

FOX-7 的热分解研究^①

金朋刚^② 常海 陈智群 刘子如 潘清 汪渊

(西安近代化学研究所 42 分箱 西安市丈八东路 168 号 710065)

摘 要 使用原位热红外光谱技术对 FOX-7 热分解全过程的气相和凝聚相产物进行了原位在线检测, 通过非等温热红外动力学处理技术, 获得了热分解过程中各特征官能团的断裂分解活化能($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)如下: C—N 键: 181.66, —NO₂ 键: 235.77, N—H 键: 170.65。提出了 FOX-7 可能的两步热分解机理: 第一阶段是分子共轭键、分子间(内)氢键的断裂、硝基和亚硝基重排“脱硝”释放出 NO, 第二阶段是残余碎片分解释放出 HCN 和 NH₃。结合 TG-DSC-IR 联用技术提出了 FOX-7 热分解的局部化学特性。

关键词 红外光谱分析, 1, 1-二氨基-2, 2-二硝基乙烯, 热分解, 原位热红外光谱分析, 热裂解质谱, 局部化学。

中图分类号: T Q 560.72; O 657.33

文献标识码: A

文章编号: 1004-8138(2006)04-0831-08

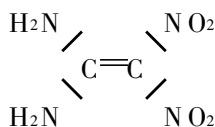
1 引言

FOX-7(1, 1-二氨基-2, 2-二硝基乙烯)是新型钝感高能炸药, 它的能量密度大于 1, 3, 5-三氨基-2, 4, 6-三硝基苯(TATB)、感度接近 TATB、耐热性能好, 是国家重点应用于武器装备的含能材料之一^[1]。本文用红外光谱(IR)技术、有机质谱(MS)分析研究了 FOX-7 热分解全过程的气相和凝聚相产物变化, 通过非等温热红外处理技术, 获得热分解过程的微观动力学参数, 并提出了可能的分子热分解机理, 为燃烧过程数学模型提供关键性的热力学和化学动力学参数, 并为含能材料的能量预估, 安全储存性能提供理论依据。

2 试验部分

2.1 试样

FOX-7(1, 1-二氨基-2, 2-二硝基乙烯)样品: 黄色晶体纯度为 99.7%, 化学结构:



2.2 仪器和实验条件

原位热红外凝聚相产物分析实验: 热裂解(T-Jump)原位池加热速率分别为: $5\text{K} \cdot \text{min}^{-1}$ 、 $10\text{K} \cdot \text{min}^{-1}$ 、 $15\text{K} \cdot \text{min}^{-1}$ 、 $20\text{K} \cdot \text{min}^{-1}$, 实时跟踪红外仪为美国 Nicolet 公司 Nexus 870 型红外光

① 国防火炸药中青年创新基金课题

② 联系人, 电话: (029) 88291727; 手机: (0) 13892883460; E-mail: jinpenggang@126.com

作者简介: 金朋刚(1978—), 男, 陕西省武功县人, 在读硕士, 从事火炸药燃烧和热分解研究。

收稿日期: 2006-03-02; 接受日期: 2006-04-19

谱仪, 制样方式为溴化钾压片, 光谱采集速率为 $25 \text{ 张} \cdot \text{min}^{-1}$, 分辨率为 4 cm^{-1} , 检测器为氘代硫酸三苷肽 (DTGS)。

热红外气相产物分析实验: CDS2000 型热裂解探头 (美国 CDS 公司), 实时跟踪红外仪为 Nicolet 公司 60SXR 型 FTIR 仪。试样量约 $1\text{—}2 \text{ mg}$, 平铺于热裂解探头的电热铂丝上, 红外光束在样品上方 $3\text{—}5 \text{ mm}$ 处通过, 探头升温速率为 $800^\circ\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$, IR 图谱采集分辨率 8 cm^{-1} , 光谱采集速率 $5 \text{ 张} \cdot \text{s}^{-1}$, 检测器为液氮致冷的碲镉汞型 (MCT)。

MS 试验: 采用 HP5989 型有机质谱仪 (美国惠普公司), 升温速率: $20^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$ 。

联用实验中的差示扫描量热与热重分析仪: STA449C 型热分析仪 (德国 NETZSCH 公司)

联用实验中的红外光谱仪: Nicolet 公司 Nexus 670 型红外光谱仪

显微温台仪: VEB Wägetechnik PHMK (俄罗斯大康公司)

3 结果与讨论

3.1 FOX-7 热分解的非等温动力学参数

本文将通常用于热分析技术的非等温动力学方法用于非等热红外分析 (其定义见下文) 的数据处理, 该方法的简单推导过程如下:

Coats-Redfern 法:

根据阿伦尼乌斯方程, 化学反应速率方程可表示为: $\frac{d\alpha}{dt} = A e^{-E/RT} f(\alpha)$ (1)

其中 α —— 反应深度, %; A —— 指前因子, s^{-1} ; E —— 反应活化能, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$; T —— 温度, K; t —— 时间, s; 反应深度 α 在热重实验中即以质量损失百分数为量值表示; 在原位热红外实验中以特征官能团红外吸收强度减少百分数为量值表示。 $f(\alpha)$ 即表示了反应速率与反应深度之间所遵循的函数关系, 称为反应的动力学机理函数的微分形式, 它一定程度地表示了反应的机理。机理函数的积分形式为: $g(\alpha) = \int \frac{d\alpha}{f(\alpha)}$, 升温速率 β 和反应温度 T 的关系式:

$$\beta = \frac{dT}{dt} \quad (2)$$

把 (2) 式代入 (1) 式, 分离变量后式两边分别积分:

$$\int \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{A}{\beta} \int e^{-E/RT} dT \quad (3)$$

对式 (3) 进行数学推导可以得到

$$\ln \frac{g(\alpha)}{T^2} = \ln \left[\frac{AR}{\beta E} \left(1 - \frac{2RT}{E} \right) \right] - \frac{E}{RT} \quad (4)$$

由于右边第一项不一定是常数, 所以需要经一定的合理的简化, 才可以通过线性回归获得 E 、 A 和 $g(\alpha)$ 。这就是普遍的 Coats-Redfern^[2] 方法。当 $E/RT > 20$ 时, 可以将上式简化为:

$$\ln \frac{g(\alpha)}{T^2} = \ln \left[\frac{AR}{\beta E_\alpha} \right] - \frac{E_\alpha}{RT} \quad (5)$$

以 $\ln(g(\alpha)/T^2) - 1/T$ 作图, 反应符合最可几机理函数时, 所作曲线应为一一直线 (以线性回归相关系数和最小偏差及活化能的经验值范围判断), 因此可确定反应过程的最可几机理函数 $g(\alpha)$ 或 $f(\alpha)$ 。可供选择的机理函数有 20 多种^[3]。

把程序升温加热的原位红外热解池获得物质特征官能团相对强度与温度 (时间) 的关系转变为

该特征官能团的转化率(或反应深度) α 与温度(时间)的关系曲线,该曲线我们称之为“原位红外热分析曲线”,用“TIR”表示,这种原位红外热解技术谓之“原位红外热分析技术”。

根据上述原则选择合适的机理函数 $g(\alpha)$,从原位红外热分析曲线上获得 $\alpha-T$ 关系数据,用方程(5)处理获得动力学参数。

3.2 热分解凝聚相分析

采用快速扫描红外分析技术,原位检测热反应过程凝聚相产物的特征红外吸收的变化,红外光束从加热原位池中样品透过,同步监测 FOX-7 在升温过程中官能团特征红外吸收强度的变化。 1238cm^{-1} 峰是 C—N 键(C—NO₂ 中的 C—N, 以下所指 C—N 与此处相同)的伸缩振动红外特征吸收峰, 1638cm^{-1} 峰是 N—H 键的弯曲振动特征峰, —NO_2 的特征伸缩振动峰为 1521cm^{-1} ,取它们的峰高相对值为相对吸收强度,它们的特征红外相对吸收强度随温度变化如图 1。将它们转变为不同升温速率下的转化率 α 与温度(时间)关系的红外热分析曲线分别见图 2、图 3、图 4,采用 Coats—Redfern 法式(5)获得 C—N 键、N—H 键和 —NO_2 键不同升温速率时的动力学参数,见表 1、表 2、表 3。不同升温速率时所求的活化能结果相对偏差在 2%—5% 之间,说明采用非等温原位热红外技术获得的物质红外特征官能团变化过程的反应动力学参数式可靠的,数据具有足够的重现性。将试验温度及上面所得活化能指前因子的数据带入,得到各官能团的 Arrhenius 方程曲线如图 5、图 6、和图 7。

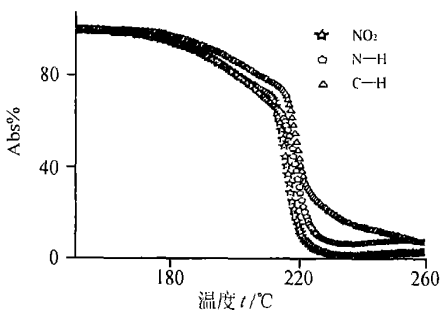


图 1 基团特征红外吸收强度随温度的变化

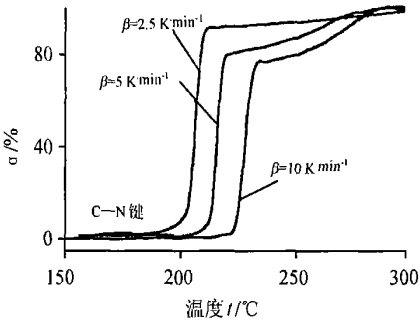


图 2 不同升温速率时 C—N 键的 TIR 曲线

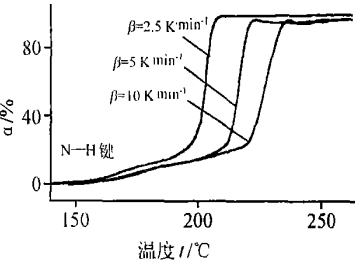


图 3 不同升温速率时 N—H 键的 TIR 曲线

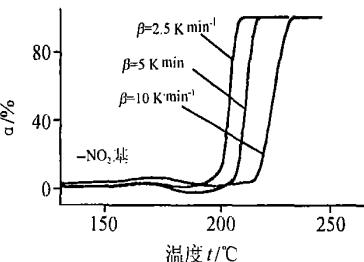


图 4 不同升温速率时 —NO_2 键的 TIR 曲线

将 FOX-7 结构中特征基团(—NH_2 、C—N、 —NO_2)转化率与温度的关系曲线中的数据带入 Coats—Redfern 方程中作动力学处理获得特征基团的热分解动力学参数如下各表 1、表 2、表 3。从表中计算的 CN 键活化能平均值为: $181.66\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, NH 键活化能平均值为: $170.65\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, —NO_2 基活化能平均值为: $235.77\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

表 1 CN 键动力学处理结果

升温速率 (℃/min)	活化能 E_a (kJ/mol)	指前因子 $\text{Ln}A$ (S-1)	机理函数方程 $g(\alpha)$	相关系数 r
2.5	178.96	38.67	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9963
5	186.67	42.632	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9873
10	179.34	40.410	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9909

表 2 NH 键动力学处理结果

升温速率 (℃/min)	活化能 E_a (kJ/mol)	指前因子 $\text{Ln}A$ (S-1)	机理函数方程 $g(\alpha)$	相关系数 r
2.5	170.128	37.393	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9963
5	170.587	38.240	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9917
10	171.227	38.586	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9944

表 3 NO₂ 键动力学处理结果

升温速率 (℃/min)	活化能 E_a (kJ/mol)	指前因子 $\text{Ln}A$ (S-1)	机理函数方程 $g(\alpha)$	相关系数 r
2.5	232.443	53.267	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9983
5	237.656	55.278	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9975
10	237.207	55.169	$[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$ 成核和生长($n=3$) Avrami-Erofevey 方程	0.9979

根据 Arrhenius 方程,将试验温度及上面所得活化能指前因子的数据带入,得到各官能团的 Arrhenius 方程曲线如下:

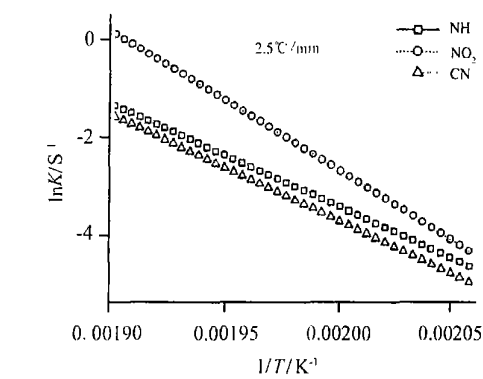


图 5 FOX-7 的 Arrhenius 曲线

($\beta=2.5\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$)

从计算所得的 Arrhenius 方程曲线图 5、6 和 7 可以看出 FOX-7 在发生热分解时主要是以“掉硝基”为主,“掉硝”引起了整个分子结构发生了变化,导致整个分子的最终分解。

实验结果显示:从 150℃ 时开始, $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NO}_2$ 特征 IR 吸收强度降低先于 C—N 键特征 IR 吸收,在 210℃ 左右 FOX-7 开始分解,此时出现 2217cm^{-1} 峰,并随着温度的升高位移到 2165cm^{-1} ,推测其可能是由有机氰转变到无机氰的过程。 CO_2 峰: 2368cm^{-1} 、 2325cm^{-1} 和 669cm^{-1} 也相当明显,到 260℃ 时 FOX-7 的特征红外吸收强度不再降低,反应到达了终点。

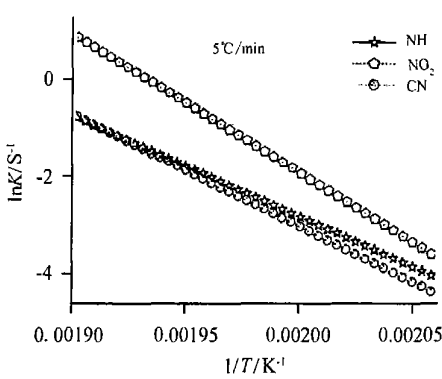


图 6 FOX-7 的 Arrhenius 曲线

($\beta=5\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$)

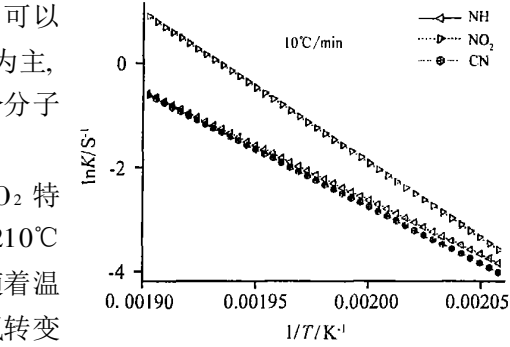


图 7 FOX-7 的 Arrhenius 方程曲线图

($\beta=10\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$)

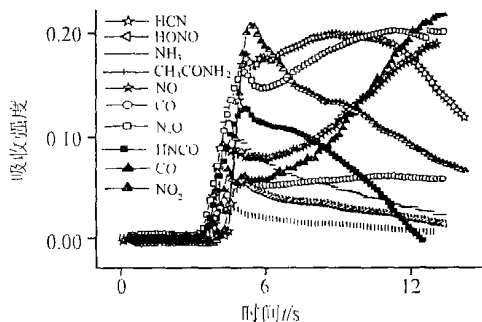


图8 FOX-7热分解气体产物
红外特征吸收强度

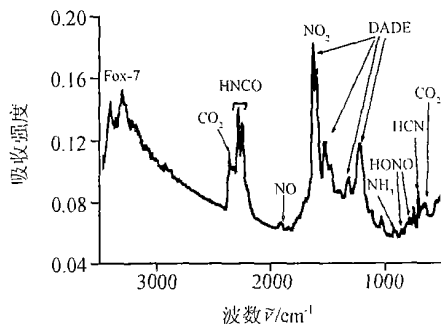


图9 FOX-7热分解气体产物
红外光谱图(约 215℃)

3.3 热分解气相产物及裂解质谱结果分析

T-Jump 原位池与快速扫描红外联用实验中, 采用T-Jump 升温技术模拟含能材料瞬间热分解过程, 原位裂解探头温度从室温以 $50^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速率升至 700°C 并持续 2s。红外分析仪在线检测 FOX-7 热分解的气相产物, 检测到的气体有: NO、HNCO、HONO、 CO_2 、CO、 N_2O 、HCN、 NH_3 、升华的 FOX-7 和 NO_2 。3.15s (大约 215°C) 时的气相产物红外光图谱如图9 所示。图9 中结果显示首先检测出 NO 气体, 说明热分解初期存在“脱硝”过程。之后检测到的是 CO_2 、CO、HCN、 N_2O 、 NH_3 等气体是样品进一步分解的产物。它们的特征红外吸收强度随温度的变化见图8。 CH_3CONH_2 、HNCO、 NH_3 、 NO_2 、HONO 等产物的红外吸收强度都随时间先增加后降低, 有的产物(如: CH_3CONH_2 、HNCO)吸收强度降到了零, 这些气体是中间产物, 它们在生成之后可能又分解或者是参加了二次反应, 从而导致吸收强度降低; NO、 N_2O 、 CO_2 、HCN 的红外吸收强度随时间的推移有两次吸收强度增加的过程, 这说明有两个过程都生成了这些气体; 其中 HCN 在第二次红外吸收强度增加之后又有一个强度下降的过程, 这可能是由于后期的反应消耗了 HCN 所致。在整个反应过程中可能只有前期的反应中生成了 CO 气体, 因此 CO 在生成之后红外吸收强度就基本保持恒定。这些信息是推测 FOX-7 热分解反应机理的依据。从 FOX-7 的热裂解质谱行为中 $m/Z = 30$ 离子丰度最高见图10, 也证实了一 NO_2 裂解释放出 NO 的热分解特征。热解质谱图中 $m/Z = 148$ 离子为 FOX-7 的分子离子峰, 这也证实了 FOX-7 具有较好的耐热性能。

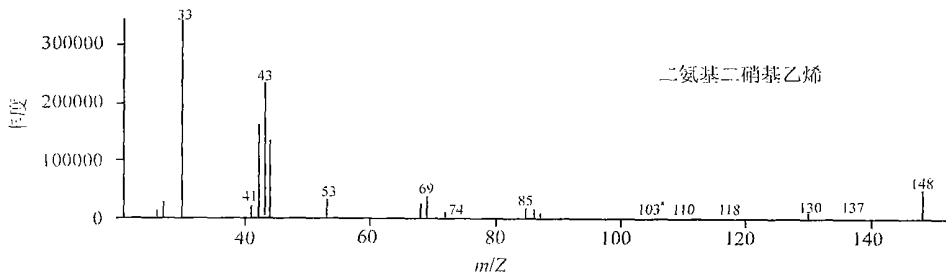


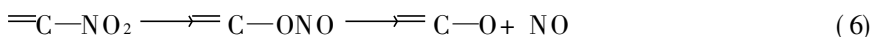
图10 FOX-7热裂解质谱图

4 FOX-7 热分解机理分析

FOX-7 化学结构显示: N 原子上孤对电子与 $\text{C} \equiv \text{C}$ 和 $-\text{NO}_2$ 的形成共轭体系, 并且分子间和分子内存在着 $-\text{NH}_2$ 与 $-\text{NO}_2$ 形成的氢键, 这些使 FOX-7 的热稳定性较好, 感度低, 易于升华。热

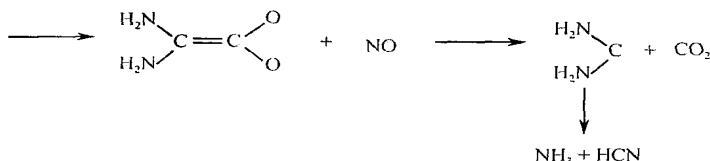
分解初期,温度的升高打破了这种共轭体系及氢键,使分子内价键间电子云的初始平衡状态发生变化,随后是FOX-7上的一NO₂断裂。表现在—NH₂的特征红外吸收首先降低,接着是NO气体的释放。因此,可以认为FOX-7热分解的初期阶段是以其共轭体系的破坏为特征的,这与资料报道一致^[5-7]。

文献报道的硝基与亚硝基的重排释放出NO时的活化能是247.3 kJ·mol⁻¹,脱硝基释放出NO₂的活化能是305.3 kJ·mol⁻¹^[8];上述非等温红外动力学处理获得—NO₂断裂反应初期活化能的平均值是:235.77 kJ·mol⁻¹,与上述NO₂重排过程文献报道值接近;热裂解气相产物中首先检测出NO气体;再者,热裂解质谱图中M 30离子有最高丰度;这可以认为是硝基和亚硝基互变反应放出NO气体。因此,FOX-7的热分解步骤首先按(6)式:

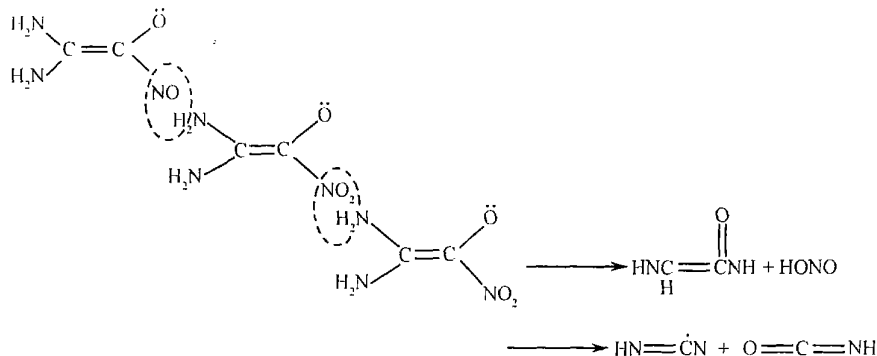


质谱中M 43分子碎片可认为是: $\text{H}_2\text{N} \longrightarrow \equiv\text{NH}^+ \text{NH}^+$ 离子或者HNCN,其丰度在M 30离子之后,居其次。因此,发生重排后分子内继续分解成小分子或分子间质子向另一硝基转移放出HONO,继而是碳骨架的断裂,FOX-7热分解的第二个阶段有两种可能是:

(1) 分子内继续分解:



(2) 分子间分解:



5 结论

用非等温原位热解红外技术(TIR)研究了FOX-7的热分解,两种非等温动力学处理方法获得的动力学参数具有一致性,该方法能够为含能材料主要官能团热分解研究提供许多微观上的信息。获得了热分解中化学键断裂的活化能,通过IR和MS分析技术对FOX-7热分解过程中气体产物和凝聚相的分析,提出了热分解反应的第一阶段是其共轭体系的破坏和硝基与亚硝基互变释放出NO;骨架断裂成小分子的分子间反应是FOX-7热分解反应的第二阶段。

6 FOX-7的局部化学反应

在对FOX-7的研究中,研究者发现不论是热重还是差示扫描量热法,都有两个过程,许多人如Ticmanis^[9]提出了有中间产物的生成,Ticmanis等人利用NMR、X-ray散射、IR和HPLC 4种技术

研究了中间产物和 FOX-7, 但没有得到二者之间的区别; 从本文中固体原位池试验中相同于 TG 第一各阶段时的温度下没有发现有不同于 FOX-7 的新物质的生成; 显微温台实验结论: 用显微温台仪观察大粒度 (100—300 μm) FOX-7 晶体的热解过程表明, 当温度升至 120 $^{\circ}\text{C}$ 时原半透明的亮黄色晶体表面出现了细细的丝线一般的裂纹, 随着温度的增加裂纹也在变长、变多、变粗, 晶体的侧边透光性下降, 但中间仍然是半透明的亮黄色, 当温度升至 165 $^{\circ}\text{C}$ 时晶体从裂纹处裂开, 变成较小的晶体, 当温度升到 210 $^{\circ}\text{C}$ 时, 温台显微镜下看到的是不透明的亮黄色小晶体, 到 260 $^{\circ}\text{C}$ 时看到小晶体上面长出刺来了, 接着发生剧烈的分解反应, 没有观察到有熔点。这与 DSC 的结论是相吻合的。

这些现象可以用“局部化学反应”^[10, 11]的理论解释: FOX-7 晶体表面上存在微小的裂纹或晶格缺陷 (即晶体不完整), 在这些力场不饱和点上容易形成许多潜在反应中心 (核), 在加热条件下, 这些潜在反应中心首先开始反应 (“成核”), 并按支链过程产生更多的反应中心 (“核成长”)。同时由于凝聚相产物的积累, 使晶体产生了附加的应力, 并因此使晶体破裂。这种过程的反复进行使一部分 FOX-7 产生分解, 并形成许多细小粒度的晶体。对于小粒度 FOX-7 而言, 由于颗粒小, 内应力也小, 生成产物形成的内应力, 不足以使 FOX-7 颗粒破裂形成更小颗粒。因此, 只有当温度升高到一定的程度小颗粒才会分解。所以, 用 NMR、X 射线散射、IR 和 HPLC 等方法无法检测出中间产物也是很正常的。

从固体原位池计算的结果中也可以看出来 FOX-7 的分解是属于成核和生长 ($n=3$) 类型的 Avrami-Erofeyev 方程。下面的联用试验是其局部分解的另外一个证据。

联用试验红外结论:

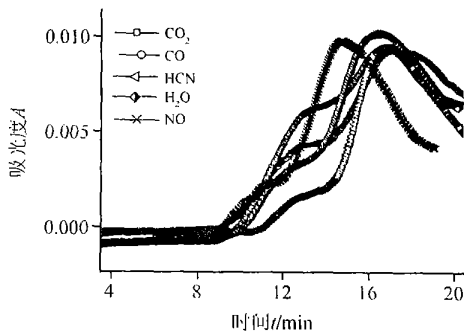


图 11 TG-DSC-红外联用气体产物的红外吸收与时间曲线

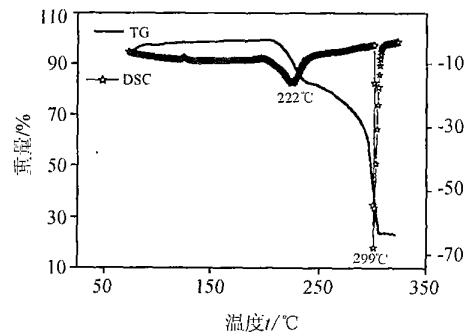


图 12 TG-DSC-红外联用的 TG-DSC 图谱

在 FOX-7 的联用试验中可以看出: (1) 在 FOX-7 热分解的过程中联用试验所检测到了 5 种气体产物分别是: N_2O 、 CO_2 、 NO 、 HCN 、 CO 。(2) 在 FOX-7 的热分解两个过程中这些气体产生过程与之对应也都是两个过程, 生成的气体及气体的生成顺序也是相同的, 这说明在 FOX-7 的这两个分解过程中发生的热分解反应是相同的, 是部分的 FOX-7 首先在大晶体的缺陷处发生分解反应, 使大晶体破裂成小晶体, 当温度再升高到一定值时, 小晶体开始以同样的方式分解, 因此, 这两个阶段生成的气体的产物是相同的。这同时也为 Ticmanis 等人无法将他们认为的可能的反应中间体与 FOX-7 本身区别开找到了原因。实践证明局部化学过程的存在对含能材料的热分解, 热安定性和相容性以及贮存寿命都会产生很大的影响。

原位红外热分解技术应用于新型钝感炸药 FOX-7, 获得了 FOX-7 红外特征官能团的动力学参数, 提出了 FOX-7 可能的两种分子热分解机理, 红外技术与热分解联用解决了传统热分析中难以

解释的两个温差较大峰但却无中间产物的现象,显示了红外技术与传统热分析相结合的优越性。

参考文献

- [1] 蔡华强,舒远杰. 1,1-二氨基-2,2-二硝基乙烯的研究进展[J]. 含能材料, 2004, **12**(2): 9.
- [2] Coats A W, Redfern J P. Kinetic Parameters from Thermogravimetric Data[J]. *Nature*, 1964, **201**(4914): 68—69.
- [3] 刘艳. 热分析技术在含能材料热分解中的新应用[D]. 西安: 西安近代化学研究所, 2003.
- [4] 胡荣祖, 史启祯. 热分析动力学[M]. 北京: 科学出版社, 2001. 8.
- [5] Asta G, Lou M, Lulu H *et al.* Proposed Mechanism of 1, 1-Diamino-2, 2-Dinitroethylenedecomposition: A Density Functional Theory Study[J]. *J. Phys. Chem.*, 1999, **5**(2): 71—83.
- [6] Ostmark H *et al.* 1, 1-Diamino-2, 2-Dinitroethylene(FOX-7)—Properties, Analysis and Scale-up[A]. *32th International Annual Conference of ICT*[C]. Karlsruhe: 2001.
- [7] Holmgren E, Goede P, Latypov N. Porous Graphitic Carbon (PGC)—A Convenient Column Packing Material for the HPLC Analysis of FOX-7[A]. *32th International Annual Conference of ICT*[C]. Karlsruhe: 2001.
- [8] Brill B, Kenneth J J. Kinetics and Mechanisms of Thermal Decomposition of Nitroazomatic Explosives[J]. *Chem. Rev.*, 1993, **93**: 2667—2692.
- [9] Ticmanis U, Kaiser M, Pantel G, Fuhr I, Teipel U. Kinetics and Chemistry of Thermal Decomposition of FOX-7[A]. *35th International Annual Conference of ICT 会议文集*[C]. Karlsruhe: 2004, 70.
- [10] 刘子如, 张明南. 晶体完整性对炸药热分解的影响[J]. 兵工学报, 1979, **12**(1): 28—37.
- [11] 刘子如, 吴承云, 孔杨辉. 硝基化合物的局部化学——一种表面化学过程 全国结构化学第四次学术论文摘要集[C]. 福州: 1988, 197—198.

Investigation on the Decomposition of FOX-7

JIN Peng-Gang CHANG Hai CHEN Zhi-Qun LIU Zi-Ru PAN Qing WANG Yuan
(Xi'an Modern Chemistry Institute, Xi'an 710065, P. R. China)

Abstract The whole process of the thermal decomposition of FOX-7 was investigated by thermolysis in-situ cell rapid scan IR. The activation energy of C—N, —NO₂, N—H were obtained by using thermo-IR isothermal kinetic method as 181. 66, 235. 77 and 170. 65 kJ · mol⁻¹, respectively. There are two steps in thermal decomposition process of FOX-7. In the first step, the hydrogen bond dissociation and the isomerization of the —NO₂ group occur and NO releases. In the second step, the dissociation of the main bond of FOX-7 occurs and at the same time HCN, NH₃ are released. By using the result of TG-DSC-IR, the thermal decomposition topochemistry of FOX-7 was characterized.

Key words Infrared Spectroanalysis, FOX-7, Thermal Decomposition, In-Situ Thermal Infrared Spectroanalysis, Thermal Decomposition MS, Topochemistry.