

从恒速升温速率下的 DSC 曲线峰温计算含能材料 放热分解反应动力学参数的理论和数值方法

胡荣祖^{1,2}, 高红旭¹, 赵凤起¹, 张海², 赵宏安³, 马海霞⁴, 邢晓玲¹, 薛亮¹

(1. 西安近代化学研究所, 陕西 西安 710065; 2. 西北大学数学系/数据分析及计算化学研究所, 陕西 西安 710069;

3. 西北大学信息科学与工程学院, 陕西 西安 710069; 4. 西北大学化工学院, 陕西 西安 710069)

摘要: 根据 Kooij 公式和 van't Hoff 公式, 从恒速升温速率下的 DSC 曲线峰温导出了计算含能材料放热分解反应动力学参数的两个数学表达式, 提出了计算相应动力学参数的数值方法。对 1,3,5-三硝基-1,3,5-三氮杂环己酮-2 (Keto-RDX), 由导出的两个表达式、Kissinger 法、Ozawa 法、Tang 法、Hu-Gao-Zhang 法、非线性等转化率积分法 (NL-INT) 所得的活化能 E 值彼此接近, 表明 Kooij's 公式中的 a 值取 0.5, van't Hoff 公式的 b 值取 0.003, 可得到合理的动力学参数。

关键词: 物理化学; DSC; 动力学参数; Kooij 公式; van't Hoff 公式; Keto-RDX; 非等温

中图分类号: TJ55; O643

文献标识码: A



《含能材料》征稿启事

一、征稿内容

(1) 炸药的合成与应用; 装药、成型、加工及其相关技术; (2) 炸药、推进剂、火工药剂、烟火剂及其应用技术; (3) 含能材料用聚合物、增塑剂及其相关物的合成与应用; (4) 含能材料的配方研制及相关技术; (5) 含能材料的性能检测技术(包括理化性能、爆轰性能、安全性能及其相容性); (6) 含能材料的储存寿命研究; (7) 爆炸技术及其应用; (8) 含能材料的环境适应性和力学性能; (9) 与含能材料有关的安全防护和环境保护技术; (10) 与本学科相关的科研动态、会议简讯、获奖信息、书评或新书介绍等报道性文章; (11) 有关科研机构的简要介绍。

二、来稿注意事项

1. 摘要包含目的、方法、主要结果与结论四要素, 应具有独立性和自含性。中文摘要不超过 100~300 字, 英文摘要应尽量详细, 要反映文章的主要内容。选取 3~8 个关键词, 第一关键词为来稿所属二级学科名称, 学科体系采用国家技术监督局发布的学科分类与代码(国标 GB/T13745-92), 如无机化学, 物理化学等。
4. 图准确、清晰, 提供中文和英文图题(英文论文只需英文图题), 有分图时, 请给出分图题目。标清纵轴和横轴代表的物理量和单位名称。所有的图都用阿拉伯数字依次编号, 图中注释用中英文对照标注。
5. 表格采用三线表, 表题采用中英文对照, 表中内容采用英文, 尽量精炼。注意表中有效数据的处理。
6. 物理量及单位一律使用我国法定的计量单位, 以 GB3100~GB3102-93 为准, 不使用已废止的量和单位符号。
7. 化学类论文应注意: (1) 正确书写元素符号大小写, 注意上下角标, 电荷的位置、单键多键的连接位置, 可用 Me、Pr、Et、Bu、Ph (不能用), Ac, Ar 等缩写。不同取代基用 R, R¹, R² 表示。(2) 对于已知化合物, 其来源(或合成方法)、结构表征数据的参考文献都应提供。只提供文献中未报道的谱图数据。化合物的分析结果表达顺序为产率、熔点(沸点)、旋光度、折光率、紫外、核磁共振谱、红外, 质谱和元素分析(或高分辨质谱)。(3) 请用 ChemDraw 或 ChemsSketch 绘制化学结构式及反应式, 字号用 7pt, 字体用 Time New Roma 加粗。(4) 晶体结构原子编号采用 C(2), O(3)。
8. 图文摘要用英文表述, 不同于正文摘要, 不要太详细, 也不要总结结果。图(一幅, 最多两幅)的选取, 以能反映全文要点的简图或示意性说明(如公式、反应式、线条图等)为佳(没有图也可)。
9. 参考文献在中文论文中英文对照, 在英文论文中应为英文。英文论文请附中文摘要(包括题名、作者单位及关键词)。第一作者简介、标准基金全称及批准号一律以脚注注于首页。国家自然科学基金、重点攻关项目论文, 可提前安排发表。中图分类号请参考《中国图书馆分类法》第四版。

三、稿件审理

1. 来稿请推荐 3~5 位非本单位同行专。编辑部在收到论文保密审查证明后, 才开始受理论文。从此计时, 3 个月内通知作者稿件审理情况。稿件审理阶段, 作者可通过网上查询。半年后返回的修改稿, 按新稿处理, 提前说明情况者除外。
2. 作者须自留底稿及电子文件, 文稿在 3 个月内未在网上查到信息, 可自行处理, 但须告知编辑部。
3. 本刊现已加入《中国学术期刊(光盘版)》、"中国期刊网"、"万方数据资源系统(ChinaInfo)数字化期刊群"、"中文科技期刊数据库"、"CEPS 中文电子期刊", 凡不愿意加入的作者, 请来稿时声明; 本刊所付稿酬已包含刊物内容上网服务的报酬, 不再另付。

请通过本刊网址 www.energetic-materials.org.cn 进行投稿, 相关信息可通过网站查询。欢迎您的投稿!