

doi:10.3969/j.issn.1001-8352.2016.01.004

# 浇注 PBX 固化温度场的数值模拟<sup>\*</sup>

陈春燕 高立龙 王晓峰 王永顺 南海 李 昆

西安近代化学研究所(陕西西安,710065)

[摘 要] 为了使浇注塑料黏结炸药(PBX)具有均匀的固化温度场,采用 COMSOL Multiphysics 软件和 Fourier 数学模型,分别模拟研究了模具尺寸、烘箱与 PBX 间的温差、PBX 固化速率等因素对 PBX 温度场分布的影响。结果表明:药浆温度低于烘箱温度时,浇注 PBX 内的温度场呈现由外向里递减的趋势。 $\varnothing 60\text{ mm} \times 240\text{ mm}$ 、 $\varnothing 100\text{ mm} \times 240\text{ mm}$ 、 $\varnothing 200\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  和  $\varnothing 200\text{ mm} \times 1\,000\text{ mm}$ ,壁厚都为 5 mm 的模具,从 25℃ 升至 60℃ 的过程中,模具边缘和中心点的最大温差可分别达到 3.22、6.66、10.49℃ 和 13.08℃。 $\varnothing 200\text{ mm} \times 1\,000\text{ mm}$ ,壁厚为 5 mm 的模具分别从 0、25、40、50℃ 升至 60℃ 时,模具边缘和中心点的最大温差可分别达到 17.56、13.08、7.02℃ 和 3.36℃。药浆温度与烘箱温度相同时,模具边缘温度最小,中心温度最高,此时影响温度场梯度的主要因素为药浆固化速率的大小。当药浆和烘箱间存在温差,可通过减小模具尺寸、降低浇注 PBX 内的温度梯度,且浇注 PBX 的固化尽量采取药浆与烘箱温度一致的固化工艺,此时选择固化速率较小的药浆可实现 PBX 内的温度基本一致。

[关键词] 浇注 PBX;固化;数值模拟;温度场;固化速率

[分类号] TQ560.71; O631.2<sup>+</sup>2

## 引言

浇注塑料黏结炸药(PBX)的制备采取的是升温式固化工艺。当 PBX 内存在温度场梯度时,必然导致 PBX 反应速度的不一致,从而形成力学梯度。在发射过程中,因为力学梯度形成的变形不一致,易使 PBX 在变形界面产生摩擦、剪切作用,影响 PBX 的发射安全性。所以,为了 PBX 的发射安全,必须对沿径向 PBX 的力学性能进行控制。影响同一配方径向力学性能的主要因素为固化度的大小,从固化反应动力学方程<sup>[1]</sup>可见,温度是影响固化度的主要因素。为了实现热固性 PBX 内部的力学均匀,必须对 PBX 内的温度场进行控制。所以,研究影响 PBX 内温度场分布的因素意义重大。

利用数值模拟方法研究材料在固化过程中的温度场分布在非含能材料中已广泛应用<sup>[2-5]</sup>。针对复合材料的固化过程,陈祥宝等<sup>[6]</sup>模拟实际工艺条件建立了温度分布模型,并采用有限元逐次迭代来求解温度分布;邵坤等<sup>[7]</sup>利用有限元分析软件对工装的温度场进行了模拟仿真,讨论了板厚、升温速率等因素对温度场的影响。而对热固性 PBX 固化温度场的模拟较少,张百磊等<sup>[8]</sup>采用有限单元法进行了 PBX 固化过程温度场数值模拟,此研究主要集中在

固化过程和固化降温阶段的温度场模拟。在实际工艺中,因为浇注和固化工艺的分离,常常导致 PBX 固化温度低于烘箱温度的情况出现。所以,研究升温阶段和固化阶段 PBX 内的温度场分布和影响因素,对 PBX 捏合、浇注工艺温度的设置及控制 PBX 内力学性能的均匀性都是有利的。

## 1 模型假设

1) PBX 药浆在真空捏合和浇注阶段没有发生化学反应,药浆各个部位的温度一致;

2) PBX 药浆从放入固化烘箱的时刻即开始发生化学反应,烘箱中的热量从 PBX 的外表面传入药浆内部;

3) 在固化过程中,密度、比热以及热扩散系数变化不大;

4) 药浆与模具间无任何热阻存在;

5) 忽略固化过程中 PBX 相态转变对 PBX 物理参数的影响。

## 2 数值模拟原理

热固性 PBX 的固化过程是一个热与化学反应相互耦合的过程。PBX 内部的温度分布由向 PBX 传热的速率和固化反应生成热的速率决定,PBX 固化温度场的本质是一个具有非线性内热源的热传导

\* 收稿日期:2015-06-25

基金项目:国防 973 资助项目(51340030101)

作者简介:陈春燕(1979~),女,工程师,主要从事热固性浇注 PBX 的固化及力学性能研究。E-mail:ccyanzi04@163.com

通信作者:王晓峰(1967~),男,研究员,主要从事炸药配方的设计与制备研究。E-mail:wxclub@163.com

问题,其中内热源是树脂基体固化反应放出的热量。通过对该热传导问题的求解,可以得到 PBX 在固化过程中任意时刻、任意位置的温度及固化度。由于固化阶段树脂基本不发生流动,忽略树脂对流传热影响,则根据 Fourier 热传导定律和能量平衡原理建立该问题的数学模型<sup>[9-10]</sup>:

$$\rho c \frac{dT}{dt} = \lambda \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + q。$$
 (1)

式中: $\rho$  为 PBX 的密度,kg/m<sup>3</sup>;  $c$  为比热容,J/(kg · K);  $T$  为温度,K;  $t$  为时间,s;  $\lambda$  为热导率,W/(m · K);  $q$  为固化反应放热项。

$q$  可表示为:

$$q = \rho_s H_u \frac{d\alpha}{dt}。$$
 (2)

式中: $\rho_s$  为 PBX 中黏结剂的密度,kg/m<sup>3</sup>;  $H_u$  为固化反应完成时单位质量树脂放出的总热量,J/kg;  $d\alpha/dt$  为端羟基聚丁二烯 (HTPB) 固化反应速率。

### 3 数值模拟方案

使用 COMSOL Multiphysics 软件,对厚 5 mm,直径分别为 60、100、200 mm,高为 240 mm 和 1 000 mm 的模具内的 PBX,依靠模具与烘箱地板间的热传导和空气对流,分别从 0、25、40 °C 和 50 °C,升温至 60 °C 时的固化温度场,进行了模拟。

现有浇注工艺采取混合、浇注、固化分离式进行,在 PBX 进入烘箱时,内部温度可能比烘箱的温度低或者与烘箱内温度一致。当 PBX 温度与烘箱内温度一致时,PBX 只存在因固化放热而导致的与烘箱的热传导;当 PBX 温度小于烘箱内温度时,PBX 将因温度差和固化放热与烘箱间进行热传导。而采取试验测量的方法很难全面测试到 PBX 内的整个温度场分布,所以采用计算模拟的方法对 PBX 固化时的温度场进行描述。

HTPB 相对分子质量为 1 500 的固化反应方程:

$$\frac{d\alpha}{dt} = 4.70 \times 10^4 \exp\left(\frac{-6719}{T}\right) (1 - \alpha)^{0.88};$$
 (3)

HTPB 相对分子质量为 2 800 的固化反应方程:

$$\frac{d\alpha}{dt} = 1.07 \times 10^5 \exp\left(\frac{-7309}{T}\right) (1 - \alpha)^{0.89}。$$
 (4)

式中: $\alpha$  为固化反应程度; $t$  为时间; $T$  为温度。

同一温度、同一时刻,式(3)中药浆的反应速率大于式(4)<sup>[1]</sup>。模拟过程所需的材料参数见表 1。

### 4 数值模拟结果

#### 4.1 温度场分布的模拟

浇注 PBX 采用的是捏合-浇注-固化成型工艺,在固化前,PBX 药浆温度一般小于固化设置温度或者与固化温度相同。在此对这两种情况进行了温度

表 1 材料的物理参数<sup>[9]</sup>

Tab. 1 Physical parameters of the material

材料	$\rho/$ (kg · m <sup>-3</sup> )	$\lambda/$ (W · m <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup> )	$c_v/$ (J · kg <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup> )
PBX(s)	1 640	0.25	1 330.00
PBX(1)	1 640-0.001 2 $T$	0.42	1 330.00
钢	8 030	16.27	502.48

场分布的模拟。

温度场模拟结果如图 1。图 1(a)中,因为模具外的烘箱温度高于药浆温度,所以 PBX 内出现一个从外壁到中心,温度依次降低的环形温度场。此时的热量主要来自烘箱和药浆固化反应的放热。随着时间的增加,内外温度逐渐相等。

图 1(b)中,当 PBX 药浆温度与固化温度相同时,PBX 内产生一个由中心向外壁的温度依次减小的温度场,这个温度场梯度的存在主要因为药浆固化放热,外壁处热量与空气对流速率较快,而 PBX 中心产生的热量主要靠传导缓慢传递。

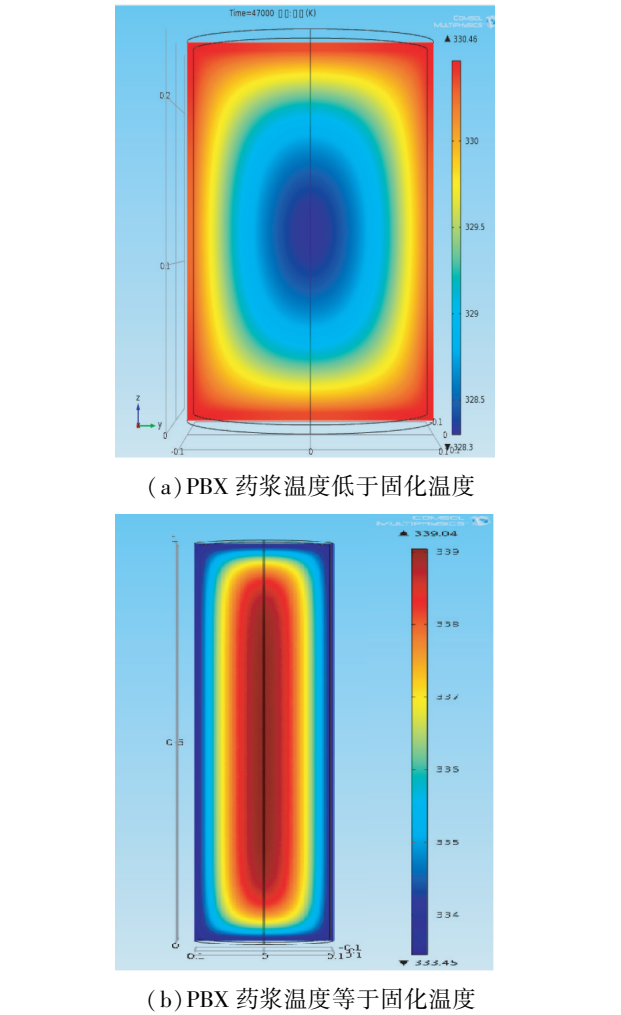


图 1 PBX 温度场模拟

Fig. 1 Simulated temperature field in PBX

4.2 模具尺寸对 PBX 温度场的影响

4.2.1  $\varnothing 60\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 内的温度场分布 (25 ~ 60℃)

选取模具边缘和中心两个点进行温度比较,所取位置如图 2 所示。

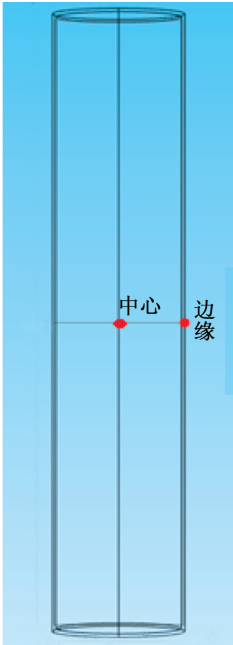


图 2 模具内的观测点

Fig.2 Observation points in the PBX mold

根据温度场模拟结果,将模具边缘点和中心点在不同时刻的温度汇总,如表 2。从表 2 可见,在升温过程中的同一时刻,模具边缘点温度总是高于中心点温度。在 3 600 s,模具边缘温度和中心温度间差值最大达到 3.22 ℃。

表 2 不同时刻 $\varnothing 60\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 的温度场分布

Tab.2 Temperature field distribution of PBX in a  $\varnothing 60\text{mm} \times 240\text{mm}$  mold

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	26.00	25.05
1 200	31.60	27.37
3 600	38.72	35.50
47 000	59.55	59.48

4.2.2  $\varnothing 100\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 内的温度场分布 (25 ~ 60 ℃)

模具尺寸增大到 $\varnothing 100\text{ mm} \times 240\text{ mm}$ 时,PBX 内的温度场梯度进一步增加(见表 3),7 400s 模具边缘和中心的温差达到最大值 6.66 ℃。47 000 s 模具边缘和中心还存在 0.82 ℃的温差。

表 3 不同时刻 $\varnothing 100\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 的温度场分布

Tab.3 Temperature field distribution of PBX in a  $\varnothing 100\text{mm} \times 240\text{mm}$  mold

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	26.55	25.00
1 200	30.88	25.39
7 400	36.56	29.90
47 000	59.72	58.90

4.2.3  $\varnothing 200\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 内的温度场分布 (25 ~ 60℃)

模具尺寸增大到 $\varnothing 200\text{ mm} \times 240\text{ mm}$ 时,PBX 内的温度场梯度进一步增加,18 000 s 模具边缘和中心的温差达到最大值 10.49 ℃。47 000 s 模具边缘和中心还存在 3.10 ℃的温差。

表 4 不同时刻 $\varnothing 200\text{ mm} \times 240\text{ mm}$  PBX 的温度场分布

Tab.4 Temperature field distribution of PBX in a  $\varnothing 200\text{mm} \times 240\text{mm}$  mold

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	27.50	25.00
1 200	30.42	25.34
18 000	36.62	26.13
47 000	59.23	56.13

从模具尺寸对温度场分布的模拟结果可见,随着模具尺寸的增加,模具边缘温度和中心温度间的温差增加。

4.3 温差对 PBX 温度场分布的影响

4.3.1 0 ~ 60 ℃时, $\varnothing 200\text{ mm} \times 1\,000\text{ mm}$  PBX 内的温度场分布

从 0 ℃升至 60 ℃时, $\varnothing 200\text{ mm} \times 1\,000\text{ mm}$  模具内的温度场分布如图 1 所示。表 5 中,模具边缘和中心的温差在 23 000 s 时达到最大,差值为 17.56 ℃。 $\varnothing 200\text{ mm} \times 1\,000\text{ mm}$  模具放入 60 ℃的烘箱 15 h 后,模具边缘和中心的温差还相差 10.76 ℃。

表 5 0 ~ 60 ℃时 PBX 的温度场分布

Tab. 5 Temperature field distribution of PBX at 0 ~ 60 ℃

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	2.56	0.24
1 200	9.30	0.86
23 000	42.20	24.64
54 200	50.16	39.40

4.3.2 25 ~ 60℃时, Ø200 mm × 1 000 mm PBX 内的温度场分布

从表 6 模拟结果可见,从 25 ℃升至 60 ℃时, Ø200 mm × 1 000 mm 模具边缘和中心最大温差为 13.08 ℃。Ø200 mm × 1 000 mm 模具放入 60 ℃的烘箱 15 h 后,模具边缘和模具中心的温差还相差 9.63 ℃。

表 6 25 ~ 60 ℃时 PBX 的温度场分布  
Tab.6 Temperature field distribution of PBX at 25 ~ 60 ℃

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	27.50	25.00
1 200	30.43	25.00
25 200	45.53	32.45
54 200	55.12	45.49

4.3.3 40 ~ 60℃时, Ø200 mm × 1 000 mm PBX 内的温度场分布

从表 7 模拟结果可见,从 40 ℃升至 60 ℃时, Ø200 mm × 1 000 mm 模具边缘和中心的温差最大相差 7.02 ℃, Ø200 mm × 1 000 mm 模具放入 60 ℃的烘箱 13 h 后,模具边缘和中心的温差为 3.92 ℃。

表 7 40 ~ 60 ℃时 PBX 的温度场分布  
Tab.7 Temperature field distribution of PBX at 40 ~ 60 ℃

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	40.85	40.00
1 200	43.55	41.00
18 000	58.57	51.55
47 000	59.79	55.87

4.3.4 50 ~ 60℃时, Ø200 mm × 1 000 mm PBX 内的温度场分布

从表 8 的模拟结果可见,从 50℃升至 60℃时, Ø200 mm × 1 000 mm 模具边缘和中心的温差最大可达 3.36 ℃, Ø200 mm × 1 000 mm 模具放入 60 ℃

表 8 50 ~ 60 ℃时 PBX 的温度场分布  
Tab.8 Temperature field distribution of PBX at 50 ~ 60 ℃

时间/s	边缘/℃	中心/℃
200	50.43	50.00
1 200	51.55	50.20
7 200	54.10	50.74
47 000	58.90	57.69

的烘箱 13 h 后,模具边缘和中心温差达 1.21 ℃。

从温差对温度场分布的影响可见,随着温差的增加,模具边缘温度和中心温度间的温差增加。

4.4 PBX 固化反应速率对温度场的影响

4.4.1 PBX 温度低于固化温度

对具有不同固化反应速率的 PBX 药浆,在固化升温阶段的温度场进行了模拟。模具大小为 Ø200 mm × 1 000 mm, 25 ℃升至 60 ℃, 固化反应方程分别采用式(3)和式(4)模拟。

分别取模具一中心点和边缘点,对比这两点在模具中装有不同固化反应速率药浆时的温度分布。结果见图 3。

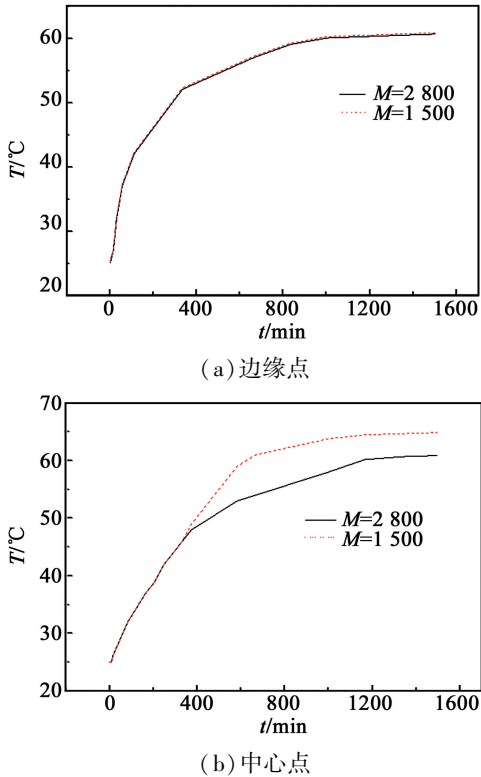


图 3 不同固化反应速率时固化升温阶段的温度场  
Fig.3 Temperature field in curing-heating stage with different curing velocities

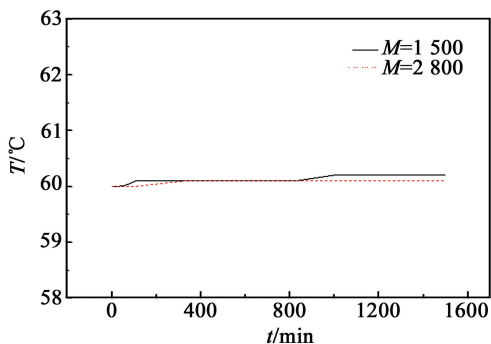
从升温阶段的温度场分布可见,具有相对分子质量 1 500 的药浆内部达到 60 ℃的时间更短;且在同一时刻,相对分子质量 1 500 的药浆内部温度更高;到达 60 ℃后,因为 PBX 固化放热的影响,温度场出现中心温度高,边缘温度低的特点,且相对分子质量 1 500 的药浆中心温度比相对分子质量 2 800 的药浆中心温度高 3 ℃。

图 3 中,在模具边缘,药浆固化速率没有影响到药浆的温度,模具边缘的温度主要受烘箱内空气和接触面的热对流和热传导的影响。在模具中心,药浆的固化速率对药浆温度有一定影响,表现在开始

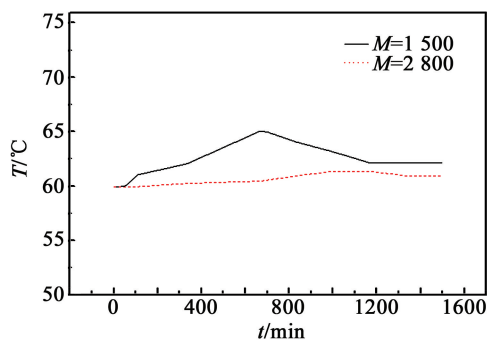
阶段具有不同反应速率药浆的温度几乎一致;随着药浆温度的升高,固化反应速率增加,因固化反应释放的热量也增加,表现在具有较大反应速率药浆的温度升高速率较大。

#### 4.4.2 PBX 温度与固化温度相等

从前面的模拟结果可见,当 PBX 温度与固化温度相等时,PBX 的温度场呈现出中心高、边缘低的特点,此时产生温度梯度的原因为 PBX 内固化放热与外部导热速率的不一致。对药浆温度和烘箱温度都为 60 ℃ 的体系进行了温度场模拟,结果见图 4。



(a) 边缘点



(b) 中心点

图 4 不同固化反应速率时的温度场分布(60 ℃)

Fig. 4 Temperature distribution with different curing velocities at 60℃

从图 4 可见,当药浆温度与固化温度相等时,固化速率不同的药浆在模具边缘的温度几乎相等。模具中心的温度表现为固化反应速率较大的温度高,最高温度可达 65 ℃,而固化速率低的中心温度为 61 ℃。

## 5 结论

1) 热固性 PBX 固化温度场的分布受药浆温度与烘箱温度间的温差、模具尺寸和药浆固化反应速率的影响。

2) 当药浆温度低于烘箱温度时,PBX 的温度场分布呈现为由外向里递减的趋势。当药浆温度等于烘箱温度时,PBX 的温度场分布为中心温度高,边缘温度低的特点。

## 参 考 文 献

- [1] 陈春燕,王晓峰,高立龙,等. 不同分子量 HTPB/TDI 的固化反应动力学[J]. 含能材料,2013,21(6):771-776. CHEN C Y, WANG X F, GAO L L, et al. Effect of HTPB with different molecular weights on curing kinetics of HTPB/TDI system[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2013, 21(6):771-776.
- [2] 陈淑仙,王渊涛,杨文锋,等. 树脂基复合材料修补片固化过程中的温度场[J]. 西南交通大学学报,2014,49(5):869-874. CHEN S X, WANG Y T, YANG W F, et al. Analysis of temperature field of resin matrix composite patches during curing process[J]. Journal of Southwest Jiaotong University, 2014, 49(5):869-874.
- [3] JOSHI S C, LIU X L, LAM Y C. A numerical approach to the modeling of polymer curing in fibre-reinforced composites[J]. Composites Science and Technology, 1999, 59(7):1003-1013.
- [4] 李敬明,田勇,张明,等. 熔黑梯炸药凝固过程的数值模拟与实验验证[J]. 含能材料,29,17(4):428-430,435. LI J M, TIAN Y, ZHANG M, et al. Numerical simulation and experimental validation of RHT solidification process[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2009, 17(4):428-430,435.
- [5] 马松,袁俊明,刘玉存,等. 水浴和自然条件下熔铸炸药凝固过程的数值计算[J]. 火炸药学报,2013,36(3):54-58. MA S, YUAN J M, LIU Y C, et al. Numerical calculation of solidification process of melt-cast explosive in water bath and natural conditions[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2013, 36(3):54-58.
- [6] 陈祥宝,邢丽英,周正刚. 树脂基复合材料制造过程温度变化模拟研究[J]. 航空材料学报,2009,29(2):61-65. CHEN X B, XING L Y, ZHOU Z G. Simulation and modeling of polymeric composition temperature change during manufactory process[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2009, 29(2):61-65.
- [7] 邵坤,陈文亮,徐艳虎. 复合材料固化过程中工装温度场的有限元分析[J]. 中国制造业信息化,2009,38(7):27-29,34. SHAO K, CHEN W L, XU Y H. The finite element analysis of frock temperature scene in complex material solidify[J]. Manufacture Information Engineering of China, 2009, 38(7):27-29,34.
- [8] 张百磊,常双君,袁俊明,等. 一种浇注 PBX 固化过程的实验与数值模拟[J]. 含能材料,2015,23(3):232-237.

- ZHANG B L, CHANG S J, YUAN J M, et al. Experiment and numerical simulation of curing process of cast PBX[J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2015, 23(3): 232-237.
- [9] 牛余雷, 南海, 冯晓军, 等. RDX 基 PBX 炸药烤燃试验与数值计算[J]. 火炸药学报, 2011, 34(1): 32-36, 41.
- NIU Y L, NAN H, FENG X J, et al. Cook-off test and its numerical calculation of RDX-based PBX explosive [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2011, 34(1): 32-36, 41.
- [10] 张纪奎, 关志东, 酆正能. 热固性复合材料固化过程中温度场的三维有限元分析[J]. 复合材料学报, 2006, 23(2): 175-179.
- ZHANG J K, GUAN Z D, LI Z N. Three dimensional finite element analysis for the temperature field of thermoset composites during cure process [J]. Acta Materialae Compositae Sinica, 2006, 23(2): 175-179.

## Numerical Simulation of Temperature Field of Cast PBX during Curing Process

CHEN Chunyan, WANG Xiaofeng, GAO Lilong, WANG Yongshun, NAN Hai, LI Kun

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

[ABSTRACT] In order to realize uniform temperature field of the cast plastic bonded explosive (PBX) during curing process, the numerical simulation was conducted by a COMSOL Multiphysics software and a Fourier model. Effects of the size of mold, the temperature difference between the oven and the PBX, PBX curing velocity on the temperature field in PBX were studied. Results show that, when temperature of PBX is lower than that of oven, the temperature field in PBX decreases from the outside to the centre of mold. When the size of mold is respectively  $\varnothing 60\text{mm} \times 240\text{mm}$ ,  $\varnothing 100\text{mm} \times 240\text{mm}$ ,  $\varnothing 200\text{mm} \times 240\text{mm}$  and  $\varnothing 200\text{mm} \times 1\,000\text{mm}$  and mold thickness is 5 mm, in the process of temperature ranging from 25 °C to 60 °C, the temperature difference between edge point and center point of the mold is respectively 3.22, 6.66, 10.34 °C and 13.08 °C. For  $\varnothing 200\text{mm} \times 1\,000\text{mm}$  mold with the thickness of 5mm, ranging from 0, 25, 40 °C and 50 °C to 60 °C, the max temperature difference in mold can reach to 17.56, 13.08, 7.02 °C and 3.36 °C respectively. When the temperature of PBX is the same as that of the oven, temperature in the center is the highest, and that in the edge is the lowest. Temperature difference is mainly affected by the curing velocity. When temperature different exists between PBX and oven, the temperature gradient in PBX can be reduced by reducing the dimension of the mould, and low curing velocity can realize temperature field uniform in PBX.

[KEY WORDS] cast plastic bonded explosive; curing; numerical modeling; temperature field; curing velocity

(上接第 15 页)

- [12] 马丛明, 刘祖亮, 姚其正. 5-取代氧化呋咱并[3,4-b]吡啶衍生物的合成与表征[J]. 应用化学, 2014, 31(8): 911-915.
- MA C M, LIU Z L, YAO Q Z. Synthesis and characterization of 5-substituted furoxano [3,4-b] pyridine derivatives[J]. Chinese Journal of Applied Chemistry, 2014, 31(8): 911-915.

## Synthesis, Characterization and Decomposition of 1-Substitued 4-Nitroimidazole Energetic Derivatives

ZHAO Kun, LIU Zuliang

School of Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology (Jiangsu Nanjing, 210094)

[ABSTRACT] By using 4-nitroimidazole as a raw material in condensation with 2-amino-3,5-dinitro-6-chloropyridine and 2,6-chloro-3-nitro-pyridine, 6-(4-nitro-imidazol-1-yl)-2-amino-3,5-dinitro-pyridine (1<sup>#</sup>) and 6-chloro-3-nitro-2-(4-nitro-imidazol-1-yl)-pyridine (3<sup>#</sup>) were synthesized with yields of 65% and 52% respectively. The synthesis of 3-nitro-2-(4-nitro-imidazol-1-yl)-pyridine (2<sup>#</sup>) was optimized by this method with a yield of 85%. Further azidation of compound 3<sup>#</sup> was carried on to give 5-azido-6-nitrotetrazolo [1,5-a]pyridine (4<sup>#</sup>). The structures of these compounds were characterized by <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, MS and elemental analysis. Thermal behavior of compound 1<sup>#</sup> was studied by TG and DSC. Results show that the initial decomposition temperature of compound 1<sup>#</sup> was 221.83 °C, the total decomposition heat 302.65 kJ/mol, while its mass loss of 71.84% takes place at the temperature of 209.17 ~ 398.67 °C.

[KEY WORDS] organic synthesis; energetic compounds; thermal decomposition; 4-nitroimidazole