

文章编号:1006-9941(2021)10-0937-11

十二氢十二硼酸双四乙基铵对铝粉燃烧反应机理的影响

姜帆,牛余雷,卜宇凡,孙培培,王晓峰,南海,汪强

(西安近代化学研究所,陕西西安710065)

摘要: 为了探究固体硼氢燃料对铝粉燃烧反应机理的影响,采用同步热分析-红外质谱联用技术及热裂解原位池-傅里叶变换红外光谱联用技术,对十二氢十二硼酸双四乙基铵(BHN-12)的热分解反应机理及反应动力学进行研究。在此基础上,结合数值模拟建立BHN-12在爆炸流场中对铝粉燃烧反应影响的模型,探究硼氢燃料在流场中的反应时间、分散特性以及对铝粉的助燃效应。结果表明,BHN-12热分解开始温度约314℃,结束温度约360℃。分解过程中出现三个放热峰和两个吸热峰,总质量损失范围为32.3%~33.9%。分解过程遵从幂级数法则(Mampel power),动力学机理函数为 $G(\alpha) = \alpha^{1/2}$ 。分解后的气体产物主要为 H_2 、 C_2H_4 、 C_2H_6 和 NH_3 ,固体产物为非晶态的C和B单质。采用组分运输模型可较好地模拟Al/BHN-12体系的后燃烧反应过程,在该过程中,Al燃料的分散速度比BHN-12粒子的分散速度慢,20 ms时,Al燃料的分散半径约2.5 m,BHN-12的分散半径约3 m。在反应初期2 ms时,无分解气体产物出现;大约4 ms时,开始出现气体产物,反应火球中部的温度约为1800℃,BHN-12可提升体系的后燃反应温度约300℃。

关键词: 十二氢十二硼酸双四乙基铵(BHN-12);铝粉;热分解;后燃反应;机理

中图分类号:TJ55;O64

文献标志码:A

DOI:10.11943/CJEM2021090

1 引言

多面体硼氢化合物是一类具有笼状结构的高能含能燃料,在固体推进剂中采用此类化合物是获得高燃速性能的一种有效途径^[1-2]。早在1970年,美国就在“蝮蛇”反坦克火箭中使用了含有癸硼烷的高燃速推进剂,其燃烧可达 $100 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ ^[3]。在国内,Pang等^[4]将十氢十硼酸双四乙基铵(BHN-10)应用于推进剂配方中,通过增加BHN-10可提升体系的燃烧热值。十二氢十二硼酸双四乙基铵(BHN-12)在分解过程中释放的低电离势氢离子可加速硝酸铵的热分解,从而提高NEPE推进剂的燃速^[5],因此,该类燃料具有良好应用潜力。

高纯度硼在推进剂和炸药等含能配方中可作为体系的助燃剂和燃速调节剂,但由于纯硼存在点火温度高、燃烧不完全等问题^[6]而未被广泛使用。通过含碳

物质的引入可改善硼的反应活性^[7-8],对于固体温压炸药来说,由于固体燃料粒子在分散后均匀性较差,其在后燃反应阶段的爆轰常以点爆轰形式存在,没有达到体爆轰的效果,导致铝粉的反应完全性不足,制约了温压炸药能量的进一步提升。研究表明,在爆轰的初始阶段,爆炸产生的高温足以使小于 $15 \mu\text{m}$ 的片状铝粉达到熔化温度而在几毫秒内反应,而粒度超过 $150 \mu\text{m}$ 的铝粉需在爆炸扩散的过程中持续剥离破碎而反应^[9]。Jiang等^[10]利用气体色谱检测手段对不同粒度级配的铝粉的反应特性展开定量研究,发现爆炸后金属Al在密闭空间内的反应完全性相对较低。王兴龙^[11]通过理论计算表明,当密闭空间的体积从 0.2 m^3 提升至 1.8 m^3 ,后燃反应的铝粉反应完全性从74%提升至99%。尽管通过铝粉粒度选择^[12]、粒度级配^[13]以及氧化剂体系的设计^[14],可在一定程度上提升炸药的爆炸性能,但是目前尚无法从根本上解决固体温压炸药爆炸后铝粉的燃烧完全性不足的问题。因此,温压炸药在爆炸后燃烧反应的铝粉的反应完全性仍亟待进一步提升。

姜帆等^[15-16]研究发现,BHN-10在具有良好的冲击安定性的同时,分解过程还能产生多种小分子可燃

收稿日期:2021-04-14;修回日期:2021-06-27

网络出版日期:2021-08-11

作者简介:姜帆(1991),男,助理研究员,主要从事温压炸药燃料相关研究。e-mail:jiangfan9101@163.com

通信联系人:南海(1980),男,研究员,主要从事军用混合炸药相关研究。e-mail:walese_2000@sina.com

引用本文:姜帆,牛余雷,卜宇凡,等.十二氢十二硼酸双四乙基铵对铝粉燃烧反应机理的影响[J].含能材料,2021,29(10):937-947.

JIANG Fan, NIU Yu-lei, BU Yu-fan, et al. Effect of Dodecahydrododecaborate Bistetraethylammonium on Combustion Reaction Mechanism of Aluminum Powder [J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2021, 29(10):937-947.

气体。其阳离子为四乙基铵阳离子基团,阴离子由于具有笼状结构电子离域而表现出有机体系的芳香性^[17],使其具有低毒性、耐酸碱性和高热稳定性等诸多优良性能^[18]。Housecroft等^[19]计算了 $B_nH_n^{2-}$ 化合物中B—B键能,发现 $n=12$ 的化合物具有高的稳定性,从理论上证明了 $B_{12}H_{12}^{2-}$ 是最稳定的硼氢阴离子,在温度升高的条件下,其他的阴离子最终会转化为 $B_{12}H_{12}^{2-}$ 离子^[20],因此,BHN-12也具有更加优良的热稳定性和较高的密度。

潘欣欣等^[21]对BHN-12的点火与燃烧特性进行研究,发现其BHN-12具有良好的点火性能,在氮气及空气气氛下加热会发生裂解并伴随氧化反应的发生,推断其在热裂解过程中释放碳氢燃气。因此,该类化合物在具有优良稳定性和综合性能的同时,在分解后还具有可产生小分子气体的特点。

从反应动力学上来说,初始的反应速度有利于提升爆炸冲击波能量,但较短的燃烧时间不利于在后燃反应中的热毁伤效应。因此,对于固体的温压炸药来说,BHN-12等固体硼氢化物由于其在分解过程中可持续地分解释放高热值的小分子气体,进一步提升温压炸药后燃烧反应的反应温度和反应时间,从而达到提升铝粉反应完全性的设计。目前,关于BHN-12分解过程机理、分解产物及反应动力学研究不够深入,无法从机理层面解释其分解反应过程、产物以及对铝粉燃烧反应的作用机制,尤其在爆炸反应流场中,缺乏研究手段,无法指导燃料和炸药的设计。因此,本研究对BHN-12的分反应产物和机理进行探讨,建立了BHN-12对铝粉燃烧反应完全性研究反应模型,探究其对铝粉燃烧反应影响机制及其在流场中的反应时间、分散特性以及对铝粉的助燃效应,为固体硼氢化物对铝粉燃烧反应的研究提供理论支持。

2 实验部分

2.1 实验样品

十二氢十二硼酸双四乙基铵,西安近代化学研究所制备,纯度不小于99.5%。

2.2 实验仪器及过程

采用同步热分析仪(TG-DSC,德国耐驰公司449C型)对样品的热分解反应过程研究。将1 mg样品置于铝制坩埚内进行测量,测量气氛为氩气($25 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$),测温范围为常温~ $500 \text{ }^\circ\text{C}$;采用质谱仪(MS,德国Netzsch公司QMS 403C)对气体的粒子碎

片进行测量,设置粒子质量范围为 $1 \sim 300 \text{ u}$,检测极限不小于 1×10^{-6} ;采用红外光谱仪(IR,美国尼高力公司5700型),检测器为经氘化处理的硫酸三甘肽晶体(DTGS),光谱范围为 $650 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$,精度大于 0.09 cm^{-1} ,连接管操作温度为 $190 \text{ }^\circ\text{C}$,吹扫气和保护气流量分别为 $50.0 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ 和 $25.0 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$;采用傅里叶变换红外光谱仪(FTIS,美国赛默飞世尔科技公司),DTGS检测器,控制升温速率为 $10 \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$ 。

3 理论及模拟方法

3.1 仿真模型构建及网格划分

使用Solidworks软件^[22]建立2维物理模型,进口为半径0.5 m的四分之一圆形边界,出口处为半径6 m的圆形边界。选择入口半径为0.5 m是由于AUTODYN计算所得压力时程数据可知该点受到壁面反射的影响较小,且距离适中,可作为近场和远程的分界位置,物理模型示意图见图1。

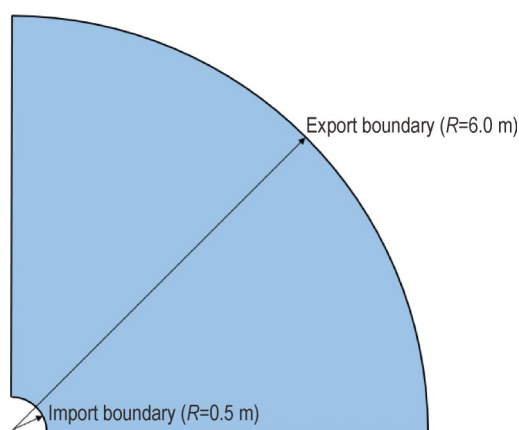


图1 后燃烧反应的物理模型

Fig.1 Physical model of the after-burning reaction

采用ANSYS的MESHING模块儿对模型进行网格划分,其中及圆周切向划分为等距离60部分,径向采用由中心向周边增长率为1.02共120部分网格,共7200个网格,网格的划分情况见图2。

3.2 边界条件及求解控制

采用常规的爆炸仿真软件难以模拟铝粉在流场中的化学反应过程,因此,为了还原炸药爆炸过程,采用AUTODYN炸点附近0.5 m处压力数据作为进口压力的边界条件,此距离也作为近场(爆炸场)和远场(流场)的分界位置,地面边界设置为壁面wall;压力出口设置为pressure-out,出口大气压设置为 101.325 kPa ,使用自定义压力函数(UDF)导入,入口压力作用时间

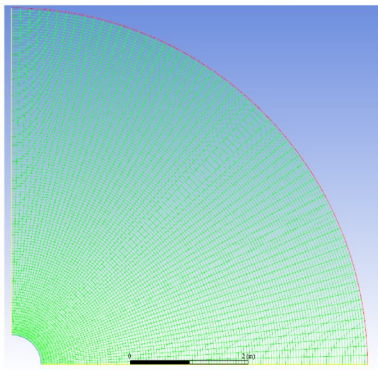


图2 模型流体计算域的网格示意图
Fig.2 Grid of the model fluid calculation domain

表1 爆炸场压力分段拟合系数

Table 1 Piecewise fitting of the coefficients of explosion pressure

$b_i (i=1\sim 9)$	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5
	b_6	b_7	b_8	b_9	
$c_i (i=1\sim 9)$	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
	c_6	c_7	c_8	c_9	
$d_i (i=1\sim 9)$	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5
	d_6	d_7	d_8	d_9	

爆炸压力时程曲线见图3,将离散点与所拟合函数曲线作图见图3放大曲线。第一段为常压,对此段不进行拟合。从图3可知,函数曲线与爆炸压力场数据拟合良好,可达到对计算精度的要求。

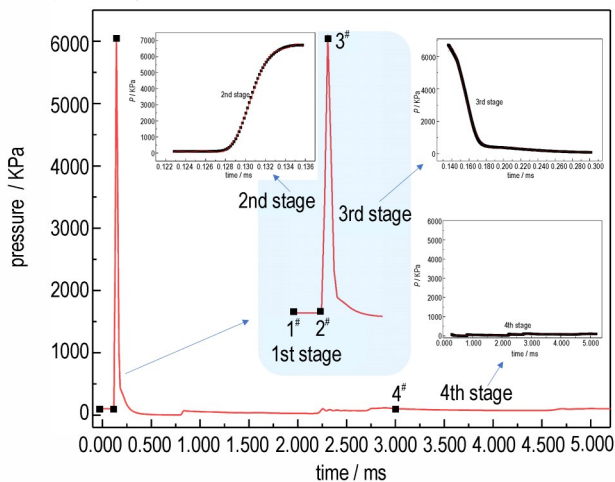


图3 爆炸压力时程曲线及其多项式拟合结果
Fig.3 Explosion pressure-time curves and its polynomial fitting results

为5.2 ms。进口边界设为(pressure inlet)界面,方向为曲线的法相,由于爆炸反应产生压力升高较快,使用常规函数不能够达到对爆炸压力场的拟合精度,因此对0.5 m处的压力数据分为四段进行多项式拟合,压力的表达式为:

$$p = \begin{cases} 101.332 & 0 \leq t \leq 0.12269 \text{ ms} \\ b_1 x^8 + b_2 x^7 + \dots + b_8 x + b_9 & 0.12269 < t \leq 0.13573 \text{ ms} \\ c_1 x^8 + c_2 x^7 + \dots + c_8 x + c_9 & 0.13573 < t \leq 0.30147 \text{ ms} \\ d_1 x^9 + d_2 x^8 + \dots + d_8 x + d_9 & 0.30147 < t \leq 5.2 \text{ ms} \end{cases} \quad (1)$$

式中,拟合多项式的取值见表1。

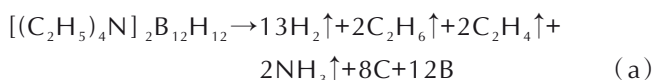
采用DPM模型与空气相两相耦合的计算方法,燃料中的固体铝粉颗粒作离散相计算,设置BHN-12燃料的粒径为57.8 μm,密度930 kg·m⁻³,热容1000 J·K⁻¹,质量扩散系数为5×10⁻¹²。采用SIMPLE算法,求解离散化的动量方程,迭代时间步长为5×10⁻⁶ s,迭代总时间步数为20000步,每个时间步长迭代10次,计算燃料在20 ms内的分散过程。

3.3 湍流模型及离散相模型设置

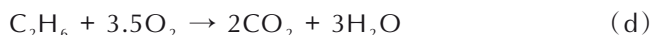
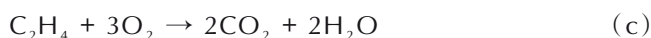
$k-\epsilon$ 由 Spalding 和 Launder 所提出^[23],模型具有较高的稳定性、经济性和比较高的计算精度。选择 SST $k-\omega$ 模型,其中增加了横向耗散导数项,同时在湍流粘度的定义中考虑湍流剪应力的运输过程。将网格导入到 FLUENT 中,设置为瞬态,在流体组分中添加 C₂H₆, C₂H₄, H₂, NH₃, 以及空气,固体组分中添加 Al, Al₂O₃, BHN-12(组分由后文分解产物研究确定)。粒子的反应类型设置为表面反应 (particle surface) 类型。

3.4 物性参数选取及反应方程式的确定

铝粉与空气的反应使用总包反应模型 $\text{Al}+0.75\text{O}_2 \rightarrow 0.5\text{Al}_2\text{O}_3$, 湍流流动中化学反应之间的相互作用选择涡流耗散模型(Eddy-Dissipation)进行模拟, 由后文 4.5 中所得 BHN-12 的分解反应方程式可知, BHN-12 分解反应可表达为一步反应, 如式(a):



由于分解产物中固体碳(C)和硼(B)单质的反应温度较高, 在这里可忽略 C 和 B 与氧气的反应, 假定 BHN-12 在后燃烧反应中产生的气体可完全与氧气发生反应, 则在后燃烧反应过程中除 Al 燃料的燃烧外还会发生下列反应:



采用 FLUENT 自带的材料库添加反应物, 气相种类有 $\text{O}_2, \text{N}_2, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_3, \text{H}_2, \text{C}_2\text{H}_6, \text{C}_2\text{H}_4$; 固相种类有 $\text{Al}_2\text{O}_3, \text{C}, \text{B}, \text{BHN-12}, \text{Al}$, 指前因子与活化能由后文动力学参数计算可得, 输入质量扩散系数等反应参数。组分模型选择为 volumetric 体积反应, 混合材料选择为 methane-air-2step。添加化学反应(a)~(e)。设定 BHN-12 和 Al 的喷射质量流量为 $10 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$, Al 粒子的摩尔质量 $27 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$, 密度为 $2719 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 比热为 $871 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, 标准状态焓为 $1.84474 \times 10^7 \text{ J}\cdot\text{kmol}^{-1}$, 导热率 $202.4 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。反应类型为颗粒表面化学反应, 质量扩散系数为 5×10^{-12} , 指前因子 6.7 s^{-1} , 活化能为 $1.138 \times 10^8 \text{ J}\cdot\text{kgmol}^{-1}$ [24-25]。燃烧产物 Al_2O_3 的摩尔质量为 $102 \text{ kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$, 密度为 $2000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 标准状态焓为 $1.6757 \times 10^{12} \text{ J}\cdot\text{kmol}^{-1}$ 。BHN-12 的粒度设置为 $57.8 \mu\text{m}$, 密度 $960 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 热容 $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 质量扩散系数为 5×10^{-12} 。

基于以上所选择的计算模型, 通过对湍流方程、守恒方程以及自定义参数方程进行求解, 采用 SIMPLE 算法[26], 时间步长设置为 0.0001 s , 计算步数为 10000 步。

4 结果与讨论

4.1 BHN-12 的热分解过程

由于非等温过程的 DSC 测试可通过对不同升温速率下的放热峰温或质量损失, 对反应动力学参数进行求解, 但其动力学方程与实际的机理存在一定偏差,

等温分解过程可较为精确地计算燃料在一定温度下的分解情况, 其结果也更为精确, 因此采用等温及非等温 DSC 两种分解情况对 BHN-12 的热分解反应过程展开研究。其中, BHN-12 等温 DSC (升温速率 $10.0 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$) 的 TG-DSC 曲线见图 4。

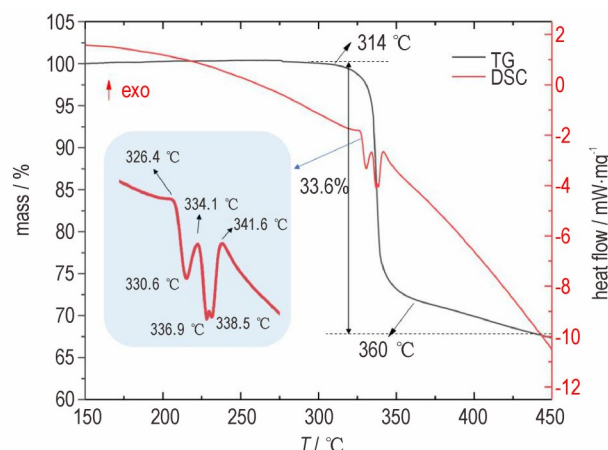


图4 升温速率 $10.0 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ 时 BHN-12 的 TG-DSC 曲线
Fig.4 TG-DSC curves of BHN-12 with a heating rate $10.0 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$

由图 4 可知, BHN-12 热分解过程在 $314 \text{ }^\circ\text{C}$ 附近开始发生, 在 $360 \text{ }^\circ\text{C}$ 附近分解过程结束, 其分解过程存在三个放热峰及三个吸热峰, 其放热峰分别为 $326.4, 334.1, 341.6 \text{ }^\circ\text{C}$, 在 BHN-12 的三个放热峰中间叠加了三个吸热峰, 分别存在于 $330.6, 336.9 \text{ }^\circ\text{C}$ 和 $338.5 \text{ }^\circ\text{C}$ 。相较于 BHN-10 的 $279 \text{ }^\circ\text{C}$, BHN-12 具有相对较高的分解温度[15], 其热分解反应历程也相对复杂。热分解过程的质量损失为 33.6% 。

为了进一步对 BHN-12 的分解过程动力学参数和分解机理进行计算, 采用不同升温速率 ($2.5, 5.0, 10.0, 20.0 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$), BHN-12 的 DSC (其中对 DSC 部分放大) 和 TG-DTG 曲线分别见图 5 和图 6。

从图 5 可知, BHN-12 在 $319.3 \sim 341.2 \text{ }^\circ\text{C}$ 出现第一放热峰 (其中升温速率为 $2.5, 5, 10, 20 \text{ }^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ 下峰温分别为 $315.3, 324.9, 326.2, 341.2 \text{ }^\circ\text{C}$), 在 $319.1 \sim 365.6 \text{ }^\circ\text{C}$ 出现第二放热峰 ($319.1, 328.6, 334.2, 365.6 \text{ }^\circ\text{C}$), 在 $321.8 \sim 406.2 \text{ }^\circ\text{C}$ 出现第三放热峰 ($321.8, 331.6, 341.8, 406.2 \text{ }^\circ\text{C}$); 在分解放热峰中间叠加了两个吸热峰, 其中第一吸热峰在 $318.2 \sim 349.8 \text{ }^\circ\text{C}$ ($318.2, 327.6, 330.7, 349.8 \text{ }^\circ\text{C}$), 第二吸热峰在 $320.0 \sim 389.3 \text{ }^\circ\text{C}$ ($320.0, 329.3, 336.9, 389.3 \text{ }^\circ\text{C}$)。由图 6 可知, 在 4 种升温速率下, 分解过程总质量损失范围在 $32.3\% \sim 33.9\%$, 样品仍有质量剩余是由于有凝聚

态的其他固体成分产生。DSC曲线中两个放热峰之间出现了一个吸热峰,但是在相应的TG曲线上并未发现质量损失,这表明BHN-12的分解历程类似于BHN-10,在分解过程中生成了一种熔融分解型的中间产物^[15]。由图6中知,BHN-12约在292.2~321.9 °C开始发生质量损失,随着升温速率的提高,质量损失的过程会向较高温方向平移。BHN-12整个分解过程不同于BHN-10的分解过程,未出现明显的两步分解反应。结合下文4.3中气体产物分析推测其第二个为四乙基铵阳离子的分解峰,第三个峰为硼笼脱氢所形成的放热峰。

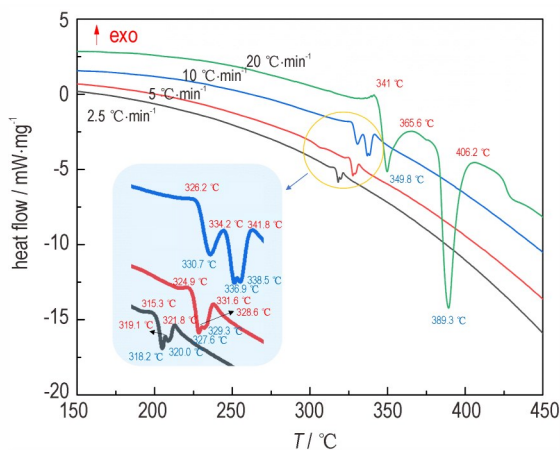


图5 不同升温速率下BHN-12的DSC曲线
Fig.5 DSC curves of BHN-12 at different heating rates

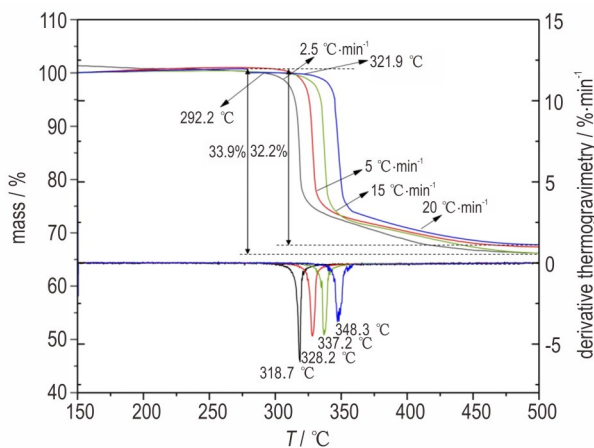


图6 不同升温速率下BHN-12的TG-DTG曲线
Fig.6 TG-DTG curves of BHN-12 at different heating rates

4.2 BHN-12的热分解动力学

由DSC曲线可知,BHN-12在分解过程中可能会出现熔融分解产物,其放热和吸热过程峰相隔较少,不利于动力学的计算,而DTG峰温不受没有质量损失的熔融吸热过程影响。因此,采用微商热重方法(DTG)

获取分解峰温 T_p ,其数据见表2。因采用不同反应机理函数在计算中存在误差,需避开反应机理函数而直接对活化能进行拟合,故选择Ozawa法^[27]对机理函数进行计算,而Kissinger方程^[28]中含有的机理函数,可通过拟合结果推断反应过程的机理函数,因此结合Kissinger方程(式2)和Ozawa方程(式3)对分解过程数据进行拟合,所得活化能和指前因子见表2。

$$\ln\left(\frac{\beta_i}{T_i^2}\right) = -\frac{E_k}{R} \cdot \frac{1}{T_i} + \ln\left(\frac{A_k R}{E_k}\right), (i=1\sim 4) \quad (2)$$

$$\lg\beta_i = \ln\left(\frac{AE}{RG(\alpha)}\right) - 2.315 - 0.4567 \frac{E}{RT_i} \quad (3)$$

式中, β_i 为升温速率, $K \cdot \text{min}^{-1}$; T_i 为峰值温度, K ; R 为气体常数, $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; E_k 为活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$, $G(\alpha)$ 为积分机理函数。

表2 BHN-12热分解的动力学参数

Table 2 Kinetic parameters for the thermal decomposition reaction of BHN-12

β / $K \cdot \text{min}^{-1}$	T_p / K	$E / \text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$		r		$\lg(A_k/s^{-1})$ Kissinger
		Kissinger	Ozawa	Kissinger	Ozawa	
2.5	591.9					
5	601.4					
10	610.4	206.4	205.8	0.9987	0.9983	17.5
20	621.5					

表2数据表明,Kissinger和Ozawa两种方法计算的BHN-12分解活化能分别为 $206.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 和 $205.8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$,两方法相差较小且相关系数分别为0.9987和0.9983,表明BHN-12具有良好的热稳定性,其活化能约为 $206 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。将分解过程的质量损失进行归一化处理(0%~100%),使用不同升温速率 β_i 下等转化率反应深度 α 的温度值 T_i ,按Ozawa方程进行拟合,可得在不同反应深度下的活化能(图7)。

由图7可知,表观活化能在不同反应深度下波动都较小,在 $(200.6 \pm 10.4) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 范围内。因此,BHN-12的热分解过程其活化能较高,具有良好的热稳定性。

由式(4)可知, $\ln \frac{G(\alpha)}{T^2}$ 与 $-\frac{1}{T}$ 在不同反应深度 α

下线性相关。为确定BHN-12分解过程动力学机理函数,根据Coats-Redfern方程(见式(4)),将数据代入常用固体热分解机理函数^[29-30]。

$$\ln \frac{G(\alpha)}{T^2} = -\frac{E}{RT} + \ln \frac{AR}{\beta E} \quad (4)$$

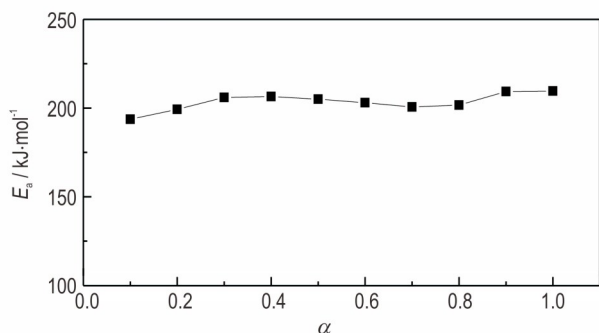
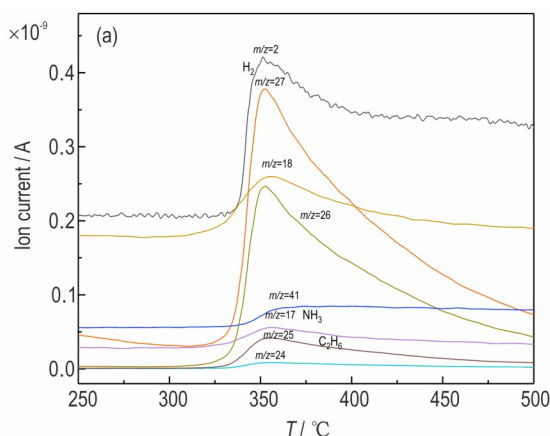


图7 BHN-12热分解阶段表观活化能随分解深度变化
Fig.7 Apparent activation energy varies with the decomposition extent of BHN-12

通过拟合计算,对比由两种方法计算所得活化能可知BHN-12热分解第一阶段最概然机理函数为 $G(\alpha)=\alpha^{1/2}$,分解过程符合幂级数法则(Mampel power)。

4.3 BHN-12的热分解气体产物分析

程序升温速率 $10\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,BHN-12分解气体



质谱图如图8所示。由图8可知,当温度超过 $310\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时,BHN-12逐渐开始分解,气体的红外特征吸收强度不断增加。分解反应发生时,出现了乙烯(950 cm^{-1} 和 $2990\sim 3166\text{ cm}^{-1}$)^[31]、乙烷(2950 cm^{-1} 和 2972 cm^{-1})和氨气(967 cm^{-1} 和 932 cm^{-1})的吸收峰。

离子碎片 m/z 对应的气体产物有 H_2 ($m/z=2$);乙烯($m/z=14, 25, 26, 27, 28$); NH_3 ($m/z=14, 15, 16, 17$);乙烷($m/z=14, 15, 16, 25, 26, 27, 28, 29, 30$);离子流强度在 $302.2\text{ }^{\circ}\text{C}$ 左右开始升高,在 $352.7\text{ }^{\circ}\text{C}$ 左右达到峰值,除 H_2 作为非极性气体在气体红外中无法检测,质谱方法结果与红外结果相一致。在BHN-10的分解过程中, H_2 粒子流升高较 NH_3 和 C_2H_6 离子流的升高有显著提前,被认为是首先发生了硼笼的脱氢过程^[15],而BHN-12在分解过程中 H_2 离子流与 NH_3 和 C_2H_6 离子流强度的升高同时发生,这表明BHN-12在分解过程中脱氢反应未发生提前,其阴离子上硼笼的脱氢与四乙基铵阳离子上的分解同时发生。

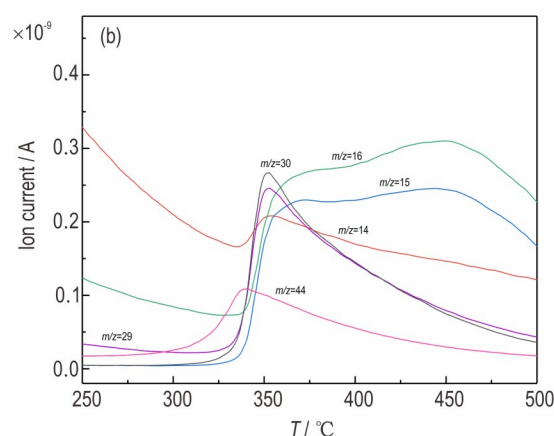


图8 BHN-12在不同温度下气体产物质谱图
Fig.8 MS spectra of BHN-12 gas products at different temperature

4.4 BHN-12的热分解凝聚相产物分析

使用红外原位池对BHN-12热分解过程的凝聚相产物进行分析,可获得凝聚相产物的吸光度随温度变化的三维曲线见图9。

从图9可知,BHN-12在开始反应阶段的官能团与BHN-12在常温情况下的官能团一致,其主要的官能团包括 $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)=3011, 1460\text{ cm}^{-1}$; $\nu_{\text{s}}(\text{CH}_3)=2981, 1373, 1358\text{ cm}^{-1}$; $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)=2992, 1402\text{ cm}^{-1}$; $\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)=2889, 1309\text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{C}-\text{C})=1120, 1079, 792\text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{B}-\text{H})=2449\text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{C}-\text{N})=1184\text{ cm}^{-1}$ 。其中, $\text{B}-\text{H}$ 键的振动峰发生偏移至 2481 cm^{-1} ,还在 2007 cm^{-1} 和 711 cm^{-1} 出现特征官能团。当温度达到

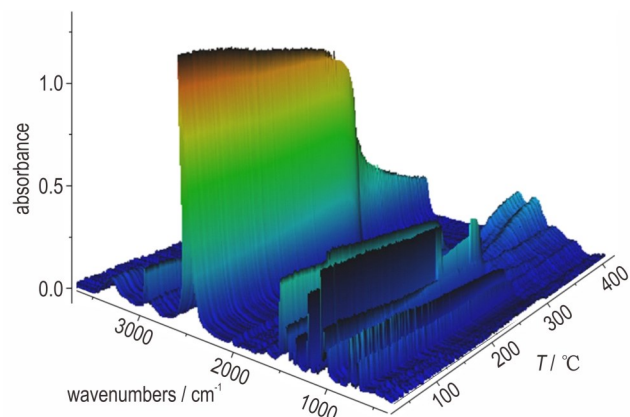
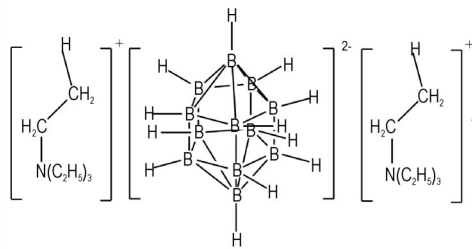


图9 BHN-12凝聚相产物吸光度随温度变化
Fig.9 Infrared absorbance of condensed phase of BHN-12 at different temperatures

300 °C左右时, BHN-12的吸光度发生了降低, 表明BHN-12在此温度下开始发生分解反应。

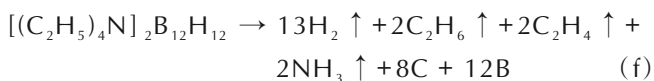
BHN-12由笼状的十二氢十二硼酸根负离子及四乙基铵正离子构成, 主要官能团的IR特征吸收强度随加热时间的变化见图10。

BHN-12的红外峰由闭笼结构的B—H键($\nu_{\text{B-H}}=2481\text{ cm}^{-1}$)及阳离子中烷基的C—H键($\nu_{\text{C-H}}=1407\text{ cm}^{-1}$)和C—N键($\nu_{\text{C-N}}=1184\text{ cm}^{-1}$)产生, 观察其强度变化, 由图9可知, B—H键的分解在318.7 °C, 比C—N键和C—H键的分解高12 °C左右, 这说明BHN-12的分解与气相质谱的结果相符合。BHN-12不同于BHN-10, 热分解首先不是硼笼的脱氢过程, 其脱氢的过程滞后于阳离子的分解过程。BHN-12在热分解过程中有三个吸热峰以及两个放热峰, 结合BHN-10的热分解过程分析推断, BHN-12热分解过程的第一个峰为熔融分解产物的峰, 第二个为四乙基铵阳离子的分解峰, 第三个峰为硼笼脱氢所形成的放热峰。



Scheme 1 Thermal decomposition mechanism of BHN-12

基于以上分解机理, 可将BHN-12的热分解反应的化学方程式表达为:



BHN-12的热稳定性要高于BHN-10, 其分解反应没有像BHN-10一样先发生硼笼的脱氢过程, 整个的反应过程在一步完成, 硼笼的分解会产生无定形态的单质硼元素, 而三乙胺的碳化反应会导致部分单质碳的生成。BHN-12在分解过程中首先会发生四乙基铵阳离子的Hoffman消除反应^[32], 通过质子转移生成乙烯和 Et_3N , 随后 Et_3N 进一步分解为 H_2 、 C_2H_6 、 NH_3 和 C 。TG曲线的结果显示总过程的质量损失为33.9%, 其理论计算的质量损失在40%左右, 表明分解反应方程(f)可较好地描述BHN-12的分解过程。

综上, BHN-12的热稳定性好于BHN-10, 金属硼

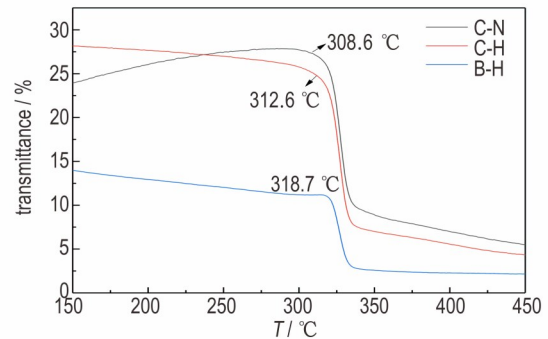
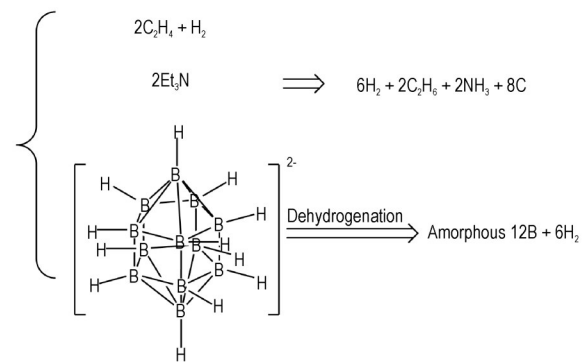


图10 不同温度下凝聚相BHN-12红外透射率

Fig.10 Infrared transmittance of condensed phase of BHN-12 at different temperatures

4.5 BHN-12的热分解机理

通过对BHN-12在分解过程中TG质量损失以及热分解阶段产物的分析, 结合与BHN-12具有相似结构的BHN-10分解过程的中间产物分析^[15], 推测BHN-12的热分解机理见Scheme 1。



氢化物的氢含量相对更高, 例如 LiBH_4 最大的储氢密度可达18.5%, 也可提升炸药爆炸体系的能量和反应活性, 但是此类化合物的化学稳定性相对较低, 容易发生吸湿分解效应, 它们在炸药中的使用还需对材料进一步包覆改性^[33]。含氟硼有机物的加入能够抑制燃烧凝聚相产物中大尺寸颗粒的粒径, 减少铝粉在燃烧过程中的团聚^[34], 但在分解后无小分子气体产生, 采用BHN-12主要是能够利用其四乙基铵阳离子基团所分解产生的小分子气体 H_2 、 C_2H_4 、 C_2H_6 和 NH_3 , 这些气体产物均为低分子量的高热值的有机可燃气体, 具有燃烧热值高、燃烧完全性好等特点, 能够在后燃烧反应阶段持续的分解并与空气发生反应, 从而提升温压炸药爆炸后的体爆轰效应和铝粉的反应完全性。

4.6 BHN-12对铝粉燃烧反应影响的数值计算

对BHN-12的热分解反应过程产物及反应历程分

析,可得到反应的化学方程式和反应的动力学参数。在此基础上,采用流体力学方法对化学反应过程进行研究,探究反应过程中BHN-12分解产物对Al的反应过程的影响机制。

4.6.1 压力场及温度场分析

距离爆心1~5 m位置处测点的压力时间曲线见图11。从图11可知,压力峰值随着距离爆心位置增加逐渐降低,并且压力峰值的峰宽明显增加,表明发生了后燃效应。这主要是由于铝粉颗粒的有氧化学反应作用会形成持续的膨胀波,同时硼氢燃料在后燃反应中会发生分解反应产生大量的可燃性气体,气体的产生可以降低体系在后燃反应中的压力衰减过程,从而进一步降低次压峰值衰减的程度,温压炸药的冲击波毁伤时间也得到了延长。

由图12压力时程变化云图可知,随着时间的延长,反应的边界逐渐扩散,爆炸反应过程中心区域压力形成了负压(蓝色云图)。这是由于流场内燃烧化学反应在进行,同时硼氢燃料在分散的过程中发生了分解反应,他们分解可以产生大量的可燃性气体与氧气发生反应,在高温高压条件下空气被压缩产生冲击波。随着时间的推移,冲击波在传播过程中逐渐衰减,当降低至大气压力时由于空气粒子的惯性作用继续降低至负值,此时化学反应剧烈程度降低,由图12d可知,随着时间的推移,流场外的气体又重新由于压力作用补

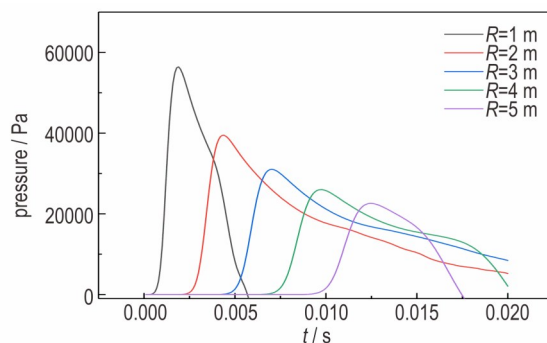


图11 不同位置爆炸压力场的时间-压力曲线
Fig.11 Time-pressure curves of explosion field at different positions

充进来,最终会趋于稳定在大气压值附近。

由图13为不同时刻下温度分布的云图可知,由图13a知,在初始时刻,铝粉便开始发生反应。这是由于在主炸药爆炸后形成了高温产物,在距离炸点0.5 m位置处,Fluent所计算的入口边界条件位置处就产生了高温高压产物,铝粉与周围环境中空气发生作用在高温产物的传热下发生氧化还原反应。此外,BHN-12在高温下会分解产生可燃性气体,这些气体在高温情况下也会与周边的空气发生反应,产生大量化学热,从而使火球内部和周围空气介质的温度有所升高。在后燃反应发生时高温的火球会在冲击波的作用下持续的发生径向拓展,形成较大体积的高温反应场,由图13d知,反应中心温度大约1800℃,比周围温

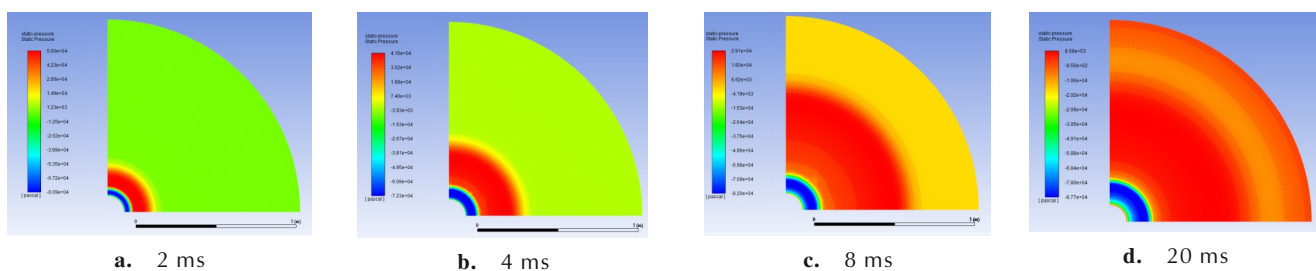


图12 不同时间压力时程变化云图
Fig.12 Cloud chart of pressure-time at different times

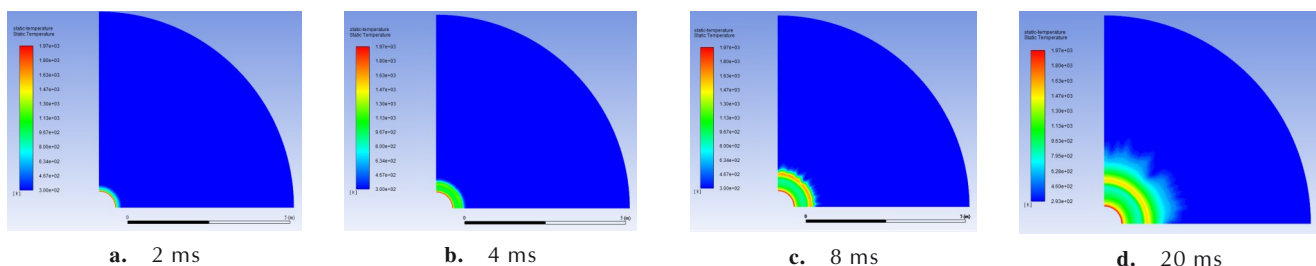


图13 不同时间温度时程变化云图
Fig.13 Cloud chart of temperature versus time

度提高约 300 °C,这是 BHN-12 分解的气体产物与周围氧气反应的结果相对于常规的高能炸药,温压爆炸作用的火球温度除爆炸中心处外,火球内部也具有相对较高的温度,而且 BHN-12 的分解可对 Al 的后燃作用产生进一步的促进作用,从而进一步加大火球的作用范围,延长反应的时间,具有潜在的应用前景。

4.6.2 反应物及产物浓度分析

对产物组分追踪,可获得燃料粒子在后燃烧反应过程的浓度信息,同时可以获得气体产物产生的时间和分布情况。反应物和产物在后燃烧反应中的浓度分布情况见图 14。

由图 14 可知,反应模型可较好地模拟 BHN-12 燃料在爆炸流场中后燃反应中的情况。由图 14a 可知,BHN-12 在分散过程中的质量浓度为 $0.072\sim 0.179\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$,产物呈弧形状向外分散。对图 14a 和图 14b 中 BHN-12 和 Al 分散结果进行对比知,BHN-12 的分散速度高于 Al。计算模型中所设定

BHN-12 粒子的平均质量约为 $1.09\times 10^{-10}\text{ g}$ ($d=57.8\text{ }\mu\text{m}$, $\rho=930\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$),高于 Al 粒子的平均质量 $1.14\times 10^{-11}\text{ g}$ ($d=10\text{ }\mu\text{m}$, $\rho=2719\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$),此结果与文献[35]中粒子的分散的速度随粒子质量的增加而增加相符,表明计算结果相对准确。在 20 ms 时,Al 的分散半径在 2.5 m 左右,BHN-12 的分散半径约为 3 m。图 14c 和图 14d 可看出,Al 在分散过程中已通过化学反应生成了 Al_2O_3 ,氧气在中心区域由于反应的发生形成了氧气的耗尽区。

由于 BHN-12 的分解气体产物有 H_2 、 CH_4 、 C_2H_4 和 NH_3 ,气体产物在后燃反应中的云图结果较为相近,因此仅对 H_2 作为气体产物代表进行讨论。不同时刻 H_2 分布云图如图 15 所示,可知,在后燃反应中时间达到 4 ms 时,气体产物气体出现,表明 BHN-12 在 4 ms 左右发生了分解反应产生可燃性气体,气体产物在高温条件下可进一步与氧气发生反应,提升体系的反应温度。

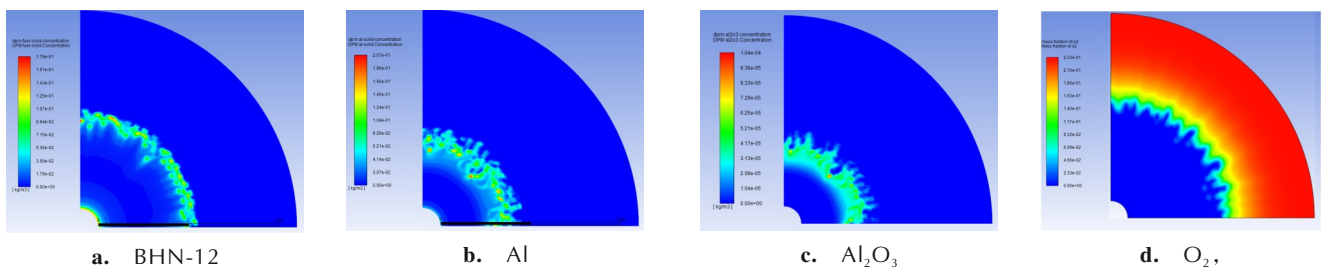


图 14 20 ms 时 BHN-12、Al、 Al_2O_3 、 O_2 分布云图

Fig. 14 Concentration cloud chart of BHN-12, Al, Al_2O_3 , and O_2 at 20 ms

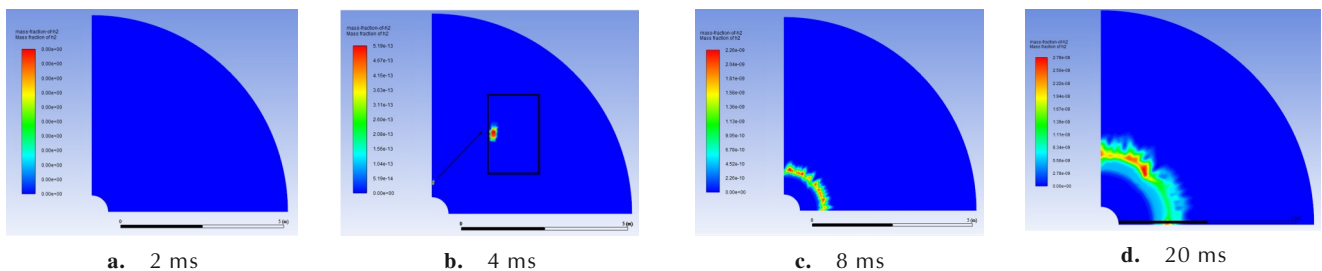


图 15 不同时刻 H_2 分布云图

Fig. 15 Cloud chart of H_2 concentration versus time

5 结论

(1) BHN-12 热分解过程在 314 °C 附近开始发生,在 360 °C 附近分解过程结束。在分解过程中出现三个放热峰和两个吸热峰,解过程总质量损失范围在 32.3%~33.9%。分解过程遵从幂级数法则(Mampel

power),动力学机理函数为 $G(\alpha) = \alpha^{1/2}$,指前因子 A_k 的对数值为 17.5,使用两种方法计算的活化能约为 $206.1\text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。

(2) BHN-12 分解过程气相产物主要由 H_2 、 C_2H_4 、 C_2H_6 和 NH_3 组成,固相产物主要为非晶态的单质 B 元素和 C 元素。分解过程表现为一步分解,在分解过程中首先会发生四乙基铵阳离子的 Hoffman 消除反应,

通过质子转移生成乙烯和 Et_3N , 随后 Et_3N 进一步分解为 H_2 、 C_2H_6 、 NH_3 和碳, 同时硼笼发生脱氢的作用。

(3) 用组分运输模型可较好地模拟 Al/BHN-12 体系的后燃烧反应过程。在后燃烧反应过程中, Al 燃料分散速度比 BHN-12 粒子的分散速度慢。20 ms 时, Al 燃料的分散半径约 2.5 m, BHN-12 的分散半径约 3 m。在反应初期 2 ms 时, 没有分解气体产生; 大约 4 ms 时气体产物开始出现, 火球中部的温度大约 1800 °C, 可提升整个体系的后燃反应温度约 300 °C。

参考文献:

- [1] Hansen B R S, Paskevicius M, Li H W, et al. Metal boranes: progress and applications [J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2016, 323: 60-70.
- [2] Schroeder M A, Fifer R A, Kaste P J, et al. Thermal decomposition of RDX in the presence of added KBH [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2001, 17(2): 441-448.
- [3] 马庆云. 复合火药 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1997: 46-62.
MA Qing-yun. Compound gunpowder [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1997: 46-62.
- [4] Pang W Q, Zhao F Q, Xue Y N, et al. Synthesis and characterization of a high energy combustion agent (BHN) and its effects on the combustion properties of fuel rich solid rocket propellants [J]. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2015, 12(3): 537-552.
- [5] 陈福泰, 谭惠民, 罗运军, 等. $\text{B}_{12}\text{H}_{12}[\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4]_2$ 对 NEPE 推进剂燃烧性能的影响 [J]. 火炸药学报, 2000, 23(3): 19-22.
CHEN Fu-tai, TAN hui-min, LUO yun-jun, et al. Effect of $\text{B}_{12}\text{H}_{12}[\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4]_2$ on the combustion property of NEPE propellant [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2000, 23(3): 19-22.
- [6] Koch E C, Klapötke T M. Boron-based high explosives [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2012, 37(3): 335-344.
- [7] Levitas V I. Burn time of aluminum nanoparticles: Strong effect of the heating rate and melt-dispersion mechanism [J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(2): 543-546.
- [8] Nair U R, Asthana S N, Rao A S, et al. Advances in high energy materials [J]. *Defence Science Journal*, 2010, 60(2): 137.
- [9] 裴明敬, 田朝阳, 胡华权, 等. 铝粉在温压炸药爆炸过程中的响应分析 [J]. 火炸药学报, 2013, 36(4): 7-12.
PEI ming-jing, TIAN chao-yang, HU hua-quan, et al. Response analysis of aluminum in the process of thermobaric explosive detonation [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2013, 36(4): 7-12.
- [10] Jiang F, Wang X, Huang Y, et al. Effect of particle gradation of aluminum on the explosion field pressure and temperature of RDX-based explosives in vacuum and air atmosphere [J]. *Defence Technology*, 2019, 15(6): 844-852.
- [11] 王兴龙, 温压炸药爆炸释能及铝粉反应完全性研究 [D], 南京: 南京理工大学, 2015.
WANG xing-long. Research on the regularity of thermobaric explosive energy release and the completeness of aluminum reaction [D], Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2015.
- [12] Zhou Z, Chen J, Yuan H, et al. Effects of aluminum particle size on the detonation pressure of TNT/Al [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2017, 42(12): 1401-1409.
- [13] 沈飞, 王辉, 徐司雨. 微/纳米粒度级配炸药爆轰波阵面 $D_n(\kappa)$ 关系的影响 [J]. 火炸药学报, 2018, 41(1): 61-65.
SHEN Fei, WANG Hui, XU Si-yu. Influence of Micro-/Nano-scaled particle gradation on the $D_n(\kappa)$ relation of detonation wave front [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2018, 41(1): 61-65.
- [14] Xing X L, Zhao S X, Wang X F, et al. The detonation properties research on TKX-50 in high explosives [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2019, 44(4): 408-412.
- [15] 姜帆, 王晓峰, 王晓红, 等. 十氢十硼酸双四乙基铵热分解特性及其动力学参数 [J]. 火炸药学报, 2020, 43(1): 57-63.
JIANG Fan, WANG Xiao-feng, WANG Xiao-hong, et al. Thermal decomposition characteristics and kinetic parameters of tetraethylammonium decahydrodecaborate [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2020, 43(1): 57-63.
- [16] 姜帆, 王晓峰, 牛余雷, 等. 十氢十硼酸双四乙基铵在冲击作用下的安定性 [J]. 火炸药学报, 2019, 42(6): 631-636.
JIANG Fan, WANG Xiao-feng, NIU Yu-lei, et al. Stability of BHN-10 under explosion and electric detonation shock waves. [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2019, 42(6): 631-636.
- [17] Chen Z, King R B. Spherical aromaticity: recent work on fullerenes, polyhedral boranes, and related structures [J]. *Chemical Reviews*, 2005, 105(10): 3613-3642.
- [18] Knoth W H, Miller H C, England D C, et al. Derivative chemistry of $\text{B}_{10}\text{H}_{10}^{2-}$ and $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1962, 84(6): 1056-1057.
- [19] Housecroft C E, Snaith R, Wade K. Bond enthalpies of borane anions $\text{B}_n\text{H}_n^{2-}$ [J]. *Inorganic and Nuclear Chemistry Letters*, 1979, 15(9-10): 343-347.
- [20] 单自兴, 绳利丽, 杨荣杰. 二十面体多硼氢 $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ 阴离子化合物及其在火炸药中的应用研究进展 [J]. 火炸药学报, 2017, 40(3): 1-16.
SHAN Zi-xing, SHENG Li-li, YANG Rong-jie. Research progress icosahedral polyhydroborate $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ anion compounds and their application in propellants and explosives [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2017, 40(3): 1-16.
- [21] 潘欣欣, 黄雪峰, 李盛姬, 等. 十二氢十二硼酸双四乙基铵的点火与燃烧特性 [J]. 火炸药学报, 2019, 42(6): 614-620.
PAN Xin-xin, HUANG Xue-feng, LI Sheng-ji, et al. Ignition and combustion characteristics of dodecahydrododecaborate bistetraethylammonium [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2019, 42(6): 614-620.
- [22] Olaru I. A CFD Analysis in solidworks flow simulation for two mixing fluids with different temperatures in nozzles [J]. *Journal of Engineering Studies and Research*, 2020, 26(1): 41-46.
- [23] Moen A, Mauri L, Narasimhamurthy V D. Comparison of $k-\epsilon$ models in gaseous release and dispersion simulations using the CFD code FLACS [J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2019, 130: 306-316.
- [24] Tulis, A J. Criteria for the detonation of aluminum particles dispersed in air [D]. Chicago: Illinois Institute of Technology, 1982.
- [25] Chan M L, Meyers G W. Advanced thermobaric explosive

- compositions: US6955732 B1[P], 2005.
- [26] Liang Y, Beckstead M. Numerical simulation of quasi-steady, single aluminum particle combustion in air [C]//36th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 1998; 254.
- [27] Yuan W, Kuang J, Liu P. Effect of Er (NO₃)₃ content on the thermal decomposition kinetics of kaolinite [J]. *Applied Clay Science*, 2019, 182: 105271.
- [28] Zhang L, Zheng X. Experimental study on thermal decomposition kinetics of natural ageing AP/HTPB base bleed composite propellant[J]. *Defence Technology*, 2018, 14(5): 422-425.
- [29] Bugajny M, Bras M L, Bourbigot S. Thermal behaviour of ethylene-propylene rubber/polyurethane/ammonium polyphosphate intumescent formulations-a kinetic study [J]. *Polymer Degradation & Stability*, 1999, 64(1): 157-163.
- [30] 李亚敏, 强西怀, 刘爱珍, 等. 丙烯酸树脂-壳聚糖复合涂膜非等温热分解动力学机理函数推测[J]. *功能材料*, 2017, 48(1): 1167-1171.
LI Ya-min, QIANF Xi-huai, LIU Ai-zhen, et al. Suggestion of the non-isothermal decomposition kinetic mechanism function for acrylic resin-chitosan flim [J]. *Journal of Functional Materials*, 2017, 48(1): 1167-1171.
- [31] Kaltchev M, Thompson A W, Tysoe W T. Reflection-absorption infrared spectroscopy of ethylene on palladium (111) at high pressure [J]. *Surface Science*, 1997, 391 (1-3): 145-149.
- [32] Parker L M, Bibby D M, Patterson J E. Thermal decomposition of ZSM-5 and silicalite precursors [J]. *Zeolites*, 1984, 4(2): 168-174.
- [33] 姜帆, 王晓峰, 冯晓军, 等. 固体储氢材料在炸药中的应用研究进展[J], *飞航导弹*, 2020(2): 90-95.
JIANG fan, WANG Xiao-feng, FENG Xiao-jun, et al. Research progress on the application of solid hydrogen storage materials in explosives [J]. *Aerodynamic Missile Journal*, 2020 (2) : 90-95.
- [34] 王维伦. 含氟硼有机物对含铝推进剂燃烧性能的影响[D]. 北京: 北京理工大学, 2016.
WANG Wei-lun. Effect of organic fluorine or boron containing additives on combustion performance of aluminized propellants[D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2016.
- [35] Frost D L, Goroshin S, Zhang F. Jet formation during explosive particle dispersal [J]. *Proceedings of the 21st Military Aspects of Blast and Shock*, Jerusalem, Israel, 2010.

Effect of Dodecahydrododecaborate Bistetraethylammonium on Combustion Reaction Mechanism of Aluminum Powder

JIANG Fan, NIU Yu-lei, BU Yu-fan, SUN Pei-pei, WANG Xiao-feng, NAN Hai, WANG Qiang

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

Abstract: To explore the effect of solid boron hydrogen fuel on the burning mechanism of aluminum powder, the simultaneous thermal analysis-infrared mass spectrometry technology and the pyrolysis in-situ cell-Fourier transform infrared spectroscopy technology were employed. Combining with the numerical model of the effect of BHN-12 on the burning reaction of aluminum powder in the explosion flow field, the mentioned experiment was introduced to study the reaction time, dispersion characteristics and combustion-supporting effect of boron-hydrogen fuel. Results show that the thermal decomposition process of BHN-12 started from 314 °C, and ended at 360 °C. There are three exothermic peaks and two endothermic peaks during the decomposition process with a total mass loss 32.3%-33.9%. The decomposition process obeyed the law of power series (Mampel power), and the dynamic mechanism function is $G(\alpha) = \alpha^{1/2}$. The gaseous products of the thermal decomposition are mainly H₂, C₂H₄, C₂H₆ and NH₃, and the solid products are simple substances of amorphous C and B. The component transportation model was introduced to simulate the after-burning process of the Al/BHN-12 system. During the process, the dispersion speed of Al fuel was slower than that of BHN-12 particles. At the time of 20 ms, the dispersion radius of Al fuel was about 2.5 m, but it was 3m for BHN-12. In the first 2 ms of the reaction, there was no gaseous product produced, until 4m the gaseous products came out with a temperature 1800 °C in the middle of the fire ball. BHN-12 could increase the after-burning temperature of the entire system by about 300 °C.

Key words: tetraethylammonium dodecahydrododecanoate; aluminum powder; thermal decomposition; after-burning reaction; mechanism

CLC number: TJ55; O64

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2021090

(责编:王艳秀)