

文章编号: 1006-9941 (2015)08-0741-05

4, 4'-偶氮-1H-1, 2, 4-三唑-5-酮铵盐 AZTO · H₂O 的制备及热化学性质

肖建雄, 杜小利, 乔丽燕, 闫东, 徐抗震, 黄洁

(西北大学化工学院, 陕西省物理无机化学重点实验室, 陕西 西安 710069)

摘要: 以 4-氨基-1, 2, 4-三唑-5-酮(ATO)为原料, 通过高锰酸钾氧化制备了一种新型高能有机铵盐 4, 4'-偶氮-1H-1, 2, 4-三唑-5-酮铵盐(AZTO · H₂O)。用差示扫描量热法研究了其的热行为。用 Kissinger 法和 Ozawa 法计算了其非等温热分解反应的动力学参数。结果表明, 其分解热、表观活化能和指前因子分别为 247.46 kJ · mol⁻¹、177.80 kJ · mol⁻¹ 和 10^{15.74} s⁻¹。其热爆炸临界温度和 298.15 K 下的摩尔热容分别为 233.1 °C 和 271.45 J · mol⁻¹ · K⁻¹。它的绝热至爆炸时间为 72.8 ~ 74.7 s。描述 AZTO · H₂O 放热分解反应的动力学方程为: $\frac{d\alpha}{dT} = \frac{10^{15.74}}{\beta} \times 4(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{\frac{3}{4}} \exp(-1.774 \times 10^5 / RT)$ 。

关键词: 含能材料; 4, 4'-偶氮-1H-1, 2, 4-三唑-5-酮铵盐; 热性能; 绝热至爆炸时间; 制备

中图分类号: Tj55; O62

文献标志码: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.08.006

1 引言

含能材料是武器系统的能源, 对国防科技的建设有着非常重要的作用。高氮含能化合物^[1]是一类含碳和氮的杂环为主要骨架且氮含量较高的化合物, 其能量主要来源于环结构中含有更多高能 N—N、C—N、N=N、C=N 键和更大的环张力。高氮含能化合物结构中不含有或含有少量硝基基团, 且分子中大多存在共轭结构, 因此环张力比纯 C 或少 N 五元杂环化合物要小, 分子的稳定性要高, 而感度要低。从热化学性质来看, 这类化合物具有热分解点高, 正生成焓高等特点; 同时, 结构中高氮、低碳氢使其在反应过程中更容易达到氧平衡, 燃烧产物多为环境友好的 N₂, 具有作为新型含能材料的潜力, 是近年来国内外研究较多的一类含能材料^[2-5]。

4-氨基-1, 2, 4-三唑-5-酮(ATO)是一种三唑酮类化合物, 白色粉末固体, 熔点为 187 ~ 188 °C, 具有含碳氢量低、含氮量高、较高密度、结构稳定等优点。

收稿日期: 2014-06-26; 修回日期: 2014-11-06

基金项目: 陕西省科学技术研究发展计划项目(2013K02-25); 第 47 批留学回国人员科研启动基金教外司留(1792); 陕西省教育厅科研计划项目(14JF025)

作者简介: 肖建雄(1988-), 男, 硕士, 主要从事含能材料的研究。

e-mail: 987891041@qq.com

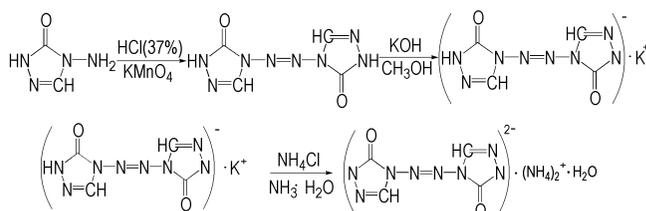
通信联系人: 黄洁(1969-), 女, 教授, 主要从事含能材料的研究。

e-mail: huangjie@nwu.edu.cn

ATO 是一种多齿配体, 分子中 N, O 原子上孤对电子可以使 ATO 以分子状态与金属盐或金属离子形成性能优异稳定的金属配合物, 可以用来合成高氮含能化合物或作为合成高氮含能化合物的中间体^[6]。20 世纪 60 年代, 利用碳酰肼和原甲酸三乙酯反应合成 ATO 的方法被 Kroeger C F 等^[7]首先成功提出, 并对 ATO 的部分性能进行了研究。美国科学家 Odenthal^[8], Dusseldorf^[9]等利用不同的腈化物与碳酰肼反应合成出有不同取代基团的三唑酮类化合物。本研究以 ATO 为原料^[10]制备出了一种新型高能有机偶氮铵盐 AZTO · H₂O, 并分析了其热力学和动力学行为。

2 实验部分

2.1 合成路线



Scheme 1 Synthetic route of AZTO · H₂O

2.2 试剂与仪器

实验药品: 甲醇, 北京化工厂; ATO, 自制; 无水

乙醇,天津市河东区红岩试剂厂;氯化铵,株洲江海环保实业有限公司;*N,N*-二甲基酰胺(DMF),天津市科密欧化学试剂有限公司;浓盐酸,西陇化工股份有限公司;高锰酸钾,西陇化工股份有限公司;氢氧化钾,天津市风船化学试剂科技有限公司。以上药品均为分析纯。

实验仪器:电子天平(JPT-10C)上海精科天平厂;电热鼓风干燥箱(101-AB)北京科伟永兴仪器有限公司;加热磁力搅拌器(RET control-vice)德国IKA;元素分析仪(VarioEL III)德国艾乐曼公司;同步热分析仪(SDT Q600)美国TA公司。

2.3 实验过程

2.3.1 ZTO的合成

将 140 mmol (14 g) ATO 和 230 mL 浓盐酸依次加入到 500 mL 三口烧瓶中,搅拌直至其全部溶解,冰盐水浴冷却使上述混合溶液的温度降至 5 °C,再开始滴加由 98 mmol (15.5 g) KMnO_4 形成的饱和水溶液,控制滴加速度使反应液的温度不超过 15 °C,滴加完毕后,将反应溶液升温至 60 °C,保温搅拌反应 5 h 后,将反应得到的产物冷却,抽滤,水洗,烘干,用 DMF 重结晶,在 50 °C 下真空干燥 24 h 后,得到 41 mmol (8.08 g) 白色粉末状固体(ZTO),产率为 60%。IR (KBr, ν/cm^{-1}): 3213.99(N—H), 3159.99(C—H), 1724.48(C=O), 1681.43(N=N), 1544.87(C=N), 1259.27(C—N)。元素分析(%): $\text{C}_4\text{N}_8\text{O}_2\text{H}_4$; 实测值: C 24.48, H 2.58, N 57.15; 理论值: C 24.50, H 2.06, N 57.13。

2.3.2 K(ZTO)的合成

将 51 mmol (1 g) ZTO 和 5 mL 水依次加入 50 mL 三口烧瓶中,搅拌升温至 50 °C,缓慢滴加由 20 mmol (1.12 g) KOH 配制的 2 mL 水溶液,滴加完毕后,反应溶液变成黄色透明溶液。保温搅拌反应 1.5 h 后,搅拌冷却至室温,加入适量的甲醇有大量黄色沉淀析出,将得到的反应产物抽滤,甲醇洗涤,50 °C 下真空干燥 24 h 后,得到 9 mmol (1.27 g) 黄色粉末状固体(K(ZTO)),产率为 98%,IR (KBr, ν/cm^{-1}): 3247.59(N—H), 3120.31(C—H), 1639.22(N=N), 1504.23(C=N), 1330.66(C—N)。MS (70eV) m/z (%): 235.0090(K^+ , 39), 219.0352(Na^+ , 39)。元素分析(%): $\text{K}(\text{ZTO}) \cdot \text{H}_2\text{O}$; 实测值: C 19.05, H 2.00, N 44.45; 理论值: C 19.38, H 3.19, N 44.67。

2.3.3 AZTO · H₂O 的合成

将 33 mmol (0.5 g) $\text{K}(\text{ZTO}) \cdot \text{H}_2\text{O}$ 和 10 mL 浓

氨水依次加入到 100 mL 三口烧瓶中,搅拌升温到 30 ~ 35 °C 下至固体完全溶解,缓慢滴加由 10 mmol (0.52 g) 氯化铵(NH_4Cl)配制的 5 mL 水溶液,滴加完毕后,保温搅拌反应 30 min。反应完全后搅拌冷却至室温,有大量黄色沉淀析出,将反应产物抽滤,乙醇洗涤 3 ~ 4 遍,50 °C 下真空干燥 24 h 后,得到 2 mmol (0.24 g) 黄色晶粉末状固体。产率 58.5%。¹H NMR (UNITYINOVA 500 MHz, $\text{DMSO}-d_6$): 8.55(N—CH=N, s), 3.61(NH_4 , d), 2.95 为 H_2O 峰, 2.51 为 DMSO 的溶剂峰(图 1)。IR (KBr, ν/cm^{-1}): 3224.45(N—H), 3120.31(C—H), 1727.94(C=O), 1639.22(N=N), 1542.80(C=N), 1334.52(C—N)。元素分析(%): $\text{C}_4\text{N}_{10}\text{O}_3\text{H}_{14}$; 实测值: C 19.45, H 3.49, N 56.86; 理论值: C 19.36, H 4.84, N 56.45。

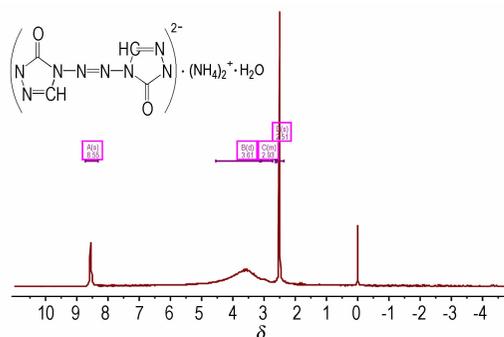


图 1 AZTO · H₂O 的核磁共振光谱

Fig. 1 ¹H NMR spectrum of AZTO · H₂O

3 结果与讨论

3.1 AZTO · H₂O 的热分解

AZTO · H₂O 在不同升温速率下的 DSC 曲线如图 2 所示。

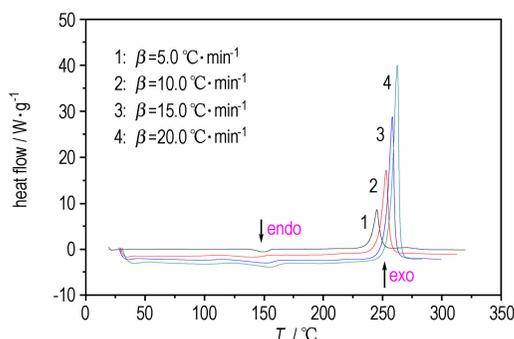


图 2 AZTO · H₂O 在不同升温速率下的 DSC 曲线

Fig. 2 DSC curves of AZTO · H₂O at different heating rates

由图 2 可以看出,化合物 AZTO · H₂O 的热分解过程可分为两个阶段:第一个阶段是脱水吸热过程,

在 5 °C · min⁻¹ 的升温速率下, 热分解过程变化温度为 136.6 ~ 158.9 °C。此外推温度 (T_e), 峰温 (T_p) 和脱水热分别为 140.8 °C, 149.6 °C, -97.8 J · g⁻¹, 由此可知配位水分子的作用力很强, 比较难以失去。第二阶段为剧烈放热分解过程 (升温速率 5 °C · min⁻¹), 热分解过程变化温度为 219.4 ~ 256.4 °C。此外推温度 (T_e), 峰温 (T_p) 和分解热分别为 239.5 °C, 245.2 °C, 913.6 J · g⁻¹。由于起始分解温度较高, 可以看出 AZTO · H₂O 有较好的热稳定性。

3.2 AZTO · H₂O 的热分解动力学

主要采用 Ozawa 法^[11] 和 Kissinger 法^[12] 计算热分解反应动力学参数:

Ozawa 方程:

$$\lg\beta + \frac{0.4567E}{RT} = C \quad (1)$$

Kissinger 方程:

$$\frac{d \ln \frac{\beta}{T_p^2}}{d \frac{1}{T_p}} = -\frac{E}{R} \quad (2)$$

通过不同的升温速率下的 DSC 曲线, 得对应的 T_p , Ozawa 方程(1)可以看出 $\lg\beta$ 与 $1/T$ 呈一次线性关系, 从斜率可求出 Ozawa 法的 E_0 值。

通过 Kissinger 方程(2), 由 $\ln(\beta/T_p^2)$ 对 $1/T_p$ 作图也可得到一条直线, 从直线斜率可求出表观活化能 E_k 值, 截距为表观活化因子 A 。

由图 2 可计算出第二段热分解反应过程的 T_0 、 T_e 、 T_p 、 ΔH_d 、 T_{00} 、 T_{e0} 和 T_{p0} 参数值, 结果列于表 1。表 2 列出了 Ozawa 法与 Kissinger 法计算得到相应的 A 值、 E 值和 r 值。

计算结果显示, Ozawa 法与 Kissinger 法计算结

果一致, 且 r 值都大于 0.98。

利用方程(3)算得 $\beta \rightarrow 0$ 时的外推起始温度值 (T_{e0}) 为 230.5 °C:

$$t_{ei} = t_{00} + b\beta_i + c\beta_i, \quad i=1 \sim 4 \quad (3)$$

式中, b 和 c 为相关系数。

利用方程(4)计算得 AZTO · H₂O 的热爆炸临界温度 T_b 为 233.1 °C:

$$T_b = \frac{E_0 - \sqrt{E_0^2 - 4E_0RT_{e0}}}{2R} \quad (4)$$

式中, E_0 是用 Ozawa 法计算出的表观活化能。

图 3 是不同 β 下温度随反应进度 (α_i) 的变化曲线, 图 4 是在 Ozawa 方程中分别代入不同加热速率 (β) 下相对应的 T_i 和 α_i ($i=1, 2, 3, \dots$), 计算得到活化能 (E_0) 随反应进度 (α_i) 的变化曲线, 从图 4 中可以看出, E_a 值在 α 为 0.10 ~ 0.78 之间分布比较稳定, 且均匀分布于 176.50 kJ · mol⁻¹ 和 185.20 kJ · mol⁻¹ 之间, 基本和 Ozawa 法、Kissinger 法在峰顶温度处的计算结果保持一致。最终通过计算得到 AZTO · H₂O 的热分解反应的动力学方程为:

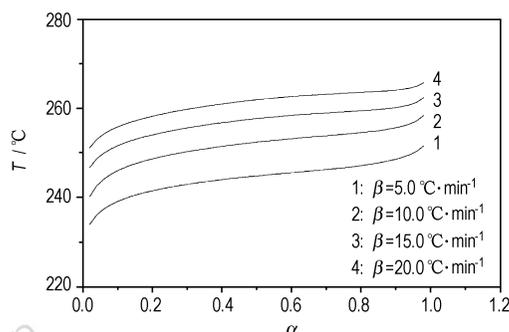


图 3 AZTO · H₂O 在不同 β 下的 T - α 曲线

Fig. 3 T - α curves of AZTO · H₂O at different heating rates

表 1 由不同升温速率下的 DSC 曲线得到的热力学参数

Table 1 Thermodynamic parameters determined by DSC curves at various heating rates (β)

$\beta/^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$	$T_0/^\circ\text{C}$	$T_e/^\circ\text{C}$	$T_p/^\circ\text{C}$	$\Delta H_d/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$T_{00}/^\circ\text{C}$	$T_{e0}/^\circ\text{C}$	$T_{p0}/^\circ\text{C}$
5.0	219.44	239.47	245.24				
10.0	226.19	246.76	253.03	247.46	208.62	230.47	235.99
15.0	237.82	252.13	258.30				
20.0	242.40	255.86	262.46				

表 2 由不同升温速率下的 DSC 曲线计算出的动力学参数

Table 2 Kinetic parameters obtained by DSC curves at various heating rates

$E_k/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$\log(A/\text{s}^{-1})$	r_k	$E_0/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	r_0	$\bar{E}/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
177.80	15.74	0.9988	177.40	0.9989	177.60

Note: a Subscript K is data obtained by Kissinger's method, Subscript O is data obtained by Ozawa's method.

$$\frac{d\alpha}{dT} = \frac{10^{15.74}}{\beta} \times 4(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{3/4} \times \exp(-1.774 \times 10^5 / RT)$$

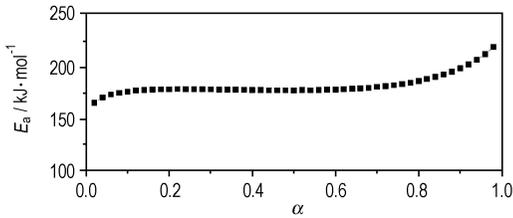


图4 AZTO · H₂O 在不同 β 下的 E_a - α 曲线

Fig.4 E_a - α curve of AZTO · H₂O at different heating rates

3.3 AZTO · H₂O 的比热容的测定

采用 Micro-DSC III 微热量仪连续比热容测定模式下对化合物进行比热容的测定, 计算方程见式(5)^[13]:

$$c_p = \frac{A_s - A_b}{m_s \beta} \quad (5)$$

利用式(5)和运用仪器所带软件可以直接拟合出比热容随温度连续变化的方程式(6):

$$c_p(T) = \sum_{i=-3}^j a(i) \times T^i \quad (-3 \leq i < j \leq 5) \quad (6)$$

式中, A_b 为空白实时热流, mW; A_s 为样品实时热流, mW; β 为升温速率, K · s⁻¹; m_s 为样品质量, g; c_p 为比热容, J · g⁻¹ · K⁻¹。

图5是 AZTO · H₂O 比热容的测定结果, 在所测温度范围内, 比热容方程为:

$$c_p = -98.3217 + 9.8315 \times 10^{-1} T - 3.2378 \times 10^{-3} T^2 + 3.5528 \times 10^{-6} T^3$$

式中, 283.15 K ≤ T ≤ 353.15 K。在常温 298.15 K 时, AZTO · H₂O 的摩尔热容为 271.45 J · mol⁻¹ · K⁻¹。

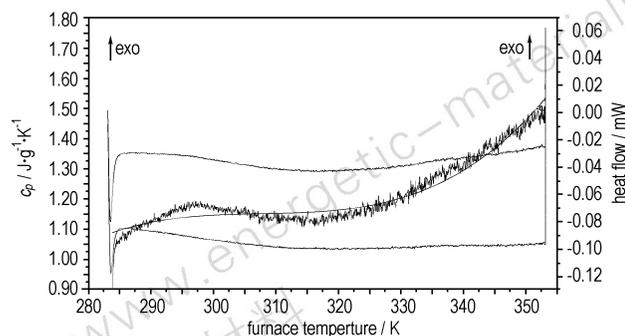


图5 AZTO · H₂O 的连续比热容测定结果

Fig.5 Determination results of the continuous c_p of AZTO · H₂O

3.4 AZTO · H₂O 的绝热至爆时间

在绝热条件下, 由含能材料开始分解到爆炸需要

的时间称为绝热至爆时间(t), 也采用目标化合物的热分解过程中的临界加热速率(dT/dt)_{T_b}来评价, 计算公式如下^[14-15]:

$$c_p \frac{dT}{dt} = QA \exp(-E/RT) f(\alpha) \quad (8)$$

$$\alpha = \int_{T_0}^T \frac{c_p}{Q} dT \quad (9)$$

$$c_p = a + bT + cT^2 + \dots \quad (10)$$

式中, T 为绝对温度, K; t 为绝热至爆时间, s; Q 为热分解反应的放热量, J · g⁻¹; A 为指前因子, s⁻¹; E 为活化能, J · mol⁻¹; $f(\alpha)$ 为最概然机理函数, R 为气体常数, 8.314 J · mol⁻¹ · K⁻¹。

整理式(8) ~ (10) 得到绝热至爆时间的表达式为:

$$t = \frac{1}{QA} \int_{T_{00}}^{T_b} \frac{c_p \exp(E/RT)}{f(\alpha)} dT \quad (11)$$

式中, 积分的上、下限分别为热爆炸临界温度 T_b 和 T_{00} 。

一般认为含能材料的最概然机理函数 $f(\alpha)$ 对绝热至爆时间估算产生的影响非常小。所以通常假设最概然机理函数 $f(\alpha)$ 为式(12):

$$f(\alpha) = (1-\alpha)^n \quad (12)$$

式中, n 为反应级数, 含能材料的热分解反应级数 n 在 0 ~ 2 之间, 取 $n=0, 1, 2$ 。

结合前面的实验数据和式(8) ~ 式(10) 可以估算得到化合物 AZTO · H₂O 的绝热至爆时间为 72.8 ~ 74.7 s。

4 结论

制备得到了 4,4'-偶氮-1H-1,2,4-三唑-5-酮铵盐, 通过 DSC 分析得到临界爆炸温度为 233.1 °C, 比热容方程为: $c_p(283.15 \text{ K} \leq T \leq 353.15 \text{ K}) = -98.3217 + 9.8315 \times 10^{-1} T - 3.2378 \times 10^{-3} T^2 + 3.5528 \times 10^{-6} T^3$, 常温下的摩尔热容值为 271.45 J · mol⁻¹ · K⁻¹, 绝热爆炸时间为 72.8 ~ 74.7 s。描述 AZTO · H₂O 放热分解反应的动力学方程为:

$$\frac{d\alpha}{dT} = \frac{10^{15.74}}{\beta} \times 4(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{3/4} \exp(-1.774 \times 10^5 / RT)$$

参考文献:

- [1] 阳世清, 徐松林, 黄亨建, 等. 高氮化合物及其含能材料[J]. 化学进展, 2008, 20(4): 526-537.
YANG Shi-qing, XU Song-lin, HUANG Heng-jian, et al. High nitrogen compounds and their energy materials[J]. Progress in Chemistry, 2008, 20(4): 526-537.

- [2] 徐松林. 高能含能化合物的合成放大及其火炸药性能研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 2005: 1-19.
XU Song-lin. Synthesis, scale-up of high nitrogen energetic compounds and study on the performance of high nitrogen-based [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2005: 1-19.
- [3] 欧育湘, 刘进全. 高能量密度化合物[M]. 北京: 国防工业出版社, 2007, 26(6): 762-7.
OU Yu-xiang, LIU Jin-quan. High energetic density compounds [M]. Beijing: National Defense Industrial Press, 2007, 26(6): 762-7.
- [4] 王文俊. 含能材料的进展与展望[J]. 固体火箭技术, 2003, 26(3): 42-48.
WANG Wen-jun. Advances and prospects of energetic material technologies[J]. *Chinese Journal of Solid Rocket Technology*, 2003, 26(3): 42-48.
- [5] 张建国, 张同来, 张志刚, 等. 唑类杂环化合物及其配合物的研究概述, 含能材料, 2001, 9(2): 90-93.
ZHANG Jian-guo, ZHANG Tong-lai, ZHANG Zhi-gang, et al. A review on azotic heterocyclic compounds and their coordination compounds[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2001, 9(2): 90-93.
- [6] 张建国, 张同来. $[\text{Ag}(\text{ATO})_2]\text{ClO}_4 \cdot n$ 的合成、结构表征和热分解机理, 物理化学学报, 2000, 16(12): 1110-1114.
ZHANG Jian-guo, ZHANG Tong-lai. Synthesis, structural characterization and thermal decomposition mechanism of $[\text{Ag}(\text{ATO})_2]\text{ClO}_4 \cdot n$ [J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2000, 16(12): 1110-1114.
- [7] Kroeger C F, Hummel L, Mutscher M, et al. Syntheses and reaction of 4-amino-1, 2, 4-triazol-5-ones [J]. *Berichte der Deutschen Chemische Gesellschaft*, 1965, 98(9): 3025-3031.
- [8] Odenthal K K, Dusseldorf K M, Wuppertal L R. Preparation of 4-amino-1, 2, 4-triazol-5-ones: USP 5034 538[P], 1991.
- [9] Dusseldorf K M, Odenthal K K, Dormagen P H. Preparation of 4-amino-1, 2, 4-triazol-5-ones: USP 4952 701[P], 1990.
- [10] 张建国, 张同来. 4-氨基-1, 2, 4-三唑-5-酮的制备和快速分解过程研究[J]. 火炸药学报, 2001, 24(2): 19-21.
ZHANG Jian-guo, ZHANG Tong-lai. Preparation and the flash pyrolysis of 4-amino-1, 2, 4-triazol-5-ones (ATO) [J]. *Chinese Journal of Explosives and Propellants*, 2001, 24(2): 19-21.
- [11] Ozawa T B. A new method of analyzing thermogravimetric data [J]. *Chem Soc Jpn*, 1965, 38: 1881-1886.
- [12] Kissinger H E. Reaction kinetics in differential thermal analysis [J]. *Anal Chem*, 1957, 29: 1702-1706.
- [13] 徐抗震, 宋纪蓉, 赵凤起, 等. 1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯的比热容、热力学性质及绝热至爆时间研究[J]. 化学学报, 2007, 65(24): 2827-2831.
XU Kang-zhen, SONG Ji-rong, ZHAO Feng-qi, et al. Special heat capacity, thermodynamic properties and adiabatic time-to-explosion of 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene [J]. *Acta Chimica Sinica*, 2007, 65(24): 2827-2831.
- [14] 胡荣祖, 张海, 夏志明, 等. 含能材料放热分解反应体系热爆炸的临界温升速率估算式[J]. 含能材料, 2003, 11(3): 130-133, 137.
HU Rong-zu, ZHANG Hai, XIA Zhi-ming, et al. Properties of smokeless cross-linked modified double base propellant [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2003, 11(3): 130-133, 137.
- [15] Smith L C. An approximate solution of the adiabatic explosion problem [J]. *Thermochemica Acta*, 1975, 13(1): 1-6.

Preparation and Thermal Properties of 4, 4'-Azo-1H-1, 2, 4-triazol-5-one Ammonium Salt

XIAO Jian-xiong, DU Xiao-li, QIAO Li-yan, YAN Dong, XU Kang-zhen, HUANG Jie

(Department of Chemical Engineering, Shaanxi Key Laboratory of Physico-Inorganic Chemistry, Northwest University, Xi'an 710069, China)

Abstract: A new high-energy organic ammonium salt 4, 4'-azo-1H-1, 2, 4-triazol-5-one ammonium salt (AZTO · H₂O) was synthesized via potassium permanganate oxidation using 4-amino-1, 2, 4-triazol-5-one (ATO) as starting material. The thermal behaviors of AZTO · H₂O was studied by differential scanning calorimetry. The kinetic parameters of non-isothermal exothermic decomposition reaction were calculated by Kissinger method and Ozawa method. Results show that the decomposition heat, apparent activation energy and pre-exponential factor of AZTO · H₂O are 247.46 kJ · mol⁻¹, 177.80 kJ · mol⁻¹ and 10^{15.74} s⁻¹ respectively. The critical temperature of thermal explosion and molar heat capacity at 298.15 K for AZTO · H₂O is 233.10 °C and 271.45 J · mol⁻¹ · K⁻¹, respectively. The adiabatic time-to-explosion is between 72.8 s and 74.7 s. The kinetic equation describing the exothermic decomposition reaction of AZTO · H₂O is $\frac{d\alpha}{dT} = \frac{10^{15.74}}{\beta} \times 4(1-\alpha) [-\ln(1-\alpha)]^{\frac{3}{4}} \exp(-1.774 \times 10^5 / RT)$.

Key words: energetic materials; 4, 4'-azo-1H-1, 2, 4-triazol-5-one ammonium salt (AZTO · H₂O); thermal property; adiabatic time-to-explosion; preparation

CLC number: TJ55; O62

Document code: A

DOI: 10.11943/j.issn.1006-9941.2015.08.006