

文章编号:1006-9941(2022)03-0256-06

3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑的热分解行为

蔡佳乐,陈磊,章冲,朱广军,孙呈郭,胡炳成

(南京理工大学化学与化工学院,江苏南京210094)

摘要: 为了探究3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑的热分解行为,采用紫外-可见光吸收光谱结合量子化学计算,对3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑(HMPP)随温度升高的热分解过程进行了追踪,并通过差示扫描量热仪测试了HMPP的热稳定性。结果表明:HMPP的初始分解温度为-14℃,其在紫外-可见光区域由五唑环所产生的特征吸收峰在284 nm处,3,5-二甲基-4-羟基苯基叠氮(HMPA)上的叠氮基所产生的特征吸收峰在258 nm处;随着温度的升高,整个体系在284 nm处的吸收峰逐渐降低。为了探究HMPP紫外-可见光吸收光谱变化的具体原因,采用柱层析的方式分离HMPP的分解产物,利用核磁共振氢谱和X射线单晶衍射的方式对HMPP的分解产物进行了结构表征,确定了HMPP的主要分解产物为2,6-二甲基对苯醌和4-((4-羟基-3,5-二甲基苯基)氨基)-2,6-二甲苯环己-2,5-二烯-1-酮;并确定了在HMPP热分解结束后,整个体系的紫外-可见光吸收是由化合物4和5的紫外-可见光吸收叠加导致。

关键词: 3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑;紫外-可见光吸收光谱;分解产物;分解机理

中图分类号: TJ55

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2021189

1 引言

全氮类物质具有高密度、高生成焓、爆轰产物无污染等特点^[1],是新一代超高能含能材料的典型代表而受到各国重视。其中, N_5^- 离子因其具有环状的芳香性稳定结构、化学反应活性高的特质而成为全氮类物质的研究热点,由 N_5^- 离子构成的超高能盐有望成为性能优异的新型高密度含能材料。

N_5^- 离子的制备是合成超高能 N_5^- 离子盐的核心。2017年,胡炳成等^[2]以3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑(HMPP)为底物,采用间氯过氧苯甲酸和甘氨酸亚铁组成切断试剂对HMPP分子中的C—N键进行切断,首次合成出室温下稳定存在的 N_5^- 离子盐 $(N_5)_6(H_3O)_3(NH_4)_4Cl$,这是目前唯一大量合成 N_5^- 离

子的技术途径。然而, HMPP作为制备 N_5^- 离子的重要前驱体,由于其自身稳定性较差,导致 N_5^- 离子的制备过程存在着副产物多、安全性风险大、后处理繁琐、产物收率低等问题。目前,人们对于芳基五唑化合物的分解过程的研究较少;2014年,杨雨璋等^[3]利用了差示扫描量热仪结合拉曼和红外研究了对二甲氨基苯基五唑的热分解行为,但并未得到二甲氨基苯基五唑的热分解产物;Geiger U等^[4]通过低温紫外结合核磁共振探究了对羟基苯基五唑在低温下的光化学以及光分解行为,但并未研究对羟基苯基五唑的热分解行为;2015年,Hass Y等^[5]通过低温紫外研究了对甲氧基苯基五唑在低温下的光化学以及光分解,但未研究对甲氧基苯基五唑的热分解行为;Bazanov B等^[6]通过紫外研究了对二甲氨基苯基五唑在低温下、不同溶剂中的光解,但没有确定对二甲氨基苯基五唑在低温下的光分解产物;2016年,章冲等^[7]通过质谱研究了不同取代基数目及位置对芳基五唑化合物稳定性的影响,但并没有对芳基五唑化合物的热分解行为进行具体分析。因此,随着人们对 N_5^- 离子研究的深入,有必要对HMPP的热分解行为进行深入研究。

收稿日期:2021-07-14;修回日期:2021-08-27

网络出版日期:2022-01-12

基金项目:国家自然科学基金(21903044,11972178,21975128)

作者简介:蔡佳乐(1998-),女,硕士研究生,主要从事含能材料的合成以及机理研究。e-mail:cai1870518@163.com

通信联系人:章冲(1988-),男,教授,主要从事含能材料的合成以及性能研究。e-mail:czhang@njust.edu.cn

引用本文:蔡佳乐,陈磊,章冲,等.3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑的热分解行为[J].含能材料,2022,30(3):256-261.

CAI Jia-le, CHEN Lei, ZHANG Chong, et al. Thermal Decomposition of 3,5-Dimethyl-4-hydroxyphenyl Pentazole[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2022, 30(3):256-261.

基于此,本研究运用差示扫描量热仪确定了HMPP初始的分解温度;通过紫外分光光度计结合量子化学计算确定了HMPP的紫外-可见光吸收峰位置,随后通过HMPP的紫外-可见光吸收光谱随温度的变化探究了HMPP的具体热分解进程;最后利用柱层析分离得到HMPP的最终分解产物,并通过核磁共振氢谱和X射线单晶衍射确定了其结构;同时,结合实验结果讨论了HMPP可能的热分解机理。

2 实验部分

2.1 试剂与仪器

仪器:Bruker AVANCE III 500 MHz核磁共振仪; Bruker SMART APEX II X射线单晶衍射仪;PSL-1810 东京理化低温恒温水槽;Finnigan TSQ Quantum ultra AM质谱仪;EVOLUTION220 紫外可见分光光度计;DSC823 差示扫描量热仪。

试剂:盐酸(36%,国药集团化学试剂有限公司),叠氮化钠,亚硝酸钠(分析纯,上海麦克林生物化学公司),石油醚,乙酸乙酯,正己烷,乙醚,甲醇,无水乙腈,无水乙醇,四氢呋喃(所用溶剂均为分析纯,阿拉丁试剂有限公司),2,6-二甲基-4-氨基苯酚盐酸盐(自制)。

2.2 实验过程

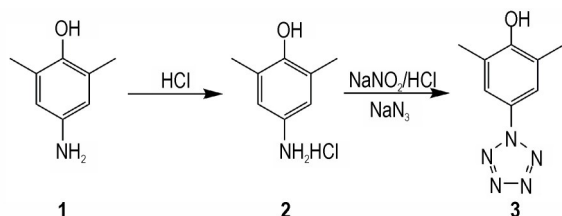
2.2.1 HMPP的合成

HMPP的制备参照文献[8]的方法,如 scheme 1 所示,将2,6-二甲基对羟基苯胺(1)酸化,得到2,6-二甲基-4-氨基苯酚盐酸盐(2),随后滴加NaNO₂溶液进行重氮化反应,再于-40℃下滴加NaN₃溶液得到HMPP(3)粗品,将HMPP粗品于-40℃下,用冷冻的乙醚和正己烷混合液多次洗涤,抽滤,得到白色目标产物。

3,5-二甲基-4-羟基苯基五唑:¹H NMR(CD₃OD): 7.67(2H, s), 2.24(6H, s); ESI-MS/MS(*m/z*, 55 eV), 190.08[M-H]⁻, 162.01, 134.05, 106.04。

2.2.2 HMPP的热性能测试

采用差示扫描量热仪(DSC)研究了HMPP的热稳



Scheme 1 Synthetic route of HMPP

定性(N₂气氛,式样量1.19 mg,升温速率5℃·min⁻¹,温度区间:-25~50℃)。

2.2.3 紫外-可见光吸收测试

取30 mg HMPP固体溶解在50 mL -25℃的冰甲醇中,搅拌均匀,配制成澄清溶液,置于100 mL长颈烧瓶中,并放置在低温反应器中保温,将低温探头放入长颈烧瓶中,在-25℃低温下进行紫外-可见光吸收测试;随后将低温反应器缓慢升温,每间隔5℃进行一次紫外可见光吸收测试。

2.2.4 分解产物的分离与晶体的培养

将洗涤后的目标产物2 g完全溶解于无水甲醇,敞口放置在25℃下,确定溶液中不再有气泡冒出后,通过薄层色谱和柱层析(*v*_{乙酸乙酯}:*v*_{石油醚}=1:4)分离HMPP的分解产物,利用溶剂挥发、扩散的方法对其分解产物进行单晶培养。

2.2.5 紫外-可见光吸收模拟

本研究所涉及到的计算采用Gaussian 09^[9]程序包,运用密度泛函理论(DFT),在B3LYP/6-31G**水平下进行计算,对分子结构进行几何优化,以确保其势能面上为最小值且振动无虚频。

3 结果与讨论

本研究采用差示扫描量热法(DSC)来确定HMPP初始分解温度,并通过对HMPP在甲醇溶液中分解过程的观察和不同温度下紫外-可见光吸收光谱的变化,结合量子化学计算和质谱检测,确定HMPP和HMPA的特征紫外-可见光吸收位置;分离并表征HMPP的最终分解产物,并对HMPP的分解机理进行推测。

3.1 HMPP初始分解温度分析

采用DSC探究了HMPP样品在-25~50℃下的热稳定性,结果如图1所示。在-14~4.6℃的温度区间内,DSC曲线上出现明显的放热峰,峰值温度为-8.1℃。

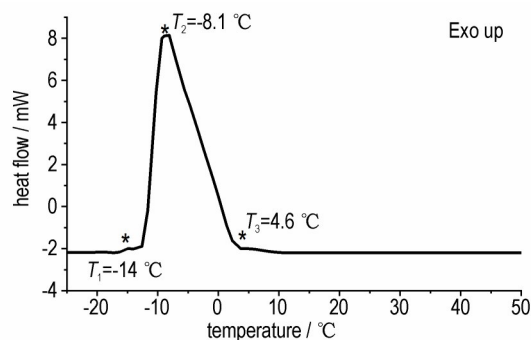


图1 HMPP的DSC曲线

Fig.1 DSC plot of HMPP

可以推断 HMPP 的放热分解开始于 $-14\text{ }^{\circ}\text{C}$, 并随着温度的升高而增强, 当温度升高至 $4.6\text{ }^{\circ}\text{C}$ 以上, HMPP 几乎完全分解。

3.2 HMPP 分解过程的光谱分析

紫外-可见光吸收测试结果如图 2 所示。当温度在 $-25\sim-15\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, HMPP 甲醇溶液的紫外-可见光吸收图谱几乎不发生任何变化: HMPP 在甲醇中的紫外-可见光区域产生了两个吸收峰, 分别在 214 nm 处和 284 nm 处; 214 nm 处的吸收峰是由苯环上大 π 键中电子的 $\pi\rightarrow\pi^*$ 跃迁所引起, 284 nm 处的吸收峰则是由五唑环上 $\text{N}=\text{N}$ 双键中电子的 $n\rightarrow\pi^*$ 跃迁而产生的。温度升高至 $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$, HMPP 在 284 nm 处的吸收峰形状和强度均发生变化: 样品在 284 nm 处的吸收峰强度继续下降, 而在 258 nm 处出现了新的吸收峰; 根据前人的研究结论^[10-14], 芳基五唑化合物的热分解应首先分解释放 N_2 , 得到相应的芳基叠氮化合物, 因此新出现的 258 nm 处的吸收峰应该来自 3, 5-二甲基-4-羟基苯基叠氮 (HMPA) 上 $\text{N}=\text{N}$ 双键中的 $n\rightarrow\pi^*$ 跃迁。随着温度继续升高, 样品在 284 nm 处的吸收峰持续下降, 在 258 nm 处的吸收峰持续上升, 且 214 nm 处的吸收峰有略微的下降。当温度升至 $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ 以上, 样品的紫外-可见光吸收曲线几乎不再变化: 只在 214 nm 和 258 nm 附近两处有比较强烈的紫外-可见光吸收, 在 284 nm 处的吸收峰几乎消失, 仅在 287 nm 至 313 nm 处有微弱的肩峰。此时, 通过质谱检测发现 HMPP ($m/z=190$)、HMPA ($m/z=162$) 信号完全消失, 说明此时出现了新的分解产物。

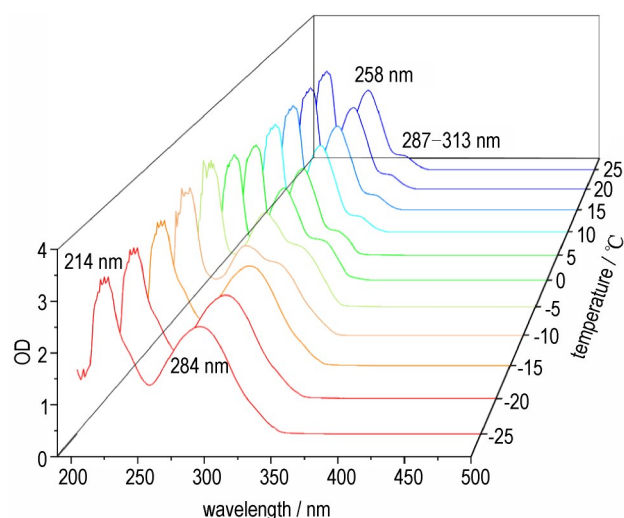


图 2 不同温度下 HMPP 紫外-可见光光谱图

Fig.2 Spectra of UV-visible light absorption of HMPP methanol solution with temperature

通过 Gaussian 09^[8] 程序在 B3LYP/6-31 G** 水平下对 HMPP 和 HMPA 在甲醇溶液中的紫外吸收进行了优化模拟, 结果如图 3 所示。理论上, HMPP 结构中由五唑环产生的紫外-可见光吸收在 306 nm 处 (图 3a), 与实际测试结果 (284 nm) 接近; 而 HMPA 结构中由叠氮基产生的紫外-可见光吸收理论值在 255 nm 附近 (图 3b), 和实际测试结果 (258 nm) 吻合。理论计算中, HMPP 和 HMPA 中苯环上的特征吸收分别在 182 nm 和 187 nm 附近, 在真空紫外区。但实际测试过程中, 由于苯环上连接的五唑基和叠氮基与苯环产生共轭效应, 因此使苯环上的特征吸收发生红移至近紫外区 (214 nm)。

由紫外-可见光吸收测试实验结果可以确定, HMPP 在温度低于 $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 不发生分解, 随着温度逐渐升高, HMPP 首先分解形成 HMPA, 随后继续分解, 生成其他分解产物。

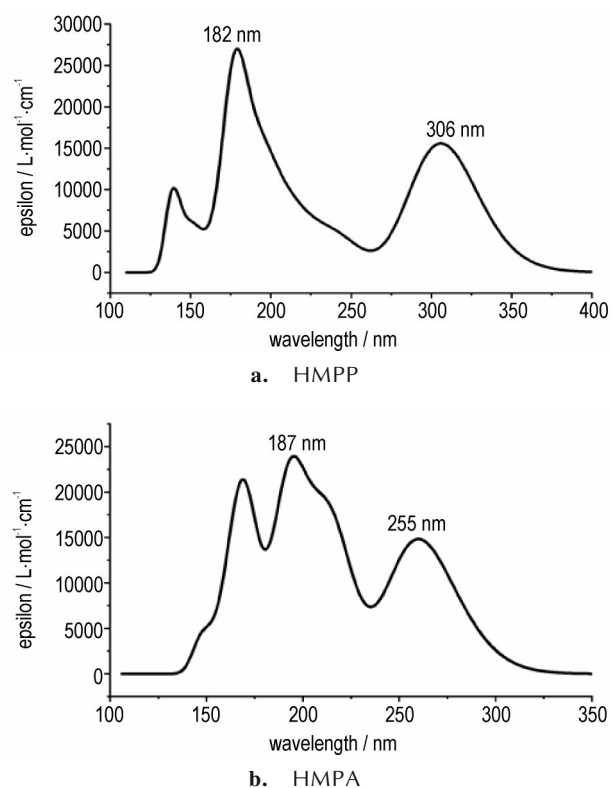


图 3 Gaussian 模拟的 HMPP 和 HMPA 的紫外-可见光吸收图

Fig.3 Gaussian simulated UV-Vis absorption graph of HMPP and HMPA

3.3 HMPP 热分解结果分析

为了探究 HMPP 在 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 室温下最终的分解产物, 将彻底分解完全的 HMPP 甲醇溶液进行柱层析分离 ($v_{\text{乙酸乙酯}}:v_{\text{石油醚}}=1:4$), 得到金黄色的化合物 4 和深酒红

色的化合物 5。

将化合物 4 和 5 取少量溶解在无水甲醇中,在 25 °C 室温下进行紫外-可见光吸收测试,结果如图 4 所示。化合物 4 的最大吸收峰位置在 254 nm 左右;化合物 5 的第一个紫外-可见光吸收峰在 207 nm 左右,随后在 272 nm 处出现强度略微弱一些的吸收峰;通过分析化合物 4、5 的紫外-可见光吸收峰(如图 4)可知:化合物 4 仅在 K 带有吸收峰,猜测其结构中含有共轭烯烃;化合物 5 在 K 带有非常强烈的吸收,且在 B 带有中等强度的吸收,说明化合物 5 应是带有共轭体系的芳香族化合物。

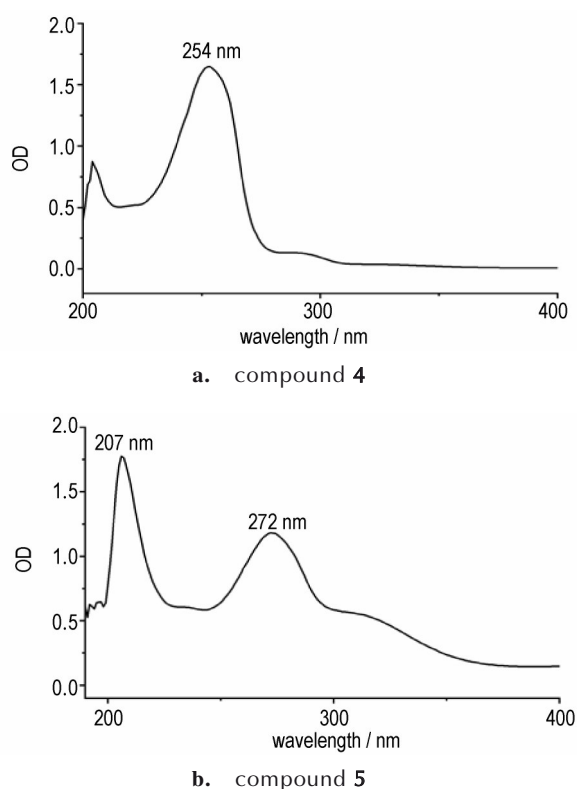


图 4 化合物 4、5 的紫外-可见光吸收图谱

Fig.4 UV-vis absorption spectrum of compound 4 and 5

对应到 HMPP 溶液彻底分解之后的紫外-可见光吸收曲线可知,由于分解过程中化合物 4、5 的生成,两者的紫外-可见光吸收谱带叠加,最终使体系的紫外-可见光吸收主要发生在 214 nm 和 258 nm 处,同时在 287 nm 至 313 nm 处有微弱的肩峰。

将化合物 4 和 5 分别置于在乙腈/乙酸乙酯混合溶液中,缓慢挥发。最终得到金黄色单晶(化合物 4)和深酒红色单晶(化合物 5)。通过核磁共振氢谱和 X-射线单晶衍射确定物质的结构式:化合物 4 为 2,6-二甲基对苯醌;化合物 5 为 4-((4-羟基-3,5-二甲基苯基)氮

基)-2,6-二甲基环己-2,5-二烯-1-酮,如图 5 所示。

化合物 4: $^1\text{H NMR}$ (500 MHz, $\text{DMSO-}d_6$) δ : 6.64(m, 2H), 1.94 (s, 6H)。

化合物 5: $^1\text{H NMR}$ (500 MHz, $\text{DMSO-}d_6$) δ : 8.47(s, 1H), 6.76 (s, 4H), 2.48–2.05 (m, 12H)。

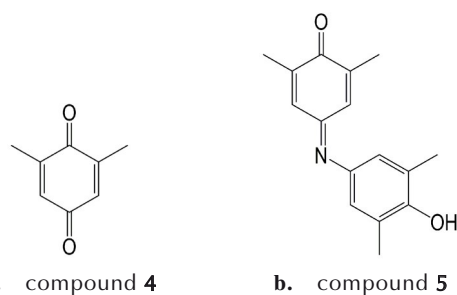


图 5 HMPP 的分解产物结构式

Fig.5 Structural formula of decomposition products of HMPP

化合物 4 和 5 的分子结构和分子在晶胞中的堆积如图 6 和图 7 所示。测试结果表明:化合物 4 的晶体结构属于单斜晶系,空间群为 P_12_1/C_1 ,其苯环上含有两个羰基和两个甲基,呈轴对称结构。晶体学参数为: $a=10.544(10)$ Å, $b=3.923(4)$ Å, $c=16.998(16)$ Å, $\alpha=90^\circ$, $\beta=93.160(19)^\circ$, $\gamma=90^\circ$, $Z=4$, $V=702.04(12)$ Å³。化合物 5 的晶体结构属于单斜晶系,空间群为 P_12_1/C_1 ,由 N 原子连接两个环状结构组成,其中一个环状结构对位连接的是酚羟基,另一个则属于醌类结构,两个环属于不同平面。晶体学参数为: $a=7.666(7)$ Å, $b=18.264(16)$ Å, $c=11.916(10)$ Å, $\alpha=90^\circ$, $\beta=99.763(14)^\circ$, $\gamma=90^\circ$, $Z=4$, $V=1644.22(2)$ Å³。

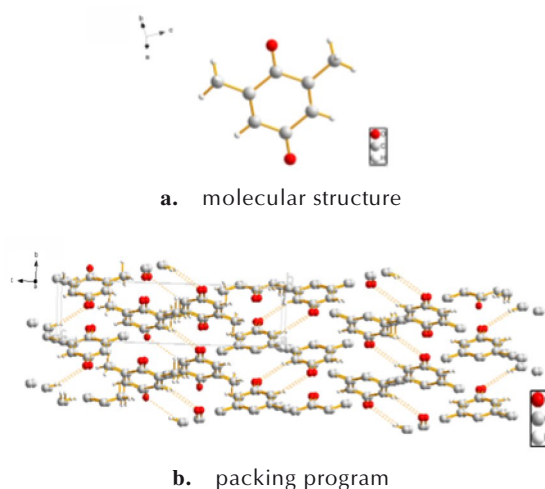


图 6 化合物 4 的分子结构图和晶胞堆积图

Fig.6 Molecular structure and packing program diagram of compound 4

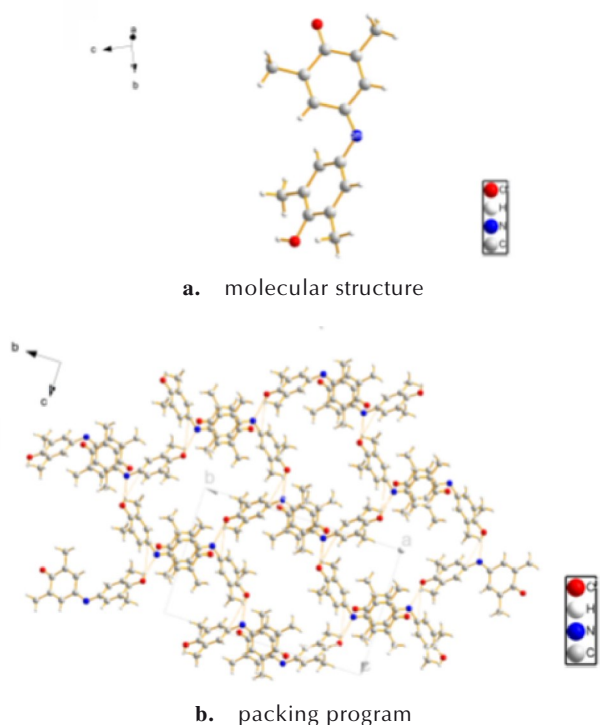
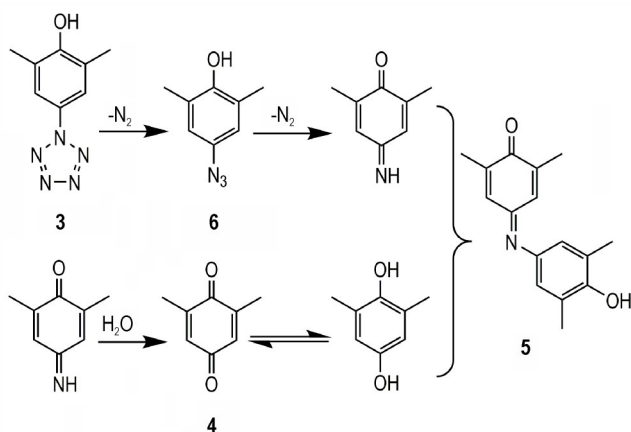


图7 化合物5的分子结构图和结构晶胞堆积图

Fig.7 Molecular structure diagram and packing program diagram of compound 5

3.4 机理分析

通过对已经得到的HMPP的热分解物质的分析,我们对HMPP的分解过程进行了推测,如Scheme 2所示:



Scheme 2 Possible decomposition process of HMPP

首先,由于五唑环N-N键键能较小,HMPP的五唑环极易脱去一分子氮气,得到HMPA。结合图2中的紫外-可见光吸收测试结果可以看到:随着五唑环的裂解,属于HMPP的紫外吸收峰(284 nm)强度降低,出现了由HMPA产生的新的吸收峰(258 nm)。随后

HMPA继续脱去氮气,得到2,6-二甲基-4-亚氨基-苯醌,该结构极不稳定,极易水解变成2,6-二甲基对苯二醌(化合物4),化合物4发生还原反应生成2,6-二甲基-4-羟基苯酚,然后再与2,6-二甲基-4-亚氨基-苯醌发生脱水缩合反应生成化合物5。当HMPP分解完全,体系中只剩下化合物4和5,两者的紫外-可见光吸收谱带叠加,最终使体系的紫外-可见光吸收主要发生在214 nm和258 nm处,同时在287 nm至313 nm处有微弱的肩峰^[15-17]。

4 结论

(1)利用差示扫描量热仪确定了HMPP的初始分解温度在-14℃。

(2)利用紫外-可见光光谱与质谱检测的综合分析,结合量子化学计算,确定了HMPP和HMPA在近紫外光区的特征吸收峰位置(HMPP:284 nm;HMPA:258 nm)。

(3)通过分析HMPP的紫外-可见光吸收光谱随温度的变化,确定了HMPP的热分解过程:首先脱去N₂生成HMPA,随后HMPA继续分解,最终得到2,6-二甲基对苯二醌和4-((4-羟基-3,5-二甲基苯基)氨基)-2,6-二甲基环己-2,5-二烯-1-酮。本研究为以后优化芳基五唑化合物的合成过程,分析后续芳基五唑切断反应的机理,以及副产物再利用等方向提供了理论参考。

参考文献:

- [1] 李玉川, 庞思平. 全氮型超高能含能材料研究进展[J]. 火炸药学报, 2012, 35(1): 1-8.
LI Yu-chuan, PANG Si-ping. Progress of all-nitrogen ultrahigh-energetic materials [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2012, 35(1): 1-8.
- [2] Zhang C, Sun C G, Hu B C, et al. Synthesis and characterization of the pentazolate anion cyclo-N₅⁻ in (N₅)₆(H₃O)₃(NH₄)₄Cl [J]. *Science*, 2017, 355(6323): 374-376.
- [3] Yang Y Z, Li Y C, Zhang R B, et al. The thermal stability of *p*-dimethylaminophenylpentazole [J]. *RSC Advances*, 2014, 4(101): 57629-57634.
- [4] Geiger U, Haas Y, Grinstein D. The photochemistry of an aryl-pentazole in liquid solutions: The anionic 4-oxidophenylpentazole (OPP) [J]. *Journal of Photochemistry and Photobiology B-Biology*, 2014, 277(5): 53-61.
- [5] Geiger U, Haas Y. Photochemistry of aryl pentazoles: *para*-methoxyphenylpentazole [J]. *The Journal of Physical Chemistry. B*, 2015, 119(24): 7338-7348.
- [6] Bazanov B, Haas Y. Solution photochemistry of [*p*-(dimethylamino)phenyl]pentazole (DMAPP) at 193 and 300 nm [J]. *The Journal of Physical Chemistry. A*, 2015, 119(11): 2661-2671.

- [7] 章冲, 胡炳成, 刘成, 等. 对羟基苯基五唑及其衍生物的合成与稳定性[J]. 含能材料, 2016, 24(8): 769-773.
ZHANG Chong, HU Bing-cheng, LIU Cheng, et al. Synthesis and stability of *p*-hydroxyphenylpentazole and its derivatives [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(8): 769-773.
- [8] Zhang C, Sun C G, Hu B C, et al. Investigation on the stability of multisubstituted arylpentazoles and their influence on the generation of pentazolate anion[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2016, 34(1): 103-111.
- [9] Frisch J, Trucks G, Schlegel W, et al. Gaussian 09[CP], Revision E.01, Gaussian: Wallingford, 2016.
- [10] 张佳利, 庞思平, 李玉川, 等. 1-(对二甲氨基苯基)五唑的合成研究[J]. 含能材料, 2006, 14(5): 355-357.
ZHANG Jia-li, PANG Si-ping, LI Yu-chuan, et al. Synthesis of 1-(*p*-dimethylaminophenyl) pentazole [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2006(5): 355-357.
- [11] 毕福强, 许诚, 樊学忠, 等. 对叔丁基苯基五唑的合成及分解动力学[J]. 火炸药学报, 2012, 35(2): 15-18.
BI Fu-qiang, XU Cheng, FAN Xue-zhong, et al. Synthesis and decomposition kinetics of *p*-tert-butylphenylpentazole [J]. *Chinese Journal of Explosive and Propellants*, 2012, 35(2): 15-18.
- [12] 王靖, 高贫, 王桂香, 等. 直链取代五唑共价化合物的稳定性和热解机理理论研究[J]. 含能材料, 2021, 29(6): 473-481.
WANG Jing, GAO Pin, WANG Gui-xiang, et al. Theoretical investigations on the stability and pyrolysis mechanism of covalent pentazoles with a linear substituent [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2021, 29(6): 473-481.
- [13] Ugi, I. Pentazole, V. Zum mechanism der bildung und des zerfalls von phenyl-pentazole. *Tetrahedron* 1963, 19: 1801-1803.
- [14] Peter P, Martin D, Rory C, et al. Dinitrogen release from aryl-pentazole: A picosecond time-resolved infrared, spectroelectrochemical, and DFT computational study [J]. *The Journal of Physical Chemistry. A*, 2013, 117(48): 12759-12769.
- [15] Xu Y G, Wang Q, Shen C, et al. A series of energetic metal pentazolate hydrates [J]. *Nature*, 2017, 549(7670): 78-81.
- [16] Zhang W J, Zhang T L, Guo W, et al. Theoretical studies of pentazole-based compounds with high detonation performance [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2019, 37(4): 433-444.
- [17] 邵艳丽, 王乾, 王鹏程, 等. 五唑钠的制备工艺及C-N键切断机理[J]. 含能材料, 2018, 26(11): 925-930.
SHAO Yan-li, WANG Qian, WANG Peng-cheng, et al. Preparation process and mechanism of cutting off the C-N research of sodium pentazole salt [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2018, 26(11): 925-930.

Thermal Decomposition of 3,5-Dimethyl-4-hydroxyphenyl Pentazole

CAI Jia-le, CHEN Lei, ZHANG Chong, ZHU Guang-jun, SUN Cheng-guo, HU Bing-cheng

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

Abstract: In order to explore the thermal decomposition behavior of 3,5-dimethyl-4-hydroxyphenylpentazole, UV-visible light absorption spectrum combined with quantum chemical calculation was adopted. The thermal decomposition of 3,5-dimethyl-4-hydroxyphenylpentazole (HMPP) with increasing temperature was tracked. The thermal stability of HMPP was tested by differential scanning calorimeter. The results show that the initial decomposition temperature of HMPP is $-14\text{ }^{\circ}\text{C}$, and the characteristic absorption peak produced by the pentazole ring is at 284 nm in the UV-visible region. The characteristic absorption peak of 3,5-dimethyl-4-hydroxyphenyl azide (HMPA) is 258 nm. With the increase of temperature, the absorption peak of the whole system decreases gradually at 284 nm. In order to explore the specific reasons for the change of HMPP ultraviolet-visible light absorption spectrum, the decomposition products of HMPP were separated by column chromatography. The main decomposition products of HMPP were 2,6-dimethyl-*p*-benzoquinone and 4-(4-hydroxy-3,5-dimethylphenyl)amino)-2,6-dimethylcyclohexa-2,5-diene-1-one. After the thermal decomposition of HMPP, the UV-visible absorption of the whole system was determined to be caused by the superposition of UV-visible absorption of compounds **4** and **5**.

Key words: 3,5-dimethyl-4-hydroxyphenyl pentazole; ultraviolet-visible absorption spectrum; thermal decomposition; decomposition mechanism

CLC number: TJ55

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2021189

(责编:高毅)