

文章编号: 1006-9941(2014)02-0235-05

含 AP 非理想炸药爆轰产物分析与计算

王彩玲, 赵省向, 贾 铭, 刁小强, 戴致鑫

(西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065)

摘要: 以黑索今(RDX)、氧化剂高氯酸铵(AP)和可燃剂铝粉(Al)组成的非理想炸药体系为研究对象,采集了8个非理想炸药在密闭爆炸容器中爆炸产生的气相产物和凝聚相产物,用热分析-质谱联用技术、傅里叶红外光谱仪、气相色谱仪和X射线荧光分析仪等分析了爆轰气相产物和凝聚相产物。用盖斯定律计算了非理想炸药的爆热,并与试验值进行了比较。结果表明,在这种爆炸条件下,爆轰产物主要由 N_2 、 H_2 、 CO_2 、 H_2O 、 CH_4 、CO等气体和Al、 Al_2O_3 、 $AlCl_3$ 、C等固体组成。随着非理想炸药正氧平衡数的增加, N_2 、 H_2O 、 CO_2 、 O_2 和HCl的生成量一直增加,而 Al_2O_3 、 $AlCl_3$ 、 H_2 和CO的生成量则先增加后减小,Al和C的生成量则一直减小。氧平衡数为-22.4%~-29.7%之间的非理想炸药配方的爆热测量值在8773~8813 J·g⁻¹之间,计算值和测量值相对误差小于1%,两者符合较好。

关键词: 物理化学; 非理想炸药; 热分解; 爆炸产物; 爆热; 氧平衡

中图分类号: TJ55; O64

文献标志码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.02.022

1 引言

确定炸药爆炸反应产物的组成,通过爆轰产物预估炸药爆轰性能,在理论上和实际工作中都具有重要意义。目前,爆轰产物的计算通常采用吕-查德(简称L-C)和布伦克力-威尔逊(简称B-W)两种经验方法^[1]。这两种方法对含CHNO炸药爆炸反应方程式的确定较好,但对于含Cl和Al元素的炸药,比如含氧化剂高氯酸铵(AP)、可燃剂Al或B的爆轰反应产物较为复杂的非理想复合炸药体系,以上两种经验方法已不适用。因此,国内外研究人员采用实验测定炸药爆炸反应产物。20世纪70年代,Fred Volk等^[2-7]采用气-质联用仪(GC-MC)和质量守恒原则分析了含AP/Al和含Al的非理想炸药的爆轰产物相对含量,我国部分单位也相继开展了这方面的工作^[8],但含AP/Al非理想炸药体系爆轰产物的分析,以及爆轰产物和爆热的计算研究尚未见报导。

含AP/Al非理想炸药爆轰时多个化学反应同时进行,而且与炸药的爆炸环境、引爆条件等因素都有很大的关系,因而无论从实验上还是理论上,精确地确定爆炸反应产物的成分和生成量都较为困难和复杂^[1]。

为了能够较为准确地获得含AP/Al的非理想炸药反应产物及组成以及产物组成与爆热之间的关系,本研究采用傅里叶红外光谱(FTIR)、气相色谱(GC)和X射线荧光分析(XRF)等联用分析技术,结合非理想炸药热分析研究结果,确定了爆轰产物种类,通过化学反应平衡、质量守恒原则计算了爆轰产物生成量,并利用盖斯定律计算了爆热。

2 实验

2.1 材料与仪器

RDX,II类,甘肃银光化工公司; AP,100 μm,西安航天化学动力厂; Al粉,球形颗粒,粒度 d_{50} 为(6±1.5) μm,活性大于99.0%,西安航天化学动力厂。

傅里叶变换红外光谱仪: NEXUS 870型,美国Thermo-Fisher公司。测试范围为4000~400 cm⁻¹,红外光谱分辨率为4 cm⁻¹,光谱采集速率5 files/s, 2 scans/file,采样量为50 mL,检测器为DTGS型。

气相色谱-质谱仪: QP 2010 plus-GC/MS,日本岛津; 色谱柱为DB-5MS 30 m,0.25 μm×0.32 mm ID,柱温为40~200 °C,升温速率为40 °C·min⁻¹,进样口温度为160 °C,进样量为1 mL; 质谱离子源为电子轰击源(EI),电子轰击能量为70 eV,质量范围为1~100 Da,全扫描方式,传输线温度为250 °C,离子源温度为200 °C。

收稿日期: 2013-05-05; 修回日期: 2013-10-11

作者简介: 王彩玲(1971-),女,副研究员,主要从事混合炸药配方及工艺研究。e-mail: wcl2054@163.com

气相色谱仪: 6890 气相色谱仪, 带 TCD 检测器, 美国安捷伦公司; H_2 、 N_2 和 CO 采用 5A 分子筛柱色谱柱, 柱温 $150\text{ }^\circ\text{C}$, 进样口温度 $160\text{ }^\circ\text{C}$, 检测池温度 $152\text{ }^\circ\text{C}$, 柱前压 15 psi 进样量 $10\text{ }\mu\text{L}$; CO_2 测量采用 plot 色谱柱, 柱温 $35\text{ }^\circ\text{C}$, 进样口温度 $80\text{ }^\circ\text{C}$, 检测池 $62\text{ }^\circ\text{C}$, 柱前压 2.90 psi, 进样量 $10\text{ }\mu\text{L}$ 。

热-质联用仪: 449C TG 热分析仪, 德国 Netzsch 公司; QMS403 四极杆质谱仪, 德国 Netzsch 公司。试样为 2 mg, Al 坩埚敞口, 温度范围为 $50\sim 550\text{ }^\circ\text{C}$, 升温速率为 $10\text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$, 与质谱连接线和接口温度为 $250\text{ }^\circ\text{C}$; 质谱试验条件: 质量分辨率 $\leq 0.5\text{ amu}$, 检测极限 $>1\times 10^{-6}$, 取样口温度为 $250\text{ }^\circ\text{C}$, 载气为 Ar, 流量为 $75\text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ 。

X 荧光光谱仪: S4 Pioneer, 德国 Bruker 公司。测量条件为端窗铍靶 X 射线管 (窗厚 $75\text{ }\mu\text{m Be}$), 分析线 K_{α_1} 。测试强度为以十倍于仪器背景噪音的强度为基测量特征 X 射线的能量。

2.2 试样的制备

以 RDX 为主体炸药, 添加不同含量的 Al 粉和 AP 组成系列非理想炸药, 采用直接工艺法制造造型粉 (编号见表 1), 将造型粉冷压, 制成相对密度为 97% 的药柱。采用 GJB772A-1997 401.2 液体静力称量法测量药柱密度, 统一编号炸药, 选择密度误差在 $\pm 0.003\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 的药柱备用。样品爆热测试完毕后, 待爆热弹内气体产物温度与环境温度达到平衡后, 使用气体采样袋收集爆热弹内最终气相产物, 同时采集爆热弹底部爆轰反应产生的凝聚相产物。

表 1 含 AP 和 Al 非理想炸药配方

Table 1 Formulation of non-ideal explosives containing AP and Al

No.	oxygen balance (in terms of CO) / %	content / %			
		RDX	AP	Al	organic binder
1 [#]	16.9	27.1	69.9	-	3.0
2 [#]	4.7	27.0	60.0	9.9	3.1
3 [#]	-7.7	27.1	49.9	20.0	3.0
4 [#]	-22.4	27.0	38.0	32.0	3.0
5 [#]	-26.1	26.9	35.0	35.0	3.1
6 [#]	-29.7	27.0	32.1	37.9	3.0
7 [#]	-38.5	26.8	25.0	45.2	3.0
8 [#]	-44.7	26.9	20.0	50.1	3.0

2.3 试验方法

(1) 爆轰气相产物分析方法

采用傅里叶变换红外光谱仪分析红外活性爆轰产物

气体, 采用气相色谱-质谱 (GC-MS) 联用技术作为辅助手段分析爆轰气体产物中的红外不活性气体。根据分析结果, 确定爆轰产物主要组分。利用 GC 定量分析爆轰气相产物主要组分的含量, 并以 CO_2 气体为内标物, 通过 CO_2 与其他气体产物红外光谱特征吸收峰强度及摩尔吸光系数之比推算 CH_4 、 C_2H_4 和 HCN 等爆轰气体产物的体积分数^[9]。采用重量法准确定量 H_2O 。

(2) 爆轰凝聚相产物分析方法

采用 X 射线荧光分析 (XRF) 无标样定量分析方法半定量地研究了非理想炸药爆轰凝聚相产物中可能存在的元素和近似含量。

(3) RDX/AP/Al 非理想炸药热分解产物研究

为了探讨含 AP 和 Al 非理想炸药爆轰反应可能生成的产物, 采用 TG-MS 联用分析技术研究了不含 Al 的 RDX/AP 体系 (1[#]样品) 和加入 Al 后使 Al 与 AP 质量比为 1:1 的 RDX/AP/Al 体系 (5[#]样品) 的热分解产物。

(4) 爆热测量方法

爆热按照 GJB772A-1997 方法 701.1 进行测试。在爆热弹内无氧环境中引爆试样, 以蒸馏水为测温介质, 测定水温的升高量。根据量热计的热容量及温升值, 求出单位质量的试样在给定条件下的爆热。

3 结果与讨论

3.1 爆轰产物分析

(1) 爆轰气相产物定性分析

FTIR 和 GC-MS 爆轰气体产物定性结果见表 2。从表 2 可看出, 无论是正氧平衡炸药还是负氧平衡炸药, 其爆轰气体产物中均含有 N_2 、 H_2 、 CO_2 、 H_2O 、 CH_4 、 CO 和 C_2H_2 七种物质, 从表 2 还可看出, 当非理想炸药正氧平衡较大 (1[#]样品) 时, 炸药爆轰产物中含有反应剩余的 O_2 , 在零氧平衡附近时 (2[#]样品), 爆轰气体产物中无氧气剩余, 且非理想炸药为负氧平衡时 (3[#]~8[#]), 爆轰气体产物中有 HCN 生成。爆轰气体产物中未检出 HCl 气体, 这是由于 HCl 气体在常温下易溶于液态 H_2O 中, Cl 元素应全部存在于爆轰凝聚相产物中。

(2) 爆轰气相产物定量分析

表 3 列出了采用气相色谱外标法定量测定的爆轰产物主要成分 N_2 、 H_2 、 CO 和 CO_2 的体积分数, 同时也列出了以已知 CO_2 含量为内标, 采用 FRIT 法半定量测定的 CH_4 、 C_2H_4 和 HCN 的体积分数, 采用重量

法定量测定 H₂O 的体积分数测定结果也列于表 3 中。

表 2 爆轰气相产物的 FTIR 和 GC-MS 的分析结果

Table 2 Detonation gas products analyzed by FTIR and GC-MS

No.	components
1 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、O ₂
2 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄
3 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN
4 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN
5 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN
6 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN
7 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN
8 [#]	N ₂ 、H ₂ 、CO ₂ 、H ₂ O、CH ₄ 、CO、C ₂ H ₄ 、HCN

表 3 爆轰气相产物定量分析结果

Table 3 Quantitative analysis of detonation gas products

No.	volume fraction/%							
	N ₂	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	C ₂ H ₄	HCN	H ₂ O(g)
1 [#]	50.4	4.0	9.0	34.7	0.01	0.32	/	0.01
2 [#]	45.2	9.1	16.2	24.8	0.05	0.42	/	0.03
3 [#]	40.5	28.6	26.3	5.1	0.05	0.15	0.04	0.02
4 [#]	30.5	52.5	18.5	1.1	0.07	0.06	0.08	0.03
5 [#]	29.1	54.5	15.5	0.8	0.09	0.05	0.13	0.03
6 [#]	29.5	56.0	10.2	0.5	0.15	0.11	0.31	0.04
7 [#]	30.5	58.0	8.5	0.2	0.22	0.08	0.40	0.03
8 [#]	31.5	58.6	7.1	0.1	0.31	0.06	0.52	0.03

从表 3 可知,气相爆轰产物中 CO₂、CO、N₂ 和 H₂ 含量较高,其他组分如 CH₄、HCN、C₂H₄ 及 H₂O(g) 含量很少,小于 5%(体积分数)。因此,在爆轰产物的计算中可忽略 CH₄、HCN、C₂H₄ 及 H₂O(g)。

(3) 爆轰凝聚相产物分析

XRF 实验结果见表 4。从表 4 可看出,炸药爆轰凝聚相产物由 Al、Cl、O 元素和少量的 C 元素组成,且随着氧平衡负氧程度的增加,Al 和 C 元素相对含量增加,Cl 和 O 元素相对含量减少。产物中未检出 N 元素。

表 4 爆轰凝聚相产物的 XRF 分析结果

Table 4 Detonation condensed phase products analyzed by XRF

element	content/%							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Al	0.00	10.50	19.60	31.12	34.53	38.75	45.92	50.92
Cl	1.92	1.55	1.45	1.33	1.22	1.04	0.88	0.69
O	98.08	87.95	78.95	67.18	63.87	59.79	52.74	47.90
C	-	-	-	0.34	0.38	0.42	0.46	0.49

为了进一步推断 RDX/AP/Al 体系爆轰凝聚相产物,对 RDX/AP 体系和 RDX/AP/Al 体系的热分解产

物进行了对比研究。结果如图 1 和图 2 所示。

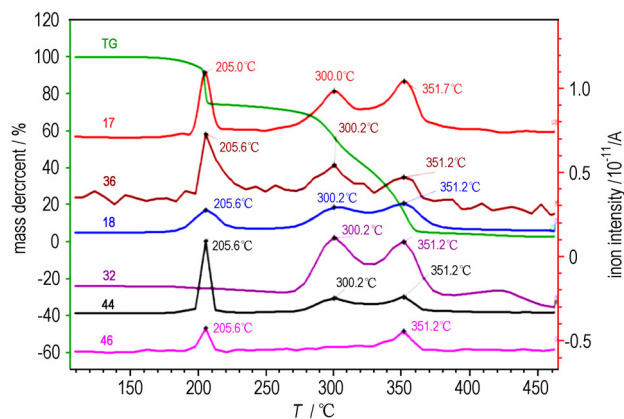


图 1 RDX/AP 体系 TG-MS 曲线

Fig. 1 TG-MS curves of RDX/AP system

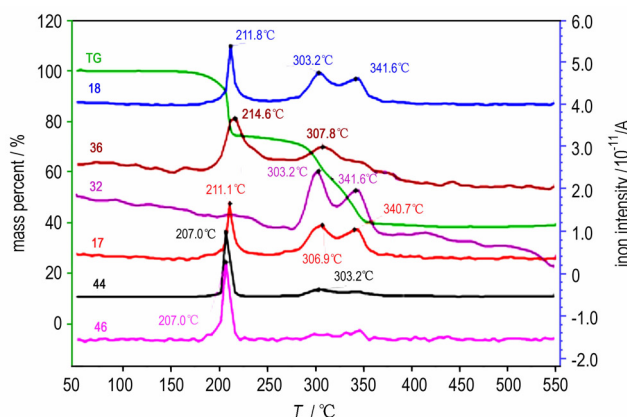


图 2 RDX/AP/Al 体系 TG-MS 曲线

Fig. 2 TG-MS curves of RDX/AP/Al system

根据特征质核比,可以认为不同质核比所表示的气体产物分别为 17、18 (H₂O), 32 (O₂), 36 (HCl), 44 (N₂O、CO₂), 46 (NO₂)。比较图 1 和图 2 可知,RDX/AP 体系分解有两个阶段,Al 粉的加入使 RDX/AP 体系第一阶段分解气体产物离子流峰温都有不同程度的后移,第二阶段分解气体产物离子流峰温都有不同程度的前移,致使原可明显分辨的双峰变成肩峰,分解峰的结束温度也都明显下降。也因 Al 的作用,RDX/AP 体系的 TG 曲线上第一个台阶的质量损失有所增加,第二台阶质量损失过程提前结束。此外,加入铝粉后,RDX/AP 体系第二阶段分解气体 (H₂O、O₂、HCl) 的离子流强度减小,甚至消失 (CO₂、NO₂)。实验结果说明,Al 粉对 RDX/AP 体系分解的影响明显,Al 粉与以上分解产物发生了氧化还原反应,生成相应的氧化产物 (Al₂O₃、AlCl₃ 等) 和还原产物 (H₂、N₂、CO 等)。

3.2 爆轰反应产物的计算

3.2.1 爆轰产物化合态的确定

由于含 AP 非理想炸药爆轰反应过程复杂性和测试水平的局限性^[11]。本研究根据爆轰气体产物和凝聚相产物的定性、定量及爆轰产物存在化合态的分析结果,确定了含 AP 非理想炸药的爆轰反应产物的化合态。

(1) 炸药中的 N 元素在爆轰反应过程中完全生成 N_2 , Cl 元素首先完全生成 HCl, 当产物体系中仍有未被氧化完全的 Al 时, Al 与 HCl 发生反应生成 $AlCl_3$ 。

(2) H 元素仅存在于 H_2 、液态 H_2O 、HCl 中。

(3) O 元素以 CO 、 CO_2 、 H_2O 、 Al_2O_3 化合态存在。

(4) C 元素以 CO 、 CO_2 、C 三种化合态存在。

(5) Al 以单质 Al、 Al_2O_3 、 $AlCl_3$ 三种化合态存在。

3.2.2 爆轰产物的计算

在以上近似处理的基础上,结合爆轰气相产物分析结果,采用质量守恒原则^[1]计算了表 1 配方的爆轰产物生成量,绘制了炸药氧平衡与炸药爆轰产物生成量关系曲线,如图 3 所示。

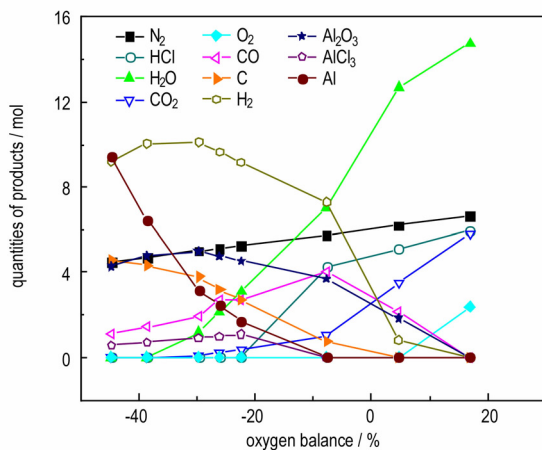


图 3 含 AP 和 Al 非理想炸药氧平衡数与爆轰产物生成量的关系曲线

Fig. 3 Relation curves of the number of oxygen balance vs. the quantities of detonation products for non-ideal explosive containing AP and Al

从图 3 可看出,11 种主要爆轰产物生成量随氧平衡变化的趋势不同,随着炸药正氧平衡数的增加, N_2 、 H_2O 、 CO_2 、 O_2 和 HCl 的生成量一直增加,但增加的程度不同, Al_2O_3 、 $AlCl_3$ 、 H_2 和 CO 的生成量则先增加后减小,当氧平衡数达到约 -29.7% 时, Al_2O_3 生成量达到最大值。Al 和 C 的生成量随着正氧平衡数的增加一直减小,在 Al_2O_3 生成量达最大之后, Al 生成

量的减少程度缓慢,表明氧平衡数为 -29.7% 左右时, Al 的反应完全率接近最大,充分发挥了铝粉的最大放热效应。当氧平衡数大于 -7.7% 后, Al 和 C 生成量趋于 0,而能与 Al 粉发生氧化还原反应、释放大热量的 H_2O 、HCl 和 CO_2 的生成量增幅较大,表明炸药配方设计中含氧量过剩。

从图 3 爆轰产物生成量变化还可看出,加入铝粉后(负氧平衡增加), CO_2 的含量大幅降低, CO 的含量有所增加,说明 Al 粉首先与 CO_2 发生反应,生成 CO ; 在 CO_2 含量较低时, Al 粉开始与 CO 进行反应,由于配方中铝粉含量较高,故 CO 含量降低;同时, H_2O 生成量的骤减, H_2 生成量明显的增加,也是由于 Al 粉与 H_2O 发生反应,生成 H_2 的结果。

3.3 爆热的计算

采用绝热法试验(GJB772A-1997 方法 701.1)测量了表 1 配方的爆热值,根据计算获得的爆轰产物生成量,利用盖斯定律^[1]计算了配方的爆热,结果见表 5。从表 5 可看出,氧平衡数在 4.7% ~ -29.7% 之间的炸药配方,爆热试验值与计算值较吻合,相对误差小于 3%。炸药配方正氧平衡及负氧平衡较大时,爆热试验值与计算值差异较大,相对误差大于 6%。

表 5 爆热试验值和计算值的对比

Table 5 Comparison of measured detonation heat with the calculated

No.	oxygen balance /%	detonation heat/ $J \cdot g^{-1}$		
		Q_{exp}	Q_{cal}	d_1
1#	16.9	6899	5390	-21.9
2#	4.7	7570	7471	-1.3
3#	-7.7	8146	8337	2.3
4#	-22.4	8773	8849	0.9
5#	-26.1	8759	8833	0.8
6#	-29.7	8813	8855	0.5
7#	-38.5	8636	8118	-6.0
8#	-44.7	8546	7690	-10.0

Note: 1) d_1 means the relative error of calculated values and experimental ones.

在爆热弹内无氧环境中,正氧平衡较大的炸药,其爆轰产物中含有较多的氧化剂,在高温下可与爆热测量系统中的其他物质发生氧化还原反应,释放出一定的热量^[10],该部分反应产物未计入爆轰产物生成量中,导致爆热试验测量值高于计算值。对于负氧平衡较大的炸药,爆轰产物中含有较多的未反应的 Al 粉, Al 粉与少量 N_2O 和 NO_2 等具有氧化性的爆轰气体产物发生氧化还原反应,放出一定量的热量,该部分反应产物也未计入爆轰产

物中,导致爆热实测值高于计算值。

从表 5 还可看出,随着负氧平衡数的增加,爆热先增加后减小,在氧平衡数为-29.7%时达最大值,这与爆轰产物中 Al_2O_3 的生成量趋势是一致的。显然,在含 AP 非理想炸药配方设计时,氧平衡数的设计决定了不同爆轰产物的生成量,从而影响了炸药的爆热。综合分析认为,在含 AP 非理想炸药配方设计时,氧平衡应设计以 -22.4% ~ -29.7% 为宜。

4 结 论

(1) 含 AP 和 Al 非理想炸药体系,无论是正氧平衡还是负氧平衡,其爆轰气体产物中均含有 N_2 、 H_2 、 CO_2 、 H_2O 、 CH_4 、 CO 和 C_2H_4 七种物质,炸药中的 N 元素在爆轰反应过程中完全生成 N_2 。

(2) 含 AP 和 Al 非理想炸药配方设计时,氧平衡应设计为 -22.4% ~ -29.7%,使 Al 粉与 RDX 和 AP 的分解产物发生充分氧化反应,可有效提高 Al 粉的反应完全性,从而提高含 AP 非理想炸药的爆热。

参考文献:

- [1] 惠君明,陈云天. 炸药爆炸理论[M]. 北京: 兵器工业出版社,1995.
[2] Volk F. Detonation gases and residues of composites explosives[J]. *Journal of Energetic Materials*, 1986(4): 93-113.

- [3] Volk F. Energy output of insensitive high explosives by measuring the detonation products[M]. *Phil Trans. R. soc. London A* 1992: 335-342.
[4] Volk F, Schedlbauer F, Wagner J. Detonation product of less sensitive high explosive formed under different pressures of argon and in vacuum [C] // 9th symposium (International) on Detonation, August 28-September 1, 1989, Portland, Oregon, USA.
[5] F Volk, F Schedlbauer. Products of Al containing explosives detonated in argon underwater [C] // 10th Symposium (International) on Detonation, 1993: 12-16.
[6] Volk F. Detonation products as a function of initiation strength, ambient gas and binder systems of explosive charges[J] *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 1996, 21: 155-159.
[7] Deiter. Jand Vimot G. Analysis of condensed phase detonation products from underwater explosives [C] // 1992 Annual DEA-A-76-G-1218 Meeting on Energetic for Detonations, China Lake, California. Sept. 1992: 22-24.
[8] 胡八一, 韩长生. TNT 和 JOB-9003 炸药的爆轰产物成分分析[J]. *火炸药学报*, 2000, 25(3): 67-68.
HU Ba-Yi, HAN Chang-sheng, The composition analysis of the detonation products produced by TNT and JOB-9003 [J]. *Chinese Journal of Explosive and Propellants*, 2000, 25(3): 67-68.
[9] Brill T B. Connecting the chemical composition of a material to its combustion characteristics [J]. *Prog Energy Combust Sci*, 1992, 18(9): 91-116.
[10] 黄友梅. 正氧炸药爆热的正确测定[J]. *爆炸与冲击*, 1982(1): 106.
HUANG You-mei. Correct measurement for explosive heat of excess-oxygen balance explosive [J]. *Explosion and Shock Waves*, 1982(1): 106.

Calculation of Detonation Products for Non-ideal Explosive with AP

WANG Cai-ling, ZHAO Sheng-xiang, JIA Ming, DIAO Xiao-qiang, DAI Zhi-xin

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

Abstract: Taking non-ideal explosive composed of hexogen (RDX), oxidant ammonium perchlorate (AP) and combustible agent aluminium (Al) powder as the research object, the gas products and condensed phase products of eight non-ideal explosives exploded and produced in a confined explosion container were collected and analyzed by thermal analysis-mass spectrometry technology, Fourier infrared spectrometer, gas chromatograph analysis and X-ray fluorescence analyzer. The heat of detonation was calculated by Hess's law and compared with the experimental value. Results show that under the condition of the detonation, the detonation products mainly are composed of gases N_2 , H_2 , CO_2 , H_2O , CH_4 , CO and O_2 etc and solid compositions Al, Al_2O_3 , AlCl_3 and C etc. With the increase of the positive oxygen balance, the generation quantities of N_2 , H_2O , CO_2 , O_2 and HCl increase, while those of Al_2O_3 , AlCl_3 , H_2 and CO increase firstly, and then decrease. The generation quantities of Al and C decrease. The measured heat of detonation of non-ideal explosive with oxygen-balance in the range of -22.4% ~ -29.7%, is between 8773 and 8813 $\text{J} \cdot \text{g}^{-1}$, and the relative error between theoretical and experimental values is less than 1%, showing a good agreement.

Key words: physical chemistry; non-ideal explosive; thermal decomposition; detonation products; detonation heat; oxygen balance

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2014.02.022