https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20240058

气相爆轰合成中爆轰特性对TiO2颗粒尺寸的影响

吴林松^{1,2,3},王星之³,路世伟³,陈 翔^{1,2},闫鸿浩⁴

(1. 江汉大学 精细爆破国家重点实验室,湖北 武汉 430056)
(2. 江汉大学 爆破工程湖北省重点实验室,湖北 武汉 430056)
(3. 长江大学 城市建设学院,湖北 荆州 434023)
(4. 大连理工大学 工程力学系,辽宁 大连 116024)

摘 要:本工作研究了TiO₂在瞬时高温高压的气相爆炸反应过程中的纳米颗粒生长特性。采用计算流体动力学模拟了气体爆 炸在爆轰管内的火焰传播过程和温度-时间历程关系,并将其引入颗粒生长模型,通过试验对该模型进行修正。结果表明, 在气相爆轰反应中,反应温度和时间是影响其颗粒生长的主要因素,提出了粒径修正系数*k* 对经典的颗粒生长模型进行改 进,改进后的数值模型可以较精确预测TiO₂纳米颗粒的生长特性,这为TiO₂纳米颗粒的可控合成提供了有效的理论支持。

关键词: TiO₂; 气相爆轰; 数值模拟; 颗粒生长; 颗粒粒径

中图法分类号: O389 文献标识码: A 文章编号: 1002-185X(2025)04-1008-07

1 引言

二氧化钛具有卓越的氧化还原能力、超强的亲水性、 化学稳定性和耐久性、无毒性和低成本,被认为是目前正 在开发的最有前途的纳米材料之一^[14]。气相爆轰合成 是利用可燃气体爆轰时产生的瞬间高温、高压和高爆速 等特点制备纳米材料的一种新方法,具有操作简单、高 效、经济、节能和环保等特点。李晓杰等^[5]首次报道了气 相爆轰法制备纳米二氧化钛。以氢气和空气为爆炸源, 四氯化钛为反应物,一步制备出粒径为10~20 nm 的二氧 化钛粉末。Wu等人^[6-7]采用气爆法制备了纳米 TiO₂ 复 合材料,并对其光催化性能进行了表征,结果表明 TiO₂ 复合材料具有优异的光催化性能。罗宁等^[8-9]对爆轰管 进行了全面的爆轰参数分析,优化设计了新型的气相爆 轰管,并成功合成了纳米 TiO₂。

研究人员对气相爆轰过程中纳米材料的合成机理、 影响因素和颗粒生长进行了深入研究。闫鸿浩等^[10-11]研 究了初始温度、初始压力和前驱体用量对纳米二氧化钛 微观形貌的影响。Wu^[12-13]和Zhao^[14]等通过实验研究了 气爆法合成的TiO₂纳米粒子的生长机理,并建立了气爆 参数与TiO₂光催化活性之间的关系。陈天梧^[15]、赵铁 军^[16]和Luo^[17]等将单分散Kruis模型引入气爆流场,初步 模拟了球形纳米TiO₂颗粒的生长过程,指出反应温度、 颗粒浓度和反应时间是影响颗粒生长的主要因素。

气相爆轰合成过程是一个集高温、高压和高速于一

体并伴有大量能量释放的复杂的理化过程。由于爆炸合成过程的复杂性和纳米材料自身的特性,气相爆轰合成纳米材料的相关机理研究仍不完善,但在如此极端的条件下,纳米材料的生长特性一直是困扰许多研究者的问题之一。正确选择粒子生长模型以准确预测目标纳米颗粒的生长特性,进一步揭示纳米粒子在气体反应中的生长机制,仍然是本研究领域中的难题之一。

综上所述,本研究通过计算流体动力学(CFD)软件 对爆轰管中爆轰过程进行模拟,并将其引入经典的颗粒 生长模型,通过实验研究确定不同爆轰特性下TiO₂颗粒 的平均粒径,改进了经典的颗粒生长模型,并对气相爆轰 中TiO,的生长特性进行了研究。

2 实验与模拟

2.1 爆轰特性的数值模拟

采用 CFD 软件对气体爆轰管内的爆轰过程进行了 模拟。为确保数值模拟的准确性和收敛性,采用了重整 化群(RNG) k-e 湍流模型,它通过求解湍流动能(k)和湍 流耗散率(ε)的输运方程来确定湍流的特性,如湍流强 度、湍流尺度等。鉴于多组分气体混合和反应的复杂性, 选择了氢氧爆轰反应的通用有限速率模型。湍流-化学 反应由氢气-空气理想气体状态方程的涡旋耗散概念表 示。考虑到网格划分对模型计算精度的影响,在二维表 面区块建立了一个尺寸为1100 mm×120 mm 的封闭圆 管。网格划分用于直接对求解区域进行结构化网格划

收稿日期:2024-04-30

基金项目:国家自然科学基金(12302436);精细爆破国家重点实验室、湖北省爆破工程重点实验室开放基金(BL2021-17)

作者简介:吴林松,男,1989年生,博士,副教授,长江大学城市建设学院,湖北 荆州 434023,E-mail: wulinsong@yangtzeu.edu.en

分,单元尺寸为2mm,如图1所示。在模拟中,选择了H₂ 作为可燃气体,使用Patch对预混合气体进行点火,将半 径为2mm的点火源设置在管道的最左侧,点火源的坐 标为(0.01,0.06)。温度*T*=400 K,初始绝对压力为1大气 压,点火的初始温度设定为1000 K,压力设定为10 MPa。 采用了 SIMPLE 算法,模拟步长设定为0.5×10⁵,最大迭 代次数设定为10。

2.2 颗粒生长模型

为更好地理解气体爆轰反应中颗粒生长的机制,采 用了基于单分散的改进Kruis模型^[18],该模型假设聚合颗 粒和原生粒子在单分散性的前提下,以质量分型描述聚 合颗粒结构,从而提出了一个描述非等温条件下聚结和 烧结中聚合颗粒体积和表面积演化的模型。该模型的基 本思想是:处于高温流场中的颗粒由于不断连续碰撞而 凝结在一起,当温度较高时,颗粒的凝结速度明显大于其 碰撞速率,从而易形成球状颗粒;当温度降低或者颗粒较 大时,则会形成带有树枝状的颗粒聚集块。

本研究中的颗粒动力学模型,包括单位质量混合气 内颗粒或者颗粒聚集块的数量,即数量密度N、单个颗粒 或者聚集块体积v和表面积a随颗粒在火焰中停留时间 (t)的变化关系式遵循基本的凝聚方程:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{2}\beta N^2 \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{N} \cdot \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} v \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{N} \cdot \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} a - \frac{1}{\tau} \left(a - a_{\mathrm{s}} \right) \tag{3}$$

其中, β 是颗粒凝聚的单分散碰撞频率, τ 是特征烧结时间, a_s 是完全熔化成球形颗粒的聚集体的表面积, $a_s = a_0(v/v_0)^{2/3}$, a_0 和 v_0 分别是单体颗粒的表面积和体积。

在一个聚合体中初级颗粒的直径*d*_p、初级颗粒的数量*n*_n和初级颗粒的体积*v*_n满足如下公式:

$$d_{\rm p} = \frac{6v}{a}; v_{\rm p} = \frac{\pi d_{\rm p}^3}{6}; n_{\rm p} = \frac{v}{v_{\rm p}}$$
(4)

由于布朗运动,TiO₂颗粒在有限时间内相互碰撞并 融合成新的微晶体。Kobata等人提出,2个TiO₂颗粒通 过颗粒边界扩散融合的特征烧结时间为^[19]:

$$\tau = 1.4 \times 10^{21} r_{\rm p}^4 \exp\left(\frac{258 \, \text{kJ/mol}}{RT}\right)$$
(5)

TiO₂颗粒之间的碰撞频率可以用以下方程表示:

$$\beta = 8\pi Dr_{\rm c} \left(\frac{r_{\rm c}}{2r_{\rm c} + \sqrt{2} g} + \frac{\sqrt{2} D}{cr_{\rm c}} \right) \tag{6}$$

初级颗粒的碰撞半径r。的定义为:

$$r_{\rm c} = r_{\rm p} \left(v/v_{\rm p} \right)^{1/D_{\rm f}} = r_{\rm p} n_{\rm p}^{-1/D_{\rm f}} \tag{7}$$

其中,r_p为初级粒子半径(r_p=d_p/2),D_f为质量分型维数。 碰撞半径特征如下:(1)如果聚集体中初级粒子数量减少 到1,则碰撞半径等于初级粒子半径:(2)对于颗粒数量 大于1的聚集体,碰撞半径近似等于聚集体的回转半径。

颗粒扩散因子D,颗粒速度c,转换参数g符合以下 关系:

$$D = \frac{k_{\rm b}T}{6\pi\mu r_{\rm c}} \cdot \left[\frac{5 + 4Kn + 6Kn^2 + 18Kn^3}{5 - Kn + (8 + \pi)Kn^2}\right]$$
(8)

其中:
$$Kn = \frac{\lambda}{r_c}$$
 (9)

$$\lambda = \frac{1}{4\sqrt{2} n r_{\rm c} \pi} \tag{10}$$

$$c = \sqrt{\frac{8k_{\rm b}T}{\pi\rho_{\rm o}\nu}} \tag{11}$$

$$g = [1/(6r_{\rm c}l)][(2r_{\rm c}+l)^3 - (4r_{\rm c}^2+l^2)^{2/3}] - 2r_{\rm c} \quad (12)$$

$$l = \frac{\partial D}{\pi c} \tag{13}$$

其中, k_b 代表玻尔兹曼常数, λ 是气体分子的平均自由程, ρ_p 是初级颗粒的密度, μ 代表流体的动力粘度,Kn是 Knudsen数,l代表扩散长度,n为气体分子的数密度。

为计算多聚物颗粒的碰撞系数,需要确定碰撞体积 半径与多聚物颗粒的体积和表面积之间的关系:

$$r_{\rm c} = \frac{3v}{a} \cdot \left(\frac{a^3}{36\pi v^2}\right)^{1/D_{\rm f}}$$
(14)

这里假设聚结而成的粒子的分形系数并不因烧结而 改变。通过联立计算上述公式,可以确定不同温度和时 间下TiO,颗粒的生长情况。

2.3 实验

在本研究中,使用了TiCl₄(分析纯,中国国药集团化 学试剂有限公司)作为前驱体,H₂和O₂作为爆炸源。样 品制备使用定制的气体爆轰管,其内径为120 mm,长度 为1100 mm,配备了火花塞、气阀、真空计和温控装置,示 意图如图2所示,试验参数见表1。首先,将爆轰管加热 至400 K,然后使用真空泵将爆炸管抽真空至-0.09 MPa。 随后,注入前驱体,加入一定量的H₂和O₂。混合均匀后 进行爆炸。最后,收集粉末样品。实验中的化学反应方 程如下:

 $2H_2(g)+O_2(g)\rightarrow 2H_2O(g)+483.6 \text{ kJ}$

$$\text{FiCl}_4(g) + 2\text{H}_2\text{O}(g) \rightarrow \text{TiO}_2(s) + 4\text{HCl}(g) + 47.57 \text{ kJ}$$

合成的 TiO₂样品的形态和结构使用透射电子显微 镜(TEM,Tecnai F30;加速电压300 kV;点分辨率0.2 nm;线分 辨率 0.1 nm;放大倍数 70×-10mill.×; FEI,美国)进行 研究。









图2 气体爆轰管示意图

Fig.2 Schematic diagram of gaseous detonation tube

3 结果与讨论

3.1 爆轰参数的数值模拟

TiO₂颗粒生长模型表明TiO₂的颗粒大小与温度和时间密切相关,而在气相爆轰法中,温度与时间作为爆轰参数并不是一个定值,而是与初始条件密切相关的,因此,采用CFD数值模拟研究爆轰管内的爆轰过程是必要的。 图3展示了管内预混H₂/Air气体的不同时间间隔内的燃

Table 1 Experimental parameters					
No.	H_2 content/vol%	Ignition temperature/K	Dosage of TiCl ₄ /mL	Initial temperature/K	Initial pressure/MPa
1	12	1000	5	400	0.1
2	25	1000	5	400	0.1
3	37	1000	5	400	0.1
4	50	1000	5	400	0.1
5	37	1000	5	400	0.1
6	37	1500	5	400	0.1
7	37	2000	5	400	0.1
8	37	2500	5	400	0.1

表1 试验参数

烧过程。如图3所示,在管内燃烧预混H₂/Air气体的过程中,火焰的结构和形态发生了显著变化。在时间0时, 点火引起燃烧区向外扩展,形成半圆形火焰。在火焰前 部出现非常薄的预热区或火焰厚度,预混气体以层流火 焰向外移动。由于上下管壁的限制和气压的反射,轴向 火焰传播速度超过径向火焰传播速度,火焰前沿在轴向 方向逐渐拉长。在50ms时,预混H₂/Air的燃烧火焰从半 球形变为半椭圆形(指尖火焰),火焰前沿的温度较火焰 前方的反应区更高。火焰前沿的预热区厚度逐渐增加, 而径向火焰前沿逐渐达到管壁。受到管壁的约束,边界 处的湍流加速了火焰的传播。由于壁面剪切流,管道表 面的火焰慢慢追赶上管道中心线处的火焰前沿,逐渐从 椭圆形变为平面火焰,如图3c所示。由于火焰在壁面的 较快传播,上下两侧的火焰随着燃烧火焰向前传播而拉伸。这导致预混燃烧火焰从最初燃烧方向凸起的火焰形状变为凹起,通常称为"郁金香"火焰前沿。如图3d~3f 所示,表面最初呈对称的"郁金香"形状,两侧有折叠的火焰。随着火焰顺利传播到管道右端,折叠逐渐消失。靠近右壁时,通过壁面的反射来阻挡上下壁的火焰传播,使得"郁金香"火焰的凹陷深度逐渐减小。与之对应的是随着火焰形态的变化,管内温度也会随之变化。

图4a是不同氢气含量下温度随时间的变化曲线,管 道内的预混气体被点燃后,爆温迅速达到最高值,之后管 内温度开始降低,曲线呈稳定下降趋势;氢气含量为 12%、18%、25%、32%、37%、50%,最高温度分别为1280、 1705、2177、2640、2968和3802K,同时,爆轰温度达到峰



图3 管内火焰传播过程

Fig.3 Process of flame propagation in the tube: (a) 0 ms; (b) 15 ms; (c) 100 ms; (d) 300 ms; (e) 400 ms; (f) 500 ms

值以及所用的时间也发生了明显变化,爆轰温度在 1280~3802 K范围内随时间呈指数衰减。图4b是氢气含 量为50%时的爆温随时间变化的拟合曲线,在气相爆轰 法中,温度并非恒定不变的,这给颗粒生长模型的计算带 来困难,因此将温度T视为一个随时间变化的函数。

图 4c 显示了不同点火温度条件下管内爆温随时间的变化曲线,预混气体被点燃后迅速发生爆轰反应出现 温度峰值,反应结束后管内温度逐渐降低,分别用1000、 1500、2000、2500和3000K的点火源点燃相同比例的氢 氧预混气体,不同点火温度下的爆轰反应均在相同的时 间达到最高温度,爆温随着点火温度的增高而略有增高, 当点火温度为1000K时,爆轰最高温度为3155K。图4d是 起爆温度为1000K时爆温随时间变化的拟合曲线。

3.2 TiO,颗粒形貌

图5为不同氢气含量制得样品的TEM照片和平均 粒径统计,爆温的不同对产物的形貌粒径有着重大影响。 样品1粒径分布较为平均,团聚明显,没有明显的大颗 粒,颗粒形貌不规则,粒径在20~180 nm之间,平均粒径 在70 nm左右。样品2粒径分布在20~200 nm之间,平均 粒径98 nm左右,颗粒形貌更规则,团聚减弱。样品3粒 径在40~240 nm之间,平均粒径在117 nm左右,颗粒主 要为球形,并有少量的小颗粒和多边形,分散性良好。样 品4粒径分布范围在100~240 nm之间,平均粒径约为 156 nm,颗粒为球形。结果表明爆温与粒径正相关,爆温 相对较低时,生成的TiO₂颗粒的粒径较小,随爆轰温度 升高,平均粒径从70 nm增大至156 nm。随着H₂含量的 增加,爆温也相对升高,样品的颗粒粒径将会逐渐增大、 球形度也越来越好。这是由于在爆温提高的情况下,颗 粒间碰撞加剧,生长速率和凝并速率提高,从而导致粒径 增大;同时颗粒间凝并速率大于碰撞速率,易形成球状颗 粒。而在爆温较低的情况下碰撞速率大于凝聚速率,则 易形成树枝状的颗粒聚集体。

图 6 是不同起爆温度制得样品的 TEM 照片和平均 粒径统计,所有样品粒径分布在 40~240 nm之间,颗粒形 貌以球形为主,并有少量多边形;分散性良好,算数平均 粒径分别约为129、134、139和151 nm。样品平均粒径差 别不大,表明起爆温度对样品的形貌和平均粒径影响不 大,均在130~150 nm之间。

3.3 颗粒生长分析

纳米 TiO₂粒子的合成是在气相混合物前驱体的快速气相化学反应中进行的。颗粒由原子/分子一直构建到所需的纳米尺寸颗粒。传统的颗粒生长模型并没有考虑到气相爆轰法中瞬时的高温高压,也没有考虑 TiO₂颗粒相变对粒径的影响^[20],因此,本工作通过数值模拟方法得到不同条件下爆轰管内爆温随时间的变化曲线并带入





Fig.4 Variation curves of explosion temperature with time under different conditions: (a) different H₂ contents; (b) fitting curve under 50% H₂ content; (c) different ignition temperatures; (d) fitting curve under ignition temperature of 1000 K



图5 不同氢气含量下样品的TEM照片和平均粒径

Fig.5 TEM images $(a_1 - d_1)$ and mean particle sizes $(a_2 - d_2)$ of samples at different H₂ contents: (a_1, a_2) sample 1; (b_1, b_2) sample 2; (c_1, c_2) sample 3; (d_1, d_2) sample 4





Fig.6 TEM images (a_1-d_1) and mean particle sizes (a_2-d_2) of samples at different ignition temperatures: (a_1, a_2) sample 5; (b_1, b_2) sample 6; (c_1, c_2) sample 7; (d_1, d_2) sample 8

颗粒生长模型,并引入粒径修正系数k,令

$$d_{\rm p} = k \frac{6v}{a} \tag{15}$$

其中 k=0.73+2.07/(1+10^{-0.002(2015-T)}), k 通过统计实测平均 粒径与计算原生粒子大小之差拟合求得。将 3.1 节求 得爆温与时间关系曲线带入颗粒生长模型,即可得到 不同氢气含量和不同点火温度条件下管内原生粒子随时间的变化曲线,如图7所示,在爆轰管内,颗粒在0.002s后停止了生长,粒径大小不再变化,这在一定程度上反映了气态爆炸合成纳米粒子的性质,即气相爆轰合成的瞬时高温特性,因此可以进一步应用于TiO₂粒径的设计。



图7 TiO,原生粒子大小随时间的变化曲线

Fig.7 Variation curves of primary particle diameter d_p of TiO₂ with time under different H₂ contents (a) and at different ignition temperatures (b)

4 结论

1)通过 CFD 数值模拟揭示了气相爆轰管中火焰的 传播特性和爆轰温度随时间的变化关系,爆轰温度在 1280~3802 K 范围内随时间呈指数衰减。将温度 T 视为 一个随时间变化的函数并拟合得到其拟合曲线,并将其 引入颗粒生长模型。

2)爆温与粒径正相关,且随爆轰温度升高,平均粒径 从70 nm增大至156 nm。而起爆温度对样品的形貌和平 均粒径影响不大,均在130~150 nm之间。

3)根据实验数据提出基于气相爆轰法的粒径修正系数 k=0.73+2.07/(1+10^{-0.002(2015-7)}),改进了颗粒生长模型,修 正后模型预测粒径与实验值基本相符,提高其计算精度。

参考文献 References

- [1] Cao Xinyue(曹馨月), Tang Xiaoning(唐晓宁), Ma Hao(马 浩) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)
 [J], 2022, 51(8): 3001
- [2] Yang Liangwei, Chen Haoran, Jin Xin et al. Rare Metal Materials and Engineering[J], 2022, 51(3): 821
- [3] Wei Mian(魏 冕), Li Jinting(李金庭), Zhou Yun(周 赟) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)[J], 2022, 51(10): 3819
- [4] Wang Meihan, Chen Yun, Wang Guanjie et al. Rare Metal Materials and Engineering[J], 2022, 51(8): 2732
- [5] Li Xiaojie(李晓杰), Ouyang Xin(欧阳欣), Yan Honghao(闫鸿浩) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(S2): 11
- [6] Wu Linsong, Yan Honghao, Li Xiaojie et al. Ceramics International[J], 2017, 43(1): 1517
- [7] Wu Linsong, Yan Honghao, Xiao Jianliang et al. Ceramics International[J], 2017, 43(12): 9377
- [8] Luo Ning(罗 宁), Cao Xiaolong(曹小龙), Jiang Li(蒋 立) et al.

Rare Metal Materials and Engineering (稀有金属材料与工程) [J], 2022, 51(7): 2709

- [9] Luo Ning, Sun Xin, Fan Xueru et al. Rare Metal Materials and Engineering[J], 2022, 51(1): 119
- [10] Yan Honghao(闫鸿浩), Wu Linsong(吴林松), Li Xiaojie(李晓杰) et al. Journal of Inorganic Materials(无机材料学报)[J], 2017, 32(3): 275
- [11] Yan Honghao, Wu Linsong, Li Xiaojie et al. Journal of Nanoscience and Nanotechnology[J], 2017, 17(3): 2124
- [12] Wu Linsong, Yan Honghao, Li Xiaojie et al. Materials Research Express[J], 2016, 3(8): 085012
- [13] Wu Linsong(吴林松). Study on TiO₂-based Nano Photocatalysts Prepared by Gaseous Detonation Method(气相爆轰法制备TiO₂ 基纳米光催化材料的研究)[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2018
- [14] Zhao Tiejun, Wu Linsong, Wang Zifa et al. Ceramics International[J], 2023, 49(6): 9857
- [15] Chen Tianwu(陈天梧), Luo Ning(罗宁), Yan Honghao(闫鸿浩) et al. Chinese Journal of High Pressure Physics(高压物理学报)[J], 2014, 28(6): 729
- [16] Zhao Tiejun(赵铁军), Wang Zifa(王自法), Yan Honghao(闫鸿浩) et al. Chinese Journal of High Pressure Physics(高压物理学报)[J], 2021, 35(5): 053201
- [17] Luo Ning, Jing Hongwen, Ma Zhanguo et al. Particuology[J], 2016, 26: 102
- [18] Yan Honghao(闫鸿浩), Wu Linsong(吴林松), Li Xiaojie(李晓杰) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(5): 1144
- [19] Luo Ning, Shen Hua, Jing Hongwen *et al. Particuology*[J], 2017, 35: 78
- [20] Wang Ling(王 玲), Wang Hejin(王河锦), Zhou Zhao(周 钊) et al. Acta Petrologica et Mineralogica(岩石矿物学杂志)[J], 2014, 33(2): 385

Effect of Detonation Characteristics on TiO₂ Particle Size During Gaseous Detonation Synthesis

Wu Linsong^{1,2,3}, Wang Xingzhi³, Lu Shiwei³, Chen Xiang^{1,2}, Yan Honghao⁴

(1. State Key Laboratory of Precision Blasting, Jianghan University, Wuhan 430056, China)

(2. Hubei Key Laboratory of Blasting Engineering, Jianghan University, Wuhan 430056, China)

(3. School of Urban Construction, Yangtze University, Jingzhou 434023, China)

(4. Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: This research investigated the growth characteristics of TiO_2 nanoparticles in the instantaneous high-temperature and high-pressure gaseous detonation reaction. Computational fluid dynamics was used to simulate the flame propagation process and the temperature-time relationship of the gas explosion in the detonation tube, and it was introduced into the particle growth model. The model was modified through experiments. The results show that the reaction temperature and time are the main factors affecting the particle growth in the gaseous detonation reaction. A particle size correction coefficient *k* is proposed to improve the classical particle growth model. The improved numerical model can accurately predict the growth characteristics of TiO_2 nanoparticles, which provides effective theoretical support for the controllable synthesis of TiO_2 nanoparticles.

Key words: TiO₂; gaseous detonation; numerical simulation; particle growth; particle size

Corresponding author: Chen Xiang, Ph. D., Associate Professor, State Key Laboratory of Precision Blasting, Jianghan University, Wuhan 430056, P. R. China, E-mail: chenxiang@jhun.edu.cn