

文章编号: 1006-9941(2008)02-0191-05

HTPB 推进剂组分溶度参数的分子模拟研究

杨月诚, 焦东明, 强洪夫, 王 广

(第二炮兵工程学院 201 教研室, 陕西 西安 710025)

摘要: 采用无定形动力学 (amorphous cell dynamics, ACD) 方法、Synthia 方法和 Blend 方法, 对端羟基聚丁二烯 (HTPB) 粘合剂及其常用的增塑剂、固化剂组分的溶度参数进行了模拟计算, 对组分间的相溶性进行了判断。结果表明: ACD 方法可以定性的模拟组分的溶度参数, Synthia 方法则能够定量模拟组分的溶度参数, Blend 方法可以定性直观展示组份间的相溶性及温度、摩尔含量的影响; 几种方法模拟结论与实验基本吻合。常用的增塑剂满足 HTPB 体系相溶性要求, 固化剂异佛尔酮二异氰酸酯 (IPDI)、氮丙啶三(-2 甲基氮丙啶-1) 氧化磷 (MAPO) 与 HTPB 相溶性好于甲苯二异氰酸酯 (TDI) 及六次甲基二异氰酸酯 (HDI), 相溶性对固化效果有一定影响。计算了几种含能增塑剂与 HTPB 的相溶性, 结果不太理想。

关键词: 物理化学; 端羟基聚丁二烯 (HTPB); 溶度参数; 无定形动力学 (ACD); Blend 方法; Synthia 方法

中图分类号: TJ55; O642; TB324

文献标识码: A

1 引言

为改善推进剂的低温力学性能, 粘合剂端羟基聚丁二烯 (HTPB) 推进剂配方中需要加入功能组分增塑剂, 含量为 HTPB 的 20% ~ 35%^[1]。选取增塑剂的标准之一是其能充分溶解在粘合剂的网络中, 与推进剂的其他组分相溶, 判定相溶性的简便指标是溶度参数。

聚合物的溶度参数只能依靠溶胀法等间接获取或通过基团贡献法推算, 过程复杂并且费时费力。分子模拟作为新兴的计算材料方法克服了上述不足。目前, 溶度参数的模拟计算主要采用分子动力学方法 (MD)^[2-3], 采用 Synthia 方法和 Blend 方法计算推进剂组分溶度并判断相溶性的研究尚未见报道。

无定形态动力学 (amorphous cell dynamics, ACD) 是通过计算分子的汽化热预测聚合物溶度特性的方法; Synthia 方法是 Accelrys 公司通过先进的定量结构性质关系 (QSPR) 快速筛选众多聚合物性质的方法; Blend 方法是 Accelrys 公司开发的计算组分相溶性的模块方法, 它通过 Monte Carlo 模拟后加权分子空间取向排布计算结合能来判断相溶性。本研究通过构建粘

合剂/增塑剂模型, 分别采用 ACD 方法和 Synthia 方法模拟计算了推进剂组分的溶度参数, 以溶度“相近原则”判定相溶性^[4], 并采用 Blend 方法直观验证展示结论; 针对实际配方中的固化剂成分的影响, 考虑多组分相溶, 对照文献, 比较了数值模拟与实验研究的相关性。

2 溶解理论及模拟方法

2.1 溶解过程的热力学理论

从热力学观点看, 两种物质混合时存在有以下热力学关系^[5]:

$$\Delta G_M = \Delta H_M - T\Delta S_M \quad (1)$$

其中

$$\Delta H_M = \Delta E_M + P\Delta V_M \quad (2)$$

式中, ΔG_M 、 ΔH_M 、 ΔE_M 和 ΔS_M 分别为 Gibbs 混合自由能、混合焓、混合能和混合熵。

只有 ΔG_M 为负值时, 溶解过程才能自发进行; 溶解中熵总是增加 ($\Delta S_M > 0$) 的, 而对于 HTPB 这类弱极性或非极性高分子体系的溶解一般是吸热过程 ($\Delta H_M > 0$); 为使 ΔG_M 为负值, ΔH_M 值越小或越趋于零较好。

根据 Flory-Huggins 理论, 忽略溶解过程中体积变化 ($\Delta V_M = 0$), $\Delta H_M \approx \Delta E_M$, 从而得到关系 (3)^[6]:

$$\Delta H_M = \frac{1}{2}Z(E_{BS} + E_{SB} - E_{BB} - E_{SS}) \quad (3)$$

式中, E_{ij} 为分子间的吸附能 (binding energy), Z 为配位数 (coordination numbers)。

Blend 方法通过设定组分的 base 和 screen 角色, 分别计算 base-base (E_{BB})、screen-screen (E_{SS}) 和 base-

收稿日期: 2007-09-04; 修回日期: 2007-10-24

基金项目: 国家重大基础研究发展计划 (973-61338)

作者简介: 杨月诚 (1953 -), 男, 教授, 博导。

焦东明 (1980 -), 在读博士研究生, 从事含能材料的计算与模拟。

e-mail: jdmren@163.com

强洪夫 (1965 -), 男, 博士, 教授, 博士生导师, 国家 973 项目技术首席专家, 从事材料与结构的失效行为与高性能数值模拟研究。

e-mail: qiang@263.net

screen($E_{BS} = E_{SB}$)组分的吸附能。三个值越接近,得到的混合能越趋于零,组分互溶性越好。

根据 Hildebrand 的半经验公式^[6]:

$$\Delta H_M = V_M \phi_1 \phi_2 [\delta_1 - \delta_2]^2 \quad (4)$$

式中, V_M 为溶液总体积, ϕ_1 和 ϕ_2 分别为溶剂和溶质的体积分数。 δ_1 和 δ_2 是溶剂和溶质的溶解度参数。由公式(4)可见, δ_1 和 δ_2 的差越小, ΔH_M 越小, 越有利于溶解(这便是溶解度参数相近原则)。实验表明, 对非晶态高分子材料来说, 若分子间没有强极性基团或氢键基团, 高分子材料与溶剂只要满足 $|\delta_1 - \delta_2| < 1.7 \sim 2.0 \text{ J}^{1/2} \cdot \text{cm}^{-3/2}$, 二者相溶。ACD 方法和 Synthia 方法便是通过计算 δ 值来考察推进剂组分间的相溶性。

2.2 模拟方法

结合 ACD 方法、Blend 方法和 Synthia 方法计算聚合物溶度参数的要求^[7], 本研究采取了如下步骤: (1) 首先使用 ACD 方法中 Materials Visualizer 构建聚合物的空间构型, 采用 Discover 模块中 Smart minimizer 进行几何优化, 而后分别构建聚合物的无定形体 (Amorphous cell), 在 NVT 系综条件下采取 100 PS 的动力学模拟, 动力学运算后采取 Amorphous Cell 模块中 Analysis 来获取溶度参数。力场采用 COMPASS 力场, 能量优化采用最陡下降法 (Steepest descent) 和共轭梯度法 (Conjugate gradient)^[8]; 温度控制用 Andersen 方法, 非键截断 (cutoff) 取 9.5 \AA , 静电及范德华力计算采取 Eward 长程加和方法。(2) Synthia 方法调用定量结构性质关系 (QSPR) 获取聚合物的诸多性质, 特别是使用了源于图论的连接指数来描述分子体系, 通过建立聚合物单体可以快速获取聚合物溶度参数。(3) 综合比较 ACD 方法和 Synthia 方法得到的常用聚合物 (聚乙烯、聚丙烯等) 溶度参数, 对照验证两种方法的可靠性。(4) 构建特征增塑剂及 HTPB 空间构型, 分别采取 ACD 方法和 Synthia 方法获取组分的溶度参数, 对照 Hildebrand 经验公式, 判断组分间的相溶性。(5) 采用 Blend 方法、COMPASS 力场验证结论^[9], 深入研究温度和组分摩尔含量对相溶性的影响。(6) 针对近年来发展的含能增塑剂, 采取以上方法为 HTPB 推进剂含能功能添加组分的选取予以模拟计算。所有计算采用 Accelrys 公司 Material Studio 4.1 程序在第二炮兵工程学院高性能计算平台 IBM Blade 工作站上完成。

3 结果与讨论

3.1 ACD 方法和 Synthia 方法的验证

以聚乙烯、聚丙烯和聚苯乙烯为例 (性质见表

1^[10]), 分别采用两种方法模拟计算常用聚合物的溶度参数。ACD 方法中, 构建 30 链段的聚合物, Synthia 方法中, \bar{M}_n 为 10000。模拟计算的聚合物溶度参数见表 1。

从表 1 可以看出, 对前两种聚合物 ACD 方法模拟的溶度参数基本准确, 对 ps, 它的模拟结果同实验结果相差较大, 这是因为 ACD 方法中模型构建因素影响较大。Synthia 方法模拟的结果较好地吻合实验值, 能定量模拟 HTPB 推进剂组分溶度。因此两种方法可模拟研究组分的溶度参数。

表 1 ACD 方法和 Synthia 方法模拟效果验证

Table 1 Validation of simulation effect for ACD method and Synthia method

species	ρ	$\delta_{\text{exp}}^{[10]}$	δ_{ACD}	δ_{Synthia}
low density polyethylene (pe)	0.91 - 0.925	16.50	16.84 (isotactic)	16.78
homopolymer polypropylene (pp)	0.90 - 0.91	16.80	15.74 (isotactic)	16.05
polystyrene (ps)	1.04 - 1.05	17.80 - 19.70	15.97 (atactic)	19.51

Note: δ_{exp} , δ_{ACD} , δ_{Synthia} is experimental solubility parameter and simulation value from ACD method and Synthia method, respectively, ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-3}$)^{1/2}; ρ is density at 25 °C, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

3.2 ACD 方法和 Synthia 方法的计算

3.2.1 组分模型构建

固体推进剂中粘合剂组分为端羟基聚丁二烯 (HTPB), 采用国产 83-190 型号^[11], 其分子结构见图 1。

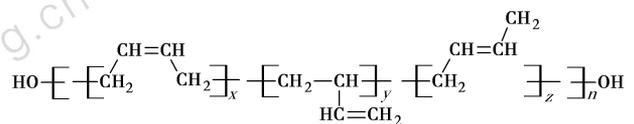


图 1 HTPB 结构式

Fig. 1 Structure formula of HTPB

该型号 HTPB 的 $x : y : z = 24 : 20 : 56$, $\bar{M}_n = 2800$, 物理性质见表 2。采取无规共聚物 (random copolymer) 方式构建的无定形 HTPB 见图 2a。HTPB 可以使用多种固化剂和增塑剂, 增塑剂主要以壬酸异癸酯 (TOA)、癸二酸二辛酯 (DOS)、己二酸二辛酯 (DOA)、邻苯二甲酸二丁酯 (DBP) 和邻苯二甲酸二辛酯 (DOP) 为主; 固化剂主要以甲苯二异氰酸酯 (TDI)、六次甲基二异氰酸酯 (HDI)、异佛尔酮二异氰酸酯 (IPDI) 和氮丙啶三 (-2 甲基氮丙啶-1) 氧化磷 (MAPO) 为主。增塑剂和固化剂分别以 DBP 和 IPDI 为例, 构建的无定形态见图 2b 和 2c。

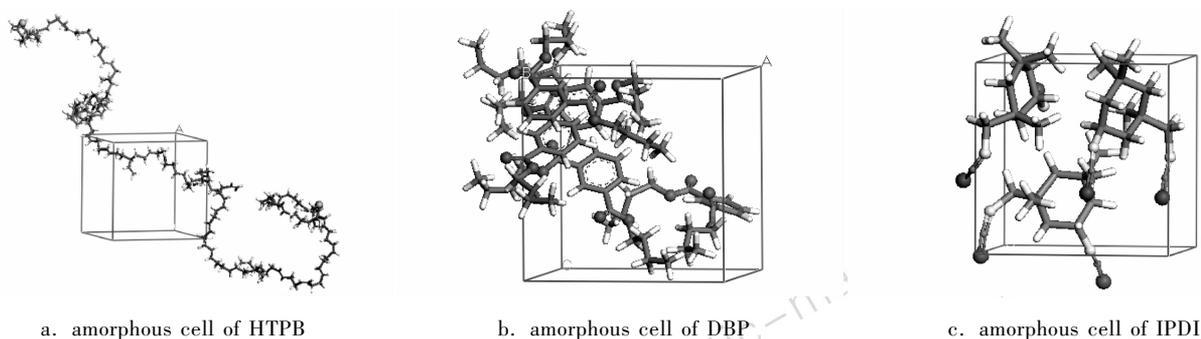


图2 HTPB, DBP 和 IPDI 无定形构型

Fig. 2 Amorphous cell structure of HTPB, DBP and IPDI

(The different shades of grey in this and the following figures correspond to different atoms types with white representing hydrogen, light grey carbon, grey nitrogen(ball) and black oxygen(ball))

3.2.2 ACD 方法和 Synthia 方法模拟计算

推进剂体系组分的物理性质及两种方法模拟计算的结果见表2。从表2可以看出,对DOS、DOA、DBP和DOP溶度的模拟, Synthia方法准确性高,误差小,基本可以定量得到溶度参数; ACD方法虽然只对DBP模拟时比较准确,但是模拟得到的溶度 $DBP > DOP > DOA$ 同实验趋势一致^[12],同时组分溶度计算均在同一场下,故可通过溶度相对值判断组分的相容性。由于 Synthia方法通过构建单体来预测聚合物性质,对非单体构成的大分子只能人为设定聚合单体,增大了误差,所以实际模拟中参照 ACD数据优选 Synthia方法中的单体构建。

表2 推进剂体系组分的物理性质及两种方法模拟计算的结果
Table 2 Physical properties of components in solid propellant and simulation results from ACD, Synthia

type	species	ρ	$\delta_{exp}^{[13]}$	δ_{ACD}	$\delta_{Synthia}$
binding agent	HTPB	0.9084	-	18.13	17.55
	TOA	0.855 - 0.866	-	16.91	16.93
	DOS	0.910 - 0.913	17.60	16.93	17.14
plasticizer	DOA	0.913 - 0.924	17.80	16.32	17.17
	DBP	1.045	19.00	18.85	18.58
	DOP	0.986	18.15	17.14	18.02
	TDI	1.2271	-	20.99	22.30
curing agent	HDI	1.4407	-	20.66	19.76
	IPDI	1.190	-	17.42	18.45
	MAPO	1.08	-	19.22	-

Note: MAPO cannot be calculated in synthia, because it contains "P" which correlation has not been developed. ρ is density at 25 °C, $g \cdot cm^{-3}$.

由于高分子材料与溶剂只要满足 $|\delta_1 - \delta_2| < 1.7 \sim 2.0 J^{1/2} \cdot cm^{-3/2}$ 就互溶。对粘合剂 HTPB 来说,依据 ACD 方法的模拟结果,增塑剂和固化剂的溶解度参数需满足 $16.13 \sim 16.43 < \delta < 19.83 \sim 20.13$ 。从表2来看,所列增塑剂和固化剂除 TDI 和 HDI 外均可以

与 HTPB 很好互溶。同样,依据 Synthia 方法的结果, TDI 和 HDI 与 HTPB 不能互溶,增塑剂全与 HTPB 互溶,两种方法结论相同。

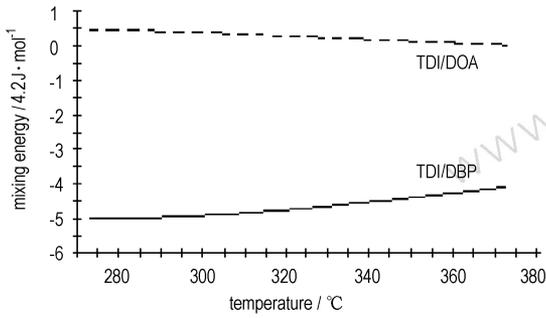
虽然模拟结果显示固化剂 TDI 和 HDI 与粘合剂 HTPB 的互溶性不太好,但由于其对粘合剂的交联固化效果较好,因此在实际配方应用中较广泛。故而固化剂的选择侧重于交联固化的效果,而非可溶性。然而在配方情况完全相同的情况下, IPDI 配方的力学性能,尤其是常温和高温性能明显优于 TDI^[14],机理目前不太清楚,是不是因为 IPDI 在 HTPB 的相容性更好,对 HTPB 的固化更加充分,需要下一步来验证。

3.3 Blend 方法的计算

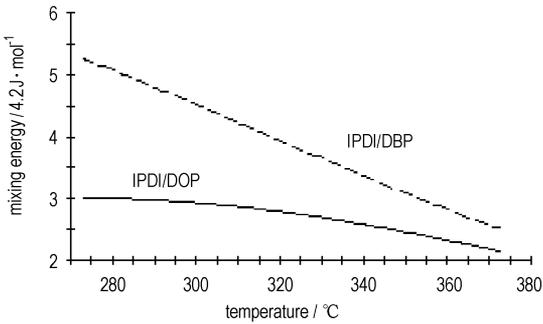
Blend 方法^[15]可以作为 ACD 和 Synthia 方法的补充给出定性直观的验证。针对实际配方中常用的 HTPB (18.13)/TDI(20.99)体系, ACD 方法判定 DBP (18.85) 作为增塑剂相容性好于 DOA (16.33); 而对常用的 HTPB (18.13)/IPDI (17.42) 推进剂组分来说, DOP (17.14) 作为增塑剂同该体系的相容性好于 DBP (18.85) 的情况; 本研究分别构建了 TDI (base)/DBP (screen)、TDI (base)/DOA (screen)、IPDI (base)/DOP (screen) 和 IPDI (base)/DBP (screen) 四体系,通过比较混合能验证 ACD 方法的结果,计算出的混合能随温度的变化关系见图3。

从图3a 可以看出, 298 K 温度下, TDI/DOA 的混合能为 $1.59 J \cdot mol^{-1}$, TDI/DBP 的混合能为 $-20.61 J \cdot mol^{-1}$, 由于混合能越低相容性越好, 故 Blend 方法判定, 对于 TDI 体系 DBP 相容性好于 DOA。同时 TDI/DBP 混合能为负值, 可以判断两者具有天然的可混性, 同 ACD 方法所得结果吻合。从图3b 知道, 298 K 温度下 IPDI/DOP 体系混合能为 $12.29 J \cdot mol^{-1}$,

IPDI/DBP 混合能为 $19.10 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$, 可以判定 DOP 同该体系相溶性好于 DBP, 吻合 ACD 方法所得结果。从多组模拟中还发现, Blend 方法对于溶度参数相差比较大的组分混合时, 结果较准确, 溶度参数比较接近时结果重现性较差。相图(phase diagram)给出混合体系稳定性随温度及摩尔含量变化的趋势, 以常用的固化剂/增塑剂(IPDI/DOP)体系为例相图如图4。



a. TDI system



b. IPDI system

图3 TDI体系和IPDI体系混合能随温度变化图

Fig.3 Mixing energy of TDI system and IPDI system with temperature change

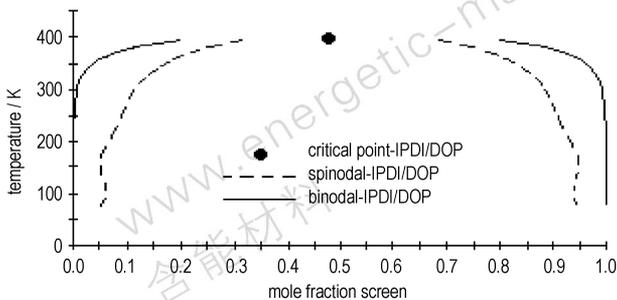


图4 IPDI/DOP体系相图

Fig.4 Phase diagrams of IPDI/DOP system

从图4可以看出, IPDI/DOP体系的临界点(critical point)发生在400 K, DOP的摩尔含量为0.5时, 临界点预示着共混区开始, 此时IPDI和DOP通过

相分离来降低混合自由能, 双节线(binodal line)同旋节线(spinodal line)之间区域, IPDI/DOP以亚稳态存在; 两旋节线间区域, IPDI/DOP极不稳定, 任何振动都会导致两组分分层。

3.4 含能增塑剂溶度计算

综合ACD方法和Synthia方法, 对近年发展的单组元含能增塑剂1,2,4-丁三醇三硝酸酯(BTTN)、双(2,2-硝基丙基)缩乙醛(BDNPA)、2,2-二硝基-1,3-二丙醇缩二甲醛(ADDF)和双(氟-二硝基乙基)缩二氟甲醛(FEFO)溶度进行模拟计算, 溶度模拟结果见表3。

表3 含能增塑剂的溶度模拟数值

Table 3 Simulated values of solubility parameter of energetic plasticizer

energetic plasticizer	density / $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, 25 °C	$\delta_{\text{exp}}^{[16]}$	δ_{ACD}	δ_{Synthia}
BTTN	1.53	23.41	26.68	23.03
BDNPA	1.38	-	21.72	20.69
ADDF	1.47	-	24.12	24.18
FEFO	1.67	-	22.21	21.58

从表3可以看出, 单组元的含能增塑剂溶度参数模拟值普遍较高, 在粘合剂HTPB(18.13)中的应用比较受限; 硝酸酯增塑剂BTTN同HTPB不互溶, 模拟结果同实验情况一致。

4 结论

(1) 通过构建分子模型, 无定形动力学(ACD)方法和Synthia方法可以用来模拟计算推进剂组分的溶度参数考察组分间的相溶性。Synthia方法可以定量的模拟组分溶度参数, 模拟数值同实验值相吻合; ACD方法基本可以定性判断组分溶度趋势及组分间相溶性, 同时可以作为Synthia方法中单体构建方式的参照; Blend方法则可以直观的展示组分间的相溶性及随温度和摩尔含量变化的趋势, 该方法针对溶度参数相差较大组分混合时的模拟较准确, 溶度参数比较接近时结果重现性较差。几种模拟方法对推进剂组分间相溶性判断结论基本吻合。

(2) 通过模拟发现, 常用的增塑剂都能够从相溶性方面满足HTPB推进剂的要求, 固化剂异佛尔酮二异氰酸酯(IPDI)、氮丙啶三(-2-甲基氮丙啶-1)氧化磷(MAPO)与HTPB相溶性好于甲苯二异氰酸酯(TDI)及六次甲基二异氰酸酯(HDI), 固化剂的选择虽更侧重于固化性能, 但同粘合剂的互溶性也可能很大程度的影响固化效果。针对几种含能增塑剂的模拟发现同

HTPB 的相溶性不太理想。

参考文献:

- [1] 张景春. 固体推进剂化学及工艺学[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1987.
ZHANG Jing-chun. Chemistry and Technics of Solid Propellant[M]. Changsha: National University of Defense Technology Press, 1987.
- [2] 李倩, 姚维尚, 谭惠民. 叠氮粘合剂与硝酸酯溶度参数的分子动力学模拟[J]. 含能材料, 2007, 15(4): 370 - 373.
LI Qian, YAO Wei-shang, TAN Hui-min. Molecular dynamics simulation of solubility parameter of azide binders and nitrate ester[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2007, 15(4): 370 - 373.
- [3] 夏庆, 殷开梁. 分子动力学模拟计算有机溶剂的溶解度参数[J]. 江苏工业学院学报, 2004, 16(1): 40 - 42.
XIA Qing, YIN Kai-liang. Calculation of solubility parameters of organic solvents by molecular dynamics simulation[J]. Journal of Jiangsu Polytechnic University, 2004, 16(1): 40 - 42.
- [4] 游长江, 石长华. 溶解度参数预测共混物的相容性[J]. 高分子材料科学与工程, 2001, 17(1): 162 - 165.
YOU Chang-jiang, SHI Chang-hua. Predict miscibility of polymer blends by the solubility parameter[J]. Polymer Materials Science and Engineering, 2001, 17(1): 162 - 165.
- [5] 柯杨船, 何平笙. 高分子物理教程[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006.
KE Yang-chuan, HE Ping-sheng. Macromolecule Physical Tutorial[M]. Beijing: Chemistry Industry Press, 2006.
- [6] Material Studio Simulation Tool Reference Manuals[M]. Molecular simulation for material science, Molecular simulation incorporated; San Diego, USA; 2006.
- [7] 张朝阳, 舒远杰, 赵小东, 等. 用 Polymorph Predictor 方法模拟晶体的结构[J]. 含能材料, 2004, 12(1): 48 - 51.
ZHANG Chao-yang, SHU Yuan-jie, ZHAO Xiao-dong, et al. Prediction of the crystal structure of TATB by polymorph Predictor method[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2004, 12(1): 48 - 51.
- [8] Sheetal S Jawalkar, Tejraj M Aminbhavi. Molecular modeling simulations and thermodynamic approaches to investigate compatibility/incompatibility of poly(L-lactide) and poly(vinyl alcohol) blends[J]. Polymer, 2006, 47: 8061 - 8071.
- [9] Luis Vicente, Cesar Soto, Horacio Pacheco-sanchez, et al. Application of molecular simulation to calculate miscibility of a model asphaltene molecule[J]. Fluid Phase Equilibria, 2006, 239: 100 - 106.
- [10] 吴其晔, 冯莺. 高分子材料概论[M]. 北京: 机械工业出版社, 2004.
WU Qi-ye, FENG Ying. Review of Polymer Materials[M]. Beijing: China Machine Press, 2004.
- [11] 候林法. 复合固体推进剂[M]. 北京: 中国宇航出版社, 1994.
HOU Lin-fa. Composite Solid Propellant[M]. Beijing: China Astronautics Press, 1994.
- [12] 李葆萱. 固体推进剂性能[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 1990.
LI Bao-xuan. Properties of Solid Propellant[M]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 1990.
- [13] 李华昌, 符斌. 实用化学手册[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006.
- [14] 刘建平. 国外固体推进剂技术现状和发展趋势[J]. 固体火箭技术, 2000, 23(1): 22 - 26.
LIU Jian-ping. Current situation and trend of solid propellant technology abroad[J]. Journal of Solid Rocket Technology, 2000, 23(1): 22 - 26.
- [15] Tarek M Madkour. A combined statistical mechanics and molecular dynamics and molecular dynamics approach for the evaluation of the miscibility of polymers in good, poor and non-solvents[J]. Chemical Physics, 2001, 274: 187 - 198.
- [16] 孙亚斌, 周集义. 含能增塑剂研究进展[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2004, 1(5): 20 - 25.
SUN Ya-bin, ZHOU Ji-yi. Advance in research of energetic plasticizer[J]. Chemical Propellant & Polymer Materials, 2004, 1(5): 20 - 25.

Molecular Simulation of Solubility Parameter for HTPB Solid Propellants

YANG Yue-cheng, JIAO Dong-ming, QIANG Hong-fu, WANG Guang

(No. 201 Staff Room, Xi'an Hi-Tech Institute, Xi'an 710025, China)

Abstract: Solubility parameters of bonding agent hydroxy terminated polybutadiene (HTPB), conventional plasticizers and curing agent in solid propellant were calculated respectively by amorphous cell dynamics (ACD), Synthia and Blend methods to predict the miscibility of these components. Results show that: Synthia method quantitatively simulates solubility parameters while ACD method qualitatively simulates solubility parameter, and Blend method exhibits the miscibility of components directly and the effects of extrinsic factors such as temperature and mole fraction. Simulation results are agreement with experimental results. The conventional plasticizers usually meets the miscible request of HTPB. The miscibility of isophorone diisocyanate (IPDI) or trimethylaziridinyl phosphine oxide (MAPO) with HTPB is better than that of toluene diisocyanate (TDI) and hexamethylene diisocyanate (HDI). The selection of curing agent emphasizes on curing effect, not miscible request but which may affect curing effect. The miscibility of energetic plasticizer with HTPB is not well.

Key words: physical chemistry; hydroxy terminated polybutadiene propellant (HTPB); solubility parameter; amorphous cell dynamics (ACD); Blend method; Synthia method