

## 耐驰非线性动力学软件

作者: J. R. Opfermann, NETZSCH-Gerätebau GmbH, Selb/Germany

### 摘要

德国耐驰公司的动力学软件 (Kinetics) 是目前业界功能最强大的动力学分析软件之一。其目的是建立包含速率常数、反应级数、活化能与指前因子等参数在内的反应速率方程, 将反应速率与温度、浓度等宏观变量联系起来, 从中探求反应机理, 并用以指导生产实践。

### 典型应用

- 环氧树脂的固化
- 带部分扩散控制的环氧树脂固化
- 粉末涂料的交联
- 电解沉积涂料的固化
- 聚合物粘结剂的烧出
- 葡萄糖的分解
- Poly (diphenoxyphenyl-phenylenvinylene) 的热分解
- Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 烧结行为的模拟
- Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 的烧结
- 天然橡胶的硫化
- 硫化, 包括硬度不断增加与硫化还原
- 粉末涂料的交联
- .....

### 数据来源

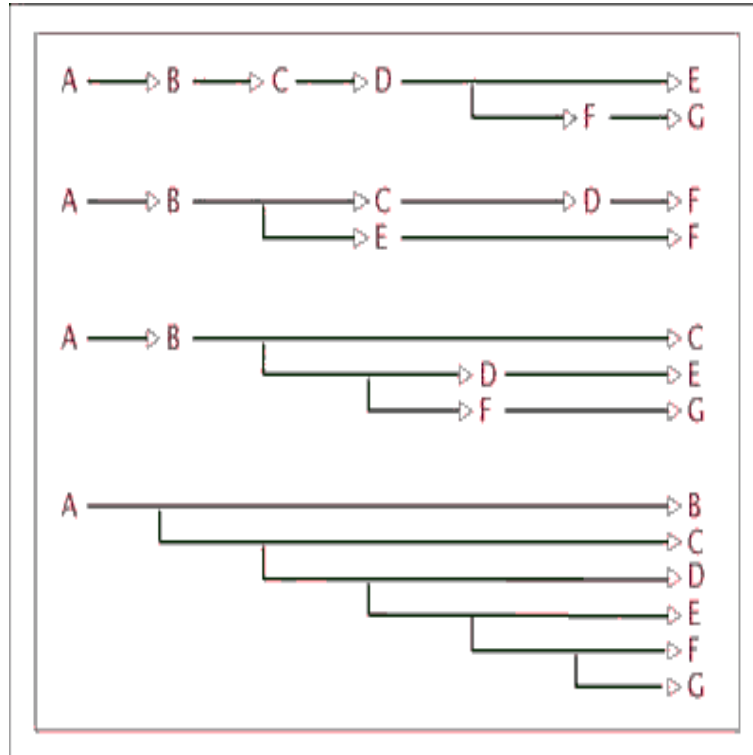
- 热重分析 (TGA)
- 差热分析 (DTA) 与差示扫描量热 (DSC)
- 质谱分析 (MS)
- 热膨胀法 (DIL)
- 流变分析 (RHEO) 及其衍生的硫化分析 (VULC)
- 还可以使用 ASCII 文件, 进行测量数据的导入。

### 计算方法

1. 利用 **mode-free** 方法大致计算活化能、指前因子等参数随反应程度的变化。方法包括:

- Friedman 分析法, 针对动态与 / 或等温测量
- Ozawa-Flynn-Wall 分析法, 针对动态测量
- ASTM E698 分析法

2. 在第一步剖析的基础上选择合适的反应模型, 将对象分解为多个单步反应的组合: 连串、平行、竞争、独立等。



3. 每个单步反应可选类型:

- F1 一级反应
- F2 二级反应
- F<sub>n</sub> n 级反应
- D1 一维扩散
- D2 二维扩散
- D3 三维 JANDER's 扩散
- D4 三维 GINSTLING-BROUNSHTEIN 扩散
- R2 二维相界反应
- R3 三维相界反应
- B1 自催化反应
- B<sub>n</sub>a n 级反应的 a 级自催化反应
- C1 一级反应, 自催化
- C2 二级反应, 自催化
- A2 二维成核, AVRAMI-EROFEEV
- A3 三维成核, AVRAMI-EROFEEV
- A<sub>n</sub> n 维成核, AVRAMI-EROFEEV
- ...

4. 通过非线性回归, 计算每一单步反应的反应级数  $n$ 、指前因子  $A$  与活化能  $E_a$ , 并计算模型拟合的相关系数。

结果应用

在得到反应模型及相关各参数基础上，由用户自定义各种反应条件，软件给出预测的反应结果。通过非线性拟合得到的反应动力学参数，可以用于：

- 等温条件下信号曲线推算（DSC、TG、DIL 等）
- 动态条件下信号曲线推算（DSC、TG、DIL 等）
- 根据用户自定义温度预测等温、变温条件下的反应历程
- 等温、动态条件下反应物比例的预测