。降低铝含量, 推进剂密度会有一定损失, 铝含量从 HMX 最适合的 18% 降至这两个物质最适合的 14%, 密度损失约为 $0.04 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。

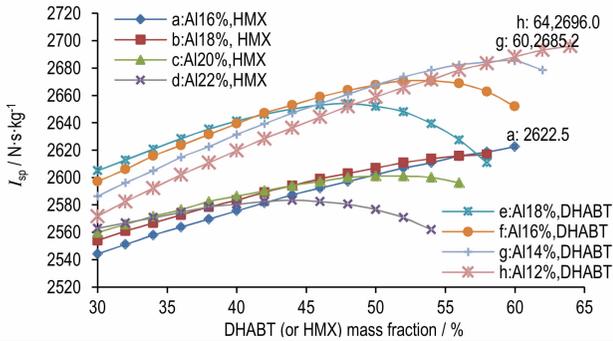
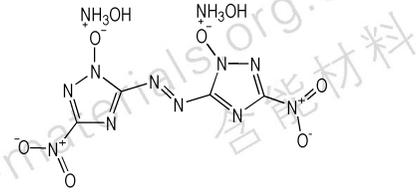


图 6 AP/Al/GAP+NE 比冲随 DHABT(或 HMX) 取代量变化
Fig. 6 I_{sp} of AP/Al/GAP+NE varying with contents of substitutes (DHABT or HMX)

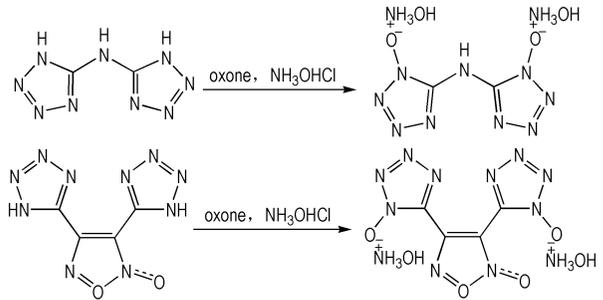
3 新型氧化杂环羟胺盐组分的设计思路

上节的计算结果显示, 在 AP/Al/HTPB 和 AP/Al/GAP+NE 两种固体推进剂配方体系中, 三种新型氧化高氮杂环羟胺盐取代 AP 所得到配方, 在很大的配方调节范围内能量性能水平优于或与 HMX 取代 AP 所得配方相当, 证明氧化高氮杂环羟胺盐是一种可用于构建固体推进剂新型高能组份分子的有效结构单元。DHABT 和 TKX-50 结构仅有两个四唑环的连接方式, DHABT 采用了偶氮连接, 但其在 GAP 系统中 DHABT 配方能量水平明显高于 TKX-50。因此偶氮结构可认为是一种可提高推进剂比冲的结构单元, 如此类推, 与 DHDNBT 多一个偶氮连接的 3,3'-二硝基-5,5'-偶氮联-(1-氧-1,2,4-三唑)二羟胺 (DHADNBT), 可通过 DHDNBT^[7] 作相应转化 (Scheme 1) 能量性能可能优于 DHDNBT 和 HMX。国外报道这三个新物质合成和性能文献中, 还介绍了几种简单的将高氮杂环转化为相应氧化高氮杂环羟胺盐的方法。如果目前已有文献报道的双四唑氧化呋喃和双四唑胺^[8-9] 可按这些方法转化为相应的羟胺盐, 则可能得到两种新的固体推进剂高能组分, 双-(1-氧-四唑)胺二羟胺 (DHBTA) 和 3,4-双(1-氧-5-四唑基)氧化呋喃二羟胺 (DHBTF), 见 Scheme 2。

设计等键反应法估算 DHBTA 生成焓为 $2400 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$, 对其在 AP/Al/GAP+NE 取代 AP 进行配方能量模拟计算, 结果见图 7。



Scheme 1 Dihydroxylammonium 3,3'-dinitro-azo-bis-(1,2,4-triazole)-1,1'-diolate



Scheme 2 Synthesis route of dihydroxylammonium bis(oxidotetrazol-5-yl) furoxan and bis(oxidotetrazol-5-yl) amine via oxidation of corresponding bistetrazole derivatives

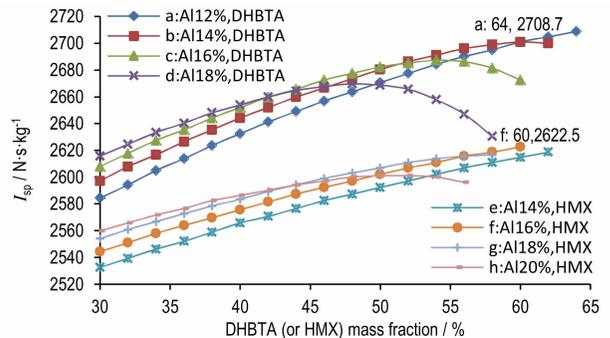


图 7 AP/Al/GAP+NE 比冲随 DHBTA(或 HMX) 含量变化关系
Fig. 7 I_{sp} of AP/Al/GAP+NE varying with contents of substitutes (DHBTA or HMX)

图 7 结果显示 DHBTA 取代 GAP/Al/AP 中 AP 的比冲变化情况与 TKX-50 和 DHABT 相似, 同样在低 Al 含量 (12% ~ 16%) 的配方中效果较好。所能达到的最高理论比冲为 $2708.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 比同样体系中 HMX 取代 AP 所能达到的最高比冲高 $86.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, 优于 TKX-50 和 DHABT。

4 结论

模拟计算 TKX-50、DHDNBT 和 DHABT 替代 AP/Al/HTPB 和 AP/Al/GAP+NE 两个现代复合固体

推进剂配方系统中 AP 的比冲增益,并与 HMX 替代 AP 的结果进行比较,结果显示,DHDNBT 在两个体系中取代 AP 的能量增益效果与 HMX 相当;在 HTPB 体系中,TKX-50、DHDNBT 与 HMX 相比,能量性能优势不明显,TKX-50 在高固含量 HTPB 配方中最高只能表现出比 HMX 高 $14.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 的比冲优势,而 DHABT 的比冲优势也只有约 $27.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 比冲增益;在 AP/Al/GAP+NE 体系中,用 TKX-50 取代 AP,比目前采用的用 HMX 取代 AP 所能达到的最高能量高 $40.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$,因此,它可作为下一代新型高能固体推进剂研制的高能组分;用 DHABT 取代 AP/Al/GAP+NE 体系中 AP,与 HMX 取代 AP 的最高能量相比,能量增益为 $73.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$,但 DHABT 密度仅为 $1.778 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$,不适合用于高密度要求的配方。

文献资料和模拟计算结果表明,氧化高氮杂环胺盐是一种可用于构建固体推进剂新型高能组份分子的有效结构单元。模拟计算新设计的高能化合物 DHBTA 取代 AP/Al/GAP+NE 中 AP 的能量增益效果显示,DHBTA 取代 AP 所能达到的最高冻结比冲为 $2708.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$,比 HMX 取代 AP 所能达到的最高冻结比冲高 $86.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$,能量性能优于 TKX-50 和 DHABT。由于 TKX-50、DHABT 有效氧含量均低于 HMX,因此它们比

较适合用于铝含量相对较低(12%~18%)的配方。

参考文献:

- [1] 曹一林,何金选,卢艳华,等. 金属化 HTPB 推进剂能量与高能组分能量水平分析[J]. 航天动力材料, 2011, 2(2): 21-28.
- [2] David Lempert, Geli Nechiporenko, George Manelis. Energetic performances of solid composite propellants[J]. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2011, 8(1): 25-38.
- [3] Dennis Fischer, Thomas M. Klapötke, Davin G. Piercey, et al. Synthesis of 5-aminotetrazole-1-N-oxide and its azo derivative: a key step in the development of new energetic materials[J]. *Chem Eur J*, 2013, 19: 4602-4613.
- [4] Niko Fischer, Dennis Fischer, Thomas M Klapötke, et al. Pushing the limits of energetic materials-the synthesis and characterization of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate[J]. *J Mater Chem*, 2012, 22: 20418-20422.
- [5] Alexander A Dippold, Thomas M Klapötke. A Study of dinitro-bis-1,2,4-triazole-1,1'-diol and derivatives: design of high-performance insensitive energetic materials by the introduction of N-Oxides[J]. *J Am Chem Soc*, 2013, 135: 9931-9938.
- [6] <http://lekstutis.com/Artie/PEP/>, GUIPEP-Graphical User Interface to PEP, 2011, 08, 01.
- [7] Lee K Y, Storm C B, Hiskey M A, et al. An improved synthesis of 5-amino-3-nitro-1H-1,2,4-triazole (ANTA), a useful intermediate for the preparation of insensitive high explosives[J]. *J Energ Mater*, 1991, 9(5): 415-428.
- [8] Highsmith T K, Hajik R M, Wardle R B, et al. Methods for synthesizing and processing bis-(1(2)H-tetrazol-5-yl)-amine: USP 5 468 866[P], 1995.
- [9] HUANG Hai-feng, ZHOU Zhi-ming, LIANG Li-xuan, et al. Nitrogen-rich energetic monoanionic salts of 3,4-bis(1H-5-tetrazolyl)furoxan[J]. *Chem Asian J*, 2012, 7(4): 707-714.

Analysis of Energy Performance of Oxidation High Nitrogen Heterocycle Hydroxylammonium Salts in the Solid Propellants

CAO Yi-lin¹, LIU Jian-ping²

(1. The 42nd Institute of the Fourth Academy of CASA, Xiangyang 441003, China; 2. The Military Representative of Headquarter of General Staff at Luoyang, Luoyang 471000, China)

Abstract: To evaluate the energy potential of new oxidation high nitrogen heterocycle hydroxylammonium salts as composite solid propellant components, the energy effects after replacing AP in two kinds of composite solid propellant systems AP/Al/HTPB and AP/Al/GAP+NE with dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50), dihydroxylammonium 3,3'-dinitro-bis-(1,2,4-triazole)-1,1'-diolate (DHDNBT) and dihydroxylammonium 5,5'-azo-bis(1-oxidotetrazolate) (DHABT) were calculated by using propellant performance evaluation program (PEP) and was compared with HMX. Results show that in the high solid content AP/Al/HTPB system, the energy characteristics of the formula obtained by partly replacing AP with TKX-50 AND DHABT in a wide formula range are equivalent to those of the formula obtained by replacing AP with HMX. The energy characteristics of the formula obtained by replacing AP with DHDNBT are equivalent to those of the formula obtained by replacing AP with the same content HMX. In AP /Al/GAP+NE system, the energy characteristics of the formula with DHDNBT are the same with those of the formula with HMX, but the energy performances of the formula with TKX-50 and DHABT are better than those of formula with HMX. The highest freezing specific impulse of the formula with TKX-50 and DHABT are $2662.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (TKX-50) and $2696.0 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (DHABT) respectively and $40.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (TKX-50) and $73.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ (DHABT) higher than the highest freezing specific impulse of the formula obtained by replacing AP in the same system with HMX ($2622.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$). Replacing AP in AP/Al/GAP+NE with the assumed dihydroxylammonium bis(oxidotetrazol-5-yl)amine (DHBTA) can make the highest freezing specific impulse achieve $2708.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$, $86.2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ higher than the highest freezing specific impulse obtained by replacing AP in the same system with HMX and in a wide range of adjustment formula has a higher energy characteristics than HMX formula.

Key words: solid propellant; energetic oxidizer; dihydroxylammonium bis(1-oxidotetrazolate); dihydroxylammonium bis(1,2,4-triazole)-1,1'-diolate

CLC number: TJ55; V512

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.10.001