

文章编号: 1006-9941(2014)03-0286-05

## 含 5,5'-联四唑-1,1'-二氧二羟铵推进剂的能量特性计算

李猛, 赵凤起, 罗阳, 徐司雨, 姚二岗

(西安近代化学研究所燃烧与爆炸技术重点实验室, 陕西 西安 710065)

**摘要:** 利用国军标方法 GJB/Z84-1996 及 CAD 系统软件, 在标准条件 ( $p_c/p_0=70:1$ ) 下计算了含 5,5'-联四唑-1,1'-二氧二羟铵 (TKX-50) 的复合改性双基 (CMDB) 推进剂、端羟基聚丁二烯 (HTPB) 推进剂、硝酸酯增塑聚醚 (NEPE) 推进剂及聚叠氮缩水甘油醚 (GAP) 推进剂的能量特性。结果表明, TKX-50 单元推进剂的理论比冲为  $2623.7 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ , 比 RDX 单元推进剂的理论比冲高  $6.5 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。TKX-50 是 CMDB 推进剂中 RDX 的较好替代物。当 TKX-50 取代 HTPB 推进剂中的 AP 和 GAP 推进剂中的 HMX 和 AP 时, TKX-50 基 HTPB 推进剂和 TKX-50 基 GAP 推进剂的理论比冲均存在能量的最优值。当 TKX-50 取代 NEPE 推进剂中的 AP 和 HMX 时, TKX-50 基 NEPE 推进剂的理论比冲先增后降再增, 最大增加  $20.4 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

**关键词:** 物理化学; 5,5'-联四唑-1,1'-二氧二羟铵 (TKX-50); 固体推进剂; 能量特性; 数值计算

**中图分类号:** TJ55; V512; O64

**文献标志码:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.03.003

## 1 引言

5,5'-联四唑-1,1'-二氧二羟铵 (TKX-50) 是继环三亚甲基三硝胺 (RDX)、环四亚甲基四硝胺 (HMX)、六硝基六氮杂异戊兹烷 (CL-20)、八硝基立方烷 (ONC) 之后的又一笼形高性能含能材料, 其具有环境友好、生成热数值大、含氮量高、机械感度低等优点<sup>[1-6]</sup>。伴随着 TKX-50 这一新型含能材料的问世, 国外研究者相继对比分析了其与 CL-20、RDX 等高能添加剂的能量特性<sup>[4-6]</sup>, 而我国却没有相关文献报道。为深入了解 TKX-50 的能量特性, 拓展其在火炸药配方中的应用, 采用国军标方法 GJB/Z84-1996 及 CAD 系统软件, 在标准条件 ( $p_c/p_0=70:1$ ) 下, 以 TKX-50 逐步取代实际推进剂配方中的 RDX、AP、HMX 时, 研究了复合改性双基推进剂 (CMDB)、丁羟推进剂 (HTPB)、硝酸酯增塑聚醚推进剂 (NEPE) 及聚叠氮缩水甘油醚推进剂 (GAP) 能量特性变化规律。

## 2 TKX-50 与其他高能添加剂的能量特性

与 RDX、HMX、CL-20 及 ONC 相比<sup>[4-14]</sup>, TKX-50

保持或提高了含能材料的性能, 并且消除了诸多缺陷: 对有机体的毒性低于 RDX、HMX、CL-20, 合成难度和价格低于 HMX、CL-20、ONC, 机械感度低于 RDX、HMX、CL-20 和 ONC, 且不会像 CL-20 一样发生转晶。TKX-50 热分解峰值温度为  $221 \text{ }^\circ\text{C}$ , 高于 RDX、CL-20 的热分解峰值温度。表 1 列出了 TKX-50 与其他高能添加剂的物理化学性能<sup>[4-14]</sup>, 表 2 为 TKX-50 与其他高能添加剂单元推进剂的能量性能。 $I_{sp}$  表示标准理论比冲,  $T_c$  为推进剂燃烧温度,  $C^*$  为特征速度,  $M_c$  为燃气平均相对分子质量,  $O/F$  表示体系的氧系数, 定义为配方体系中氧化性元素量与可燃元素完全氧化所需氧化元素量之比。

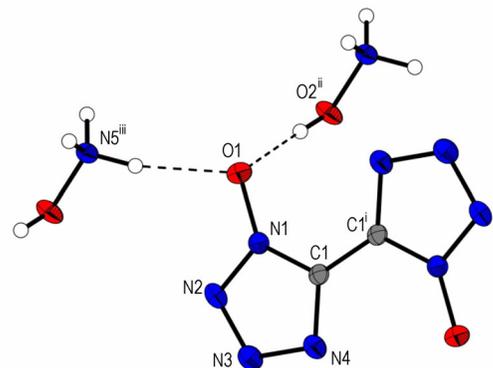


图 1 TKX-50 的分子结构<sup>[4]</sup>

Fig. 1 Molecular structure of TKX-50<sup>[4]</sup>

收稿日期: 2013-07-03; 修回日期: 2013-11-08

基金项目: 国家自然科学基金(21173163); 燃烧与爆炸技术重点实验室基金资助(62202060103)

作者简介: 李猛(1979-), 男, 硕士, 助理研究员, 主要从事固体推进剂性能计算研究。e-mail: dahai99-2005@163.com

表 1 TKX-50 与其他高能添加剂的物化性能<sup>[4-14]</sup>

Table 1 Physicochemical properties of TKX-50 and other energetic additives

oxidizer	condensed formula	relative molecular mass /g · mol <sup>-1</sup>	oxygen balance /%	heat of formation /kJ · mol <sup>-1</sup>	nitrogen content /%	density /g · cm <sup>-3</sup>
TKX-50	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	236.15	-27.10	446.6	59.30	1.877
RDX	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>	222.12	-21.61	70.7	37.84	1.818
HMX	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>8</sub>	296.16	-21.61	75.02	37.83	1.905
CL-20	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>12</sub> O <sub>12</sub>	438.2	-3.65	416.0	38.36	2.040
AP	NH <sub>4</sub> ClO <sub>4</sub>	117.49	34.04	-290.45	11.04	1.950
ONC	C <sub>8</sub> N <sub>8</sub> O <sub>16</sub>	464	0	339.13	24.20	2.100

表 2 TKX-50 与其他高能添加剂的能量特性

Table 2 Energy characteristics of TKX-50 and other energetic additives

oxidizer		TKX-50	RDX	HMX	CL-20	AP	ONC
<i>O/F</i>		0.500	0.667	0.667	0.800	2.250	1.000
energy characteristic parameter	<i>I<sub>sp</sub></i> / N · s · kg <sup>-1</sup>	2623.7	2617.2	2604.1	2673.6	1556.0	2577.7
	<i>C*</i> / m · s <sup>-1</sup>	1674.9	1648.7	1641.4	1638.4	990.9	1560.5
	<i>T<sub>c</sub></i> / K	3072	3292	3271	3589	1434	3804
	<i>M<sub>c</sub></i>	21.32	24.25	24.28	27.37	27.90	32.10
mass fraction of main combustion products	H <sub>2</sub>	0.02	0.01	0.01	/	/	/
	N <sub>2</sub>	0.59	0.38	0.38	0.37	0.12	0.22
	Cl <sub>2</sub>	/	/	/	/	0.05	/
	O <sub>2</sub>	/	/	/	0.02	0.33	0.11
	HCl	/	/	/	/	0.26	/
	H <sub>2</sub> O	0.13	0.17	0.17	0.09	0.24	/
	CO	0.21	0.29	0.28	0.24	/	0.26
CO <sub>2</sub>	0.04	0.15	0.15	0.22	/	0.35	

高能添加剂对推进剂能量的贡献主要取决于分子的密度、氧含量、生成热数值及燃气生成量。由表 1 知,TKX-50 的密度比 RDX 的密度大,生成热数值最高,但是氧平衡最小,氮含量最大。由表 2 可知,CL-20 单元推进剂的标准理论比冲最高,其次为 TKX-50、RDX、HMX,ONC 和 AP 单元推进剂标准理论比冲最低,低于 2600 N · s · kg<sup>-1</sup>。TKX-50 单元推进剂的标准理论比冲小于 CL-20 的主要原因是由于 TKX-50 比 CL-20 的氧平衡小得多,而生成热数值相差不大;TKX-50 单元推进剂的标准理论比冲大于 RDX,主要是由于氧平衡相差不大,而生成热数值比 RDX 大得多;AP 的氧平衡最大,但单元推进剂的标准理论比冲最小,主要是由于其燃气中含有 HCl 和 Cl<sub>2</sub>,使得燃气平均相对分子质量大大增加,加上 AP 相对高的负生成热,使得 AP 单元推进剂标准理论比冲最小。

### 3 含 TKX-50 推进剂的能量特性

#### 3.1 含 TKX-50 的 CMDB 推进剂

采用 TKX-50 逐步取代实际 CMDB 推进剂配方中

的 RDX,考察 CMDB 推进剂的能量变化规律,结果见表 3。实际 CMDB 推进剂配方(质量分数):硝化棉(NC)25%,硝化甘油(NG)33%,RDX 27.7%,AI 5%,其他助剂(包括吉纳(DINA)、二号中定剂(C<sub>2</sub>)和凡士林(V)等)9.3%。

表 3 含 TKX-50 的 CMDB 推进剂的能量特性

Table 3 Energy characteristics of TKX-50-based CMDB propellant

RDX /%	TKX-50 /%	<i>I<sub>sp</sub></i> /N · s · kg <sup>-1</sup>	<i>C*</i> /m · s <sup>-1</sup>	<i>T<sub>c</sub></i> /K	<i>M<sub>c</sub></i>	<i>ρ</i> /g · cm <sup>-3</sup>
27.7	0	2517.2	1572.5	3185	25.72	1.694
24.7	3	2517.9	1573.5	3177	25.61	1.695
21.7	6	2518.6	1574.5	3169	25.49	1.697
18.7	9	2519.3	1575.4	3162	25.38	1.698
15.7	12	2519.9	1576.4	3154	25.27	1.700
12.7	15	2520.6	1577.3	3146	25.16	1.701
9.7	18	2521.2	1578.2	3139	25.05	1.703
6.7	21	2521.8	1579.1	3131	24.94	1.704
3.7	24	2522.4	1580.0	3123	24.83	1.706
0	27.7	2523.1	1581.1	3113	24.70	1.707

由表 3 可知,随着 TKX-50 含量的增加,RDX 含量

的减少,体系的标准理论比冲、特征速度都呈微弱增加趋势,燃烧温度和燃气平均相对分子质量分别呈降低和减小趋势,说明采用 TKX-50 取代 CMDB 推进剂中的 RDX,保持了体系的能量水平。分析其原因可知,TKX-50 的氧平衡与 RDX 相差不大,而生成热比 RDX 大得多,综合考虑氧平衡和生成热,标准理论比冲呈增加趋势;TKX-50 与 RDX 都为 C、H、O、N 元素组成的化合物,由于 TKX-50 氧含量小,氮含量大,氧元素摩尔质量大,使得燃烧产物摩尔数小,因此使得燃烧产物燃气平均相对分子质量变小;TKX-50 的密度比 RDX 的大,使得体系的密度增加。因此,对 CMDB 推进剂而言,TKX-50 是 RDX 很好的替代物。

### 3.2 含 TKX-50 的丁羟推进剂

采用 TKX-50 逐步取代 HTPB 推进剂配方中的 AP,考察丁羟推进剂的能量变化规律,结果见表 4。实际 HTPB 推进剂配方(质量分数):HTPB 10%,AP 71%,Al 16%,其他助剂 3%。

表 4 含 TKX-50 的 HTPB 推进剂的能量特性

Table 4 Energy characteristics of TKX-50-based HTPB propellant

AP /%	TKX-50 /%	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$M_c$	$\rho$ / $g \cdot cm^{-3}$
71	0	2597.1	1587.0	3471	28.35	1.778
66	5	2608.4	1596.1	3428	27.61	1.775
61	10	2617.7	1603.9	3381	26.91	1.772
56	15	2624.9	1610.3	3328	26.22	1.769
51	20	2629.9	1614.7	3267	25.56	1.766
48	23	2631.3	1615.5	3224	25.17	1.764
47	24	2631.4	1615.2	3208	25.03	1.763
46	25	2631.0	1614.6	3191	24.91	1.763
45	26	2630.0	1613.5	3173	24.78	1.762
41	30	2607.4	1603.8	3086	24.25	1.760
36	35	2574.2	1578.1	2941	23.59	1.757
31	40	2551.9	1544.3	2766	23.01	1.754
26	45	2542.1	1544.4	2684	22.81	1.751
11	60	2517.8	1527.2	2627	22.52	1.741
6	65	2510.2	1517.7	2613	22.52	1.738
0	71	2507.8	1527.4	2621	22.88	1.735

由表 4 可知,当 TKX-50 含量小于 24% 时,体系的标准理论比冲和特征速度呈线性增加趋势,燃烧温度和燃气平均相对分子质量分别呈降低和减小趋势。当 TKX-50 含量为 24% 时,标准理论比冲值出现拐点,相对基础配方标准理论比冲值增加  $34.3 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ,近似 3.5 s,增加趋势明显。当 TKX-50 含量大于 24% 时,标准理论比冲和特征速度都呈减小趋势,燃烧温度和燃气平均相对分子质量也呈减小趋势。分析其原因

可知,虽然 TKX-50 的高生成热使得标准理论比冲增加,但其负的氧平衡使其增加趋势受到影响,随着 TKX-50 含量的进一步增加,配方体系氧平衡降低很多,所以标准理论比冲出现拐点;AP 会使燃气中 HCl 和  $Cl_2$  含量增加,使得燃气平均相对分子质量大大增加,因此随着 TKX-50 取代 AP 含量增加,体系的燃气平均相对分子质量大大减小;体系的密度呈减小趋势,主要是由于 TKX-50 比 AP 的密度小。因此,HTPB 推进剂中采用 TKX-50 取代 AP 存在能量的最优值。

### 3.3 含 TKX-50 的 GAP 推进剂

采用 TKX-50 逐步取代 GAP 推进剂配方中的 HMX,接着取代 AP,考察 GAP 推进剂的能量变化规律,结果见表 5。实际 GAP 推进剂配方(质量分数):GAP 7.6%、AP 17.2%、HMX 40%、Al 18%,其他(硝化甘油(NG)、1,2,4-丁三醇三硝酸酯(BTTN)) 17.2%。

表 5 含 TKX-50 的 GAP 推进剂的能量特性

Table 5 Energy characteristics of TKX-50-based GAP propellant

AP /%	HMX /%	TKX-50 /%	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$M_c$	$\rho$ / $g \cdot cm^{-3}$
17.2	40	0	2680.6	1634.9	3790	29.32	1.870
17.2	35	5	2685.9	1638.8	3778	29.08	1.869
17.2	30	10	2691.0	1642.6	3765	28.84	1.868
17.2	25	15	2696.0	1646.2	3752	28.60	1.867
17.2	20	20	2700.9	1649.8	3739	28.37	1.865
17.2	15	25	2705.8	1653.2	3724	28.14	1.864
17.2	10	30	2710.5	1656.4	3710	27.91	1.863
17.2	5	35	2715.2	1659.5	3695	27.69	1.862
17.2	0	40	2719.7	1662.4	3679	27.47	1.860
13.2	0	44	2724.5	1665.4	3618	26.88	1.858
9.2	0	48	2715.7	1662.1	3536	26.30	1.855
5.2	0	52	2686.6	1646.0	3415	25.69	1.852
0	0	57.2	2659.2	1602.8	3186	24.88	1.848

由表 5 可知,AP 含量保持不变,随着 TKX-50 含量的增加,HMX 含量的减少,体系的标准理论比冲和特征速度呈线性增加趋势,燃烧温度呈降低趋势,燃气平均相对分子质量及密度都呈减小趋势。随着 TKX-50 进一步取代配方中的 AP,当 TKX-50 含量达到 44% 时,标准理论比冲值出现拐点,最大增加  $43.9 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ,近似 4.48 s,推进剂密度仍呈减小趋势。分析其原因可知,由于 TKX-50 的氧平衡与 HMX 相差不大,而生成热数值却比 HMX 大的多,因此标准理论比冲增加。但随着进一步取代 AP,虽然 TKX-50 比 AP 的生成热数值高的多,但是 TKX-50 负的氧平衡使增加趋势大

大降低,因此随着 TKX-50 含量的进一步增加,标准理论比冲减小;TKX-50 与 HMX 都为 C、H、O、N 元素组成的化合物,由于 TKX-50 氧含量小,氮含量大,氧元素摩尔质量大,使得燃烧产物摩尔数小,因此使得燃烧产物燃气平均相对分子质量变小,随着进一步取代 AP,燃气平均相对分子质量大幅度下降;由于标准理论比冲与燃烧温度成正比、与燃气平均分子质量成反比,在 TKX-50 逐步增加过程中,燃烧温度与燃气平均相对分子质量比值增加,综合来说使得体系标准理论比冲增加;TKX-50 的密度比 HMX 和 AP 的都小,因此体系的密度始终呈现减小趋势。可以得知,GAP 推进剂中采用 TKX-50 取代 HMX 和 AP 存在能量的最优值。

### 3.4 含 TKX-50 的 NEPE 推进剂

采用 TKX-50 逐步取代 NEPE 推进剂配方中的 AP,接着取代 HMX,考察 NEPE 推进剂的能量变化规律,结果见表 6。实际 NEPE 推进剂配方(质量分数):乙二醇(PEG)为 7%,AP 42%,HMX 28%,Al 5%,其他(NG 和 BTTN)18%。

表 6 含 TKX-50 的 NEPE 推进剂的能量特性

Table 6 Energy characteristics of TKX-50-based NEPE propellant

AP /%	HMX /%	TKX-50 /%	$I_{sp}$ / $N \cdot s \cdot kg^{-1}$	$C^*$ / $m \cdot s^{-1}$	$T_c$ /K	$M_c$	$\rho$ / $g \cdot cm^{-3}$
42	28	0	2585.0	1581.4	3363	27.70	1.788
37	28	5	2594.5	1594.9	3361	27.11	1.785
32	28	10	2600.6	1605.8	3348	26.51	1.782
27	28	15	2604.1	1614.4	3325	25.91	1.778
22	28	20	2605.4	1621.0	3294	25.32	1.775
17	28	25	2605.0	1625.7	3256	24.74	1.772
12	28	30	2603.0	1629.0	3212	24.17	1.769
7	28	35	2599.6	1631.0	3163	23.62	1.766
0	28	42	2592.7	1631.9	3090	22.87	1.762
0	24	46	2593.8	1633.3	3081	22.75	1.761
0	20	50	2595.0	1634.6	3072	22.63	1.760
0	16	54	2596.1	1636.0	3064	22.51	1.759
0	12	58	2597.2	1637.3	3055	22.39	1.758
0	8	62	2598.2	1638.6	3046	22.27	1.757
0	4	66	2599.3	1639.9	3037	22.16	1.756
0	0	70	2600.3	1641.2	3028	22.04	1.755

由表 6 可知,配方体系的标准理论比冲先增后降再增加,特征速度呈线性增加趋势,燃烧温度和燃气平均相对分子质量分别呈降低和减小趋势。当 TKX-50 取代 AP 含量达到 20% 时,体系的标准理论比冲达到最大值,增加  $20.4 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ,近似 2.1 s,随着 TKX-50 含量的进一步增加,直到体系中 AP 含量为零时,标准理论比冲值最小。随着 TKX-50 进一步取代

HMX,体系的标准理论比冲又开始增大,直到 TKX-50 完全取代 HMX,但其增大值小于 TKX-50 含量为 20%、HMX 为 28%、AP 为 22% 的配方,说明 TKX-50 添加到 NEPE 中,体系存在能量特性最优值。分析其原因可知,TKX-50 取代 NEPE 推进剂中的 AP,TKX-50 的高生成热使标准理论比冲增加,但其负的氧平衡使其增加趋势受到限制,随着 TKX-50 含量的进一步增加,配方体系氧平衡降低很多,所以标准理论比冲出现拐点;TKX-50 的氧平衡与 HMX 相差不大,而生成热数值却比 HMX 大的多,因此使得标准理论比冲出现增加趋势。

## 4 结 论

(1) TKX-50 是一种高性能添加剂,与其他含能添加剂相比,生成热数值大,且含氮量高。其单元推进剂的标准理论比冲为  $2623.7 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ,比 RDX 单元推进剂的理论比冲高  $6.5 N \cdot s \cdot kg^{-1}$ ;特征速度为  $1674.9 m \cdot s^{-1}$ ,高于其他含能添加剂;燃气平均相对分子质量(21.32)比其他含能添加剂都小。

(2) TKX-50 是 CMDDB 推进剂中 RDX 很好的替代物,TKX-50 取代 HTPB 推进剂中的 AP、GAP 推进剂中的 HMX 和 AP、NEPE 推进剂中的 AP 和 HMX,相应体系均存在标准理论比冲的最大值;TKX-50 逐步添加到 4 种推进剂中,燃烧温度和燃气平均相对分子质量分别呈降低和减小趋势;TKX-50 使 CMDDB 推进剂密度增加,使 HTPB 推进剂、NEPE 推进剂及 GAP 推进剂密度减小。

### 参考文献:

- [1] National Research Council. Technology for the united states navy and marine corps. 2000-2035, Becoming a 21<sup>st</sup>-Century Force [R]. Weapons, National Academy Press, 1997, 5.
- [2] Guery J F, Chang I S, Shimada T, et al. Solid propulsion for space applications: An updated road map[J]. *Acta Astronautica*, 2010, 66: 201-219.
- [3] Ordzhonikidze O, Pivkina A, Frolov Y, et al. Comparative study of HMX and CL-20[J]. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2011, 105(2): 529-534.
- [4] Fischer N, Fischer D, Klapotke T M, et al. Pushing the limits of energetic materials-the synthesis and characterization of dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate[J]. *Journal of Materials Chemistry*, 2012, 22: 20418-20422.
- [5] Burke L A, Fazen P J. Correlation analysis of the interconversion and nitrogen loss reactions of aryl pentazenes and pentazoles derived from aryl diazonium and azide ions[J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2009, 109(15): 3613-3618.

- [6] Boneberg F, Kirchner A, Klapotke T M, et al. A study of cyano-tetrazole oxides and derivatives thereof[J]. *Chemistry*, 2013, 8(1): 148–159.
- [7] Fischer N, Klapotke T M. A selection of alkali and alkaline earth metal salt of 5,5'-bis(1-hydroxytetrazole) in protechnic compositions[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2013, 38(3): 448–459.
- [8] Gobel G, Karaghiosoff K, Klapotke T M. Nitrotetrazolate-2-*N*-oxides and the strategy of *N*-oxide introduction[J]. *Journal of American Chemical Society*, 2010, 132: 17216–17226.
- [9] Klapotke T M, Piercey D G. 1-1'-Azobis(tetrazole): a highly energetic nitrogen-rich compound with a N10 chain[J]. *Inorganic Chemistry*, 2011, 50(7): 2732–2734.
- [10] Gordon S, McBride B J. Computer program for calculation chemical equilibrium compositions and applications: I Analysis [R]. NASA RP-1311, 1994.
- [11] McBride B J, Gordon S. Computer program for calculation of chemical equilibrium compositions and applications: II Users manual and program description[R]. NASA RP-1311, 1996.
- [12] Thorn L B, Wharton W W. Terminology and assessment methods of solid propellant rocket exhaust signature [R]. AGARD-AR-287, 1993.
- [13] 田德余, 赵凤起, 刘剑洪. 含能材料及相关物手册[M]. 北京: 国防工业出版社, 2011.  
TIAN De-yu, ZHAO Feng-qi, LIU Jian-hong. Handbook of energetic materials and the related compounds[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2011.
- [14] 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 calculation of a new generation of high energy solid propellant[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2008, 16(1): 94–99.

## Energetic Characteristics Computation of Propellants Containing Dihydroxylammonium 5,5'-Bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50)

LI Meng, ZHAO Feng-qi, LUO Yang, XU Si-yu, YAO Er-gang

(Science and Technology on Combustion and Explosion Laboratory, Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

**Abstract:** Energy characteristics of the composite modified double-base (CMDB) propellant, hydroxy terminated polybutadiene (HTPB) propellant, nitrate ester plasticized polyether (NEPE) propellant and glycidyl azide polymer (GAP) propellant containing dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50) were calculated by CAD system software according to military standard GJB/Z84–1996 under the standard condition ( $p_c/p_0 = 70 : 1$ ). Results show that theoretical specific impulse of the TKX-50 monopropellant is 2623.7 N·s·kg<sup>-1</sup> and 6.5 N·s·kg<sup>-1</sup> higher than that of the RDX monopropellant. TKX-50 is a better replacement of RDX in CMDB propellant. When the substitution of TKX-50 for AP in HTPB propellant and AP and HMX in GAP propellant, theoretical specific impulses for TKX-50-based HTPB propellant and TKX-50-based GAP propellant exist a optimal value of energy. When the substitution of TKX-50 for AP and HMX in NEPE propellant, theoretical specific impulse of TKX-50-based NEPE propellant increases at first, then decreases, and then increases, and the maximum increase can reach 20.4 N·s·kg<sup>-1</sup>.

**Key words:** physical chemistry; dihydroxylammonium 5,5'-bistetrazole-1,1'-diolate (TKX-50); solid propellant; energy characteristics; numerical calculation

**CLC number:** TJ55; V512; O64

**Document code:** A

**DOI:** 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.03.003