

阿司匹林的热解机理及热动力学研究

徐芬; 孙立贤; 谭志诚; 梁建国; 周丹红; 邸友莹; 兰孝征; 张涛

中国科学院大连化学物理研究所, 材料热化学实验室, 大连 116023; 湖南省药品检验所, 长沙 410000; 辽宁师范大学化学系, 大连 116029

摘要:

在用热重法研究了阿司匹林的热稳定性实验的基础上, 通过量子化学方法(ab initio DFT)计算了阿司匹林分子的键级, 据此计算结果提出了阿司匹林的热解机理, 按此机理得到的理论计算值与实验结果一致; 运用Freeman-Carroll、Kissinger和Ozawa三种方法分别计算了阿司匹林的热解动力学参数: 活化能(E)、反应级数(n)和指前因子(A), 其热解动力学方程为: $da/dt = 4.74 \times 10^{11} [\exp(-(100.34 \pm 5.18) \times 10^3/RT)] (1-a)^{2.8 \pm 0.3}$; 用差示扫描量热法测定的该物质的熔点、摩尔熔化焓和摩尔熔化熵分别为 (409.19 ± 0.22) K、 (29.17 ± 0.41) kJ·mol⁻¹和 (71.09 ± 1.06) J·mol⁻¹·K⁻¹.

关键词: 阿司匹林 量化计算 热解机理和热动力学 热重法 差示扫描量热法

收稿日期 2003-06-13 修回日期 2003-09-15 网络版发布日期 2004-01-15

通讯作者: 孙立贤 Email: lxsun@dicp.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 蒙明程 李琳丽 詹先成 陶建林 韩雪. 平面单测点法评价湿度和温度对药物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(05): 897-904
2. 李卫华; 吕国伟; 黄兰; 高红; 杜为民. 阿司匹林合成过程的在线拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(02): 105-108

扩展功能

本文信息

PDF(2080KB)

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

▶ 阿司匹林
▶ 量化计算
▶ 热解机理和热动力学
▶ 热重法
▶ 差示扫描量热法

本文作者相关文章

▶ 徐芬
▶ 孙立贤
▶ 谭志诚
▶ 梁建国
▶ 周丹红
▶ 邸友莹
▶ 兰孝征
▶ 张涛