

黑索今在乙酸乙酯-水二元混合溶剂中的溶解特性的模拟

李 静¹, 金韶华¹, 徐子帅², 吴娜娜², 兰贯超¹, 陈树森¹, 王东旭³

(1. 北京理工大学材料学院, 北京 100081; 2. 甘肃银光化学工业集团有限公司, 甘肃 白银 730900; 3. 北京理工大学机电学院, 北京 100081)

摘 要: 为了研究黑索今(RDX)在乙酸乙酯-水二元体系中的溶解特性,测定了RDX在298.15~338.15 K温度下的溶解度。分别采用Apelblat方程、CNIBS/R-K模型及Jouyban-Acree方程对实验数据进行拟合。算出了标准溶解焓、标准溶解熵及吉布斯自由能。为了研究溶解机理,采用分子动力学模拟方法计算了RDX在二元混合溶剂中的溶度参数。结果表明,RDX的溶解度随着温度和水含量的升高而增大。经验方程拟合值与实验值基本保持一致。实验所得的溶解度数据,模型参数、热力学性质、溶度参数都为RDX和HMX的回收过程提供了基础数据和模型。

关键词: 黑索今(RDX);溶解度;溶度参数;热力学性质

中图分类号: TJ55; O64

文献标志码: A

DOI: 10.11943/CJEM2018194

(责编:高毅)



《含能材料》“含能共晶”征稿

含能共晶是不同含能分子通过氢键等相互作用力形成的具有稳定结构和性能分子晶体。含能共晶充分组合了单质含能分子的优点,呈现出感度低,综合性能优良的特点,具有潜在的应用前景,共晶研究已经引起国内外含能材料学界的高度关注。为推动含能共晶的研究和交流,本刊特推出“含能共晶”专栏,主要征稿范围包括含能共晶晶体设计与性能预测、含能共晶的制备、结构解析、性能等。来稿请注明“含能共晶”专栏。

《含能材料》“观点”征稿

为了丰富学术交流形式,及时传递含能材料领域同行们的学术观点和思想,《含能材料》开设了“观点”栏目。“观点”栏目的来稿应观点鲜明、内容新颖、形式上短小精悍。欢迎含能材料各领域的专家积极来稿。来稿时请附个人简介及主要研究工作介绍。

《含能材料》编辑部