

用绝热测试的压力数据计算分解反应的表观活化能

钱新明; 刘丽; 冯长根

北京理工大学爆炸灾害预防、控制国家重点实验室, 北京 100081

摘要:

绝热量热技术的广泛应用促进了绝热动力学研究的发展. 至今为止, 绝热动力学的研究仍是以Townsend 和 Tou在1980年提出的绝热动力学方程为基础. 他们利用反应物浓度与温度的关系建立动力学模型, 从而求得了反应的活化能. 但这种方法在反应体系的温度效应不明显时的应用, 就受到很大的限制. 因此, 本文通过建立用压力表示的动力学方程, 充分利用绝热量热中的压力数据, 提出了一种计算反应活化能的新方法. 同时用这种方法计算了过氧化二叔丁基和2-甲基-5-硝基苯磺酸的绝热分解活化能值, 并与文献值和其他计算方法所得结果进行了比较.

关键词: 活化能 绝热分解 压力 绝热加速量热仪(ARC)

收稿日期 2004-06-28 修回日期 2004-08-30 网络版发布日期 2005-02-15

通讯作者: 钱新明 Email: xm.qian@263.net

本刊中的类似文章

1. 尹周澜. 钼酸铵热分解过程动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 181-184
2. 何水祥; 曹文凯; 胡亭; 赵建设; 张维平; 薛岗林; 胡荣祖. 水杨醛-1H-苯并三唑-1-乙酰脲与镧(III)配合物的制备、表征及热化学[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 865-870
3. 李英; 龚江宏; 唐子龙; 谢裕生; 张中太. 氧化锆基固体电解质材料与温度无关的离子电导活化能 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 792-796
4. 贡雪东; 肖鹤鸣. 多元硝酸酯热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 33-38
5. 佐佐木幸夫; 李芝芬. ^{14}N NMR弛豫法研究3-烷基斯德酮[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 476-480
6. 阙锦晴; 乔月东; 穆绍林; 李永舫. 茶碱对聚苯胺尿酸酶电极的生物电化学活性的抑制[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 236-241
7. 官建国; 赵素玲; 谢洪泉. 电场和温度对含水电流变液性能的影响[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 242-246
8. 郑妍; 查东; 李来才. CF_3O_2 自由基和NO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 156-160
9. 薛永强; 杜建平; 王沛东; 王志忠. 粒度对多相反应动力学参数的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 758-762
10. 赵鹏; 方慧珏; 薛腾; 亓西敏; 陆嘉星. 计时电量法求 $\text{NiCl}_2(\text{bpy})_3$ 在DMF中的扩散系数和速率常数[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1235-1239
11. 于学春; 彭海琳; 张然; 张莹莹; 刘忠范. 含碘系列电荷转移复合物的热分解温度对烧孔阈值电压的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 565-568
12. 武望婷; 杨锐; 胡亭; 彭科; 何水祥; 胡荣祖. 水杨醛-1H-苯并三唑乙酰脲与RE(III)配合物的热化学[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1144-1149
13. 刘恩辉; 李新海; 侯朝辉; 何则强; 邓凌峰. 利用湿法反应制备的 LiV_3O_8 的锂离子扩散特性[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 377-381
14. 王贵昌; 潘荫明; 蔡遵生; 赵学庄. 自由基-氟代烯烃加成反应活性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(02): 127-130
15. 李来才; 朱元强; 查东; 田安民. $\text{CH}_3\text{CF}_2\text{O}_2$ 与 HO_2 自由基反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 490-493
16. 吴新民; 刘建华; 李巍; 戚传松. 稀土氨基酸配合物 $\text{RE}(\text{Val})\text{Cl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (RE = Nd, Sm)的热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 942-946
17. 刘俊伶; 尚静; 王佩怡; 李来才; 田安民. CH_3CHF 自由基与HNCN反应机理的理论[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 921-925
18. 刘道胜; 韩春玉; 段林海; 宋丽娟; 孙兆林. 最小二乘法计算苯、噻吩和正辛烷在NaY上程序升温脱附活化能[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 470-476
19. 刘天晴; 郭荣; 于卫里; 沈明. SDS/BA/ H_2O 体系的扩散系数与结构特性[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 401-406

扩展功能

本文信息

PDF(763KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 活化能

▶ 绝热分解

▶ 压力

▶ 绝热加速量热仪(ARC)

本文作者相关文章

▶ 钱新明

▶ 刘丽

▶ 冯长根

20. 王永成;耿志远;陈宏善.羰基氧化物环化反应动力学的计算研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 45-49
21. 张教强;朱春华;贡雪东;肖鹤鸣.1,3,3-三硝基氮杂环丁烷及其衍生物的热解机理的AM1研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 612-616
22. 李青莲;陈寿田;姚朴;魏国;曲永和.纳米钛酸钡生成的热分解机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(02): 170-174
23. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊箴.2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
24. 范崇正;王昌燧;赵化章;王胜君.氯化亚铜氧化反应的化学动力学初探[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 685-689
25. 郑小明;顾越鹏;金松寿.Pt/HM和Pd/HM催化剂表面氧的恢复与供出活化能测定[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 125-128
26. 孔德金, 邹薇, 郑均林, 祁晓岚, 房鼎业.MFI/MFI核壳分子筛合成的影响因素及结晶动力学[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1921-1927
27. 蔡皖飞, 汪晓慧, 李来才, 田安民.*N*-(邻氯苯基)苯甲酰胺在CuX(X=I, Br)催化下的分子内*O*-芳基化反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2101-2106