

**روش‌های پیش‌بینی
خواص ترموشیمیایی، انتقال فاز،
قدرت انفجاری و دمای سوزش
مواد پرانرژی**

محمدحسین کشاورز

استاد دانشگاه صنعتی مالک‌اشتر

سرناسه: كشاورز، محمدحسين، ۱۳۴۴ -
 عنوان و نام پديدآور: روش‌های پيش‌بيني خواص ترموشيميايي، انتقال فاز، قدرت انفجاري و دماي سوزش مواد پراثرزي/
 مشخصات نشر: مؤلف محمدحسين كشاورز.
 مشخصه-ظاهري: تهران: دانشگاه صنعتي مالك اشتر، ۱۳۹۵
 شابك: ۱۷۷ ص: مصور، جدول، نمودار.
 وضع فهرست رسي: ۹۷۸-۶۰۰-۷۷۳۶-۳۵-۷
 يادداشت: فيبا.
 يادداشت: واژه‌نامه.
 موضوع: كتابخانه.
 شناسه افزوده: دانشگاه صنعتي مالك اشتر.
 رده‌بندي كنگره: TP ۲۷۰ / ۵۹۰۰۹
 رده‌بندي ديويي: ۶۶۲
 كتابشناسي ملي: ۴۵۰۵۱



سازمان اسناد و کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

مجموعه دانش‌های علوم کاربردی

عنوان كتاب: روش‌های پيش‌بيني خواص ترموشيميايي، انتقال فاز، قدرت انفجاري و دماي سوزش مواد پراثرزي
 تأليف: محمدحسين كشاورز
 ناشر: انتشارات دانشگاه صنعتي مالك اشتر
 طرح روي جلد: انتشارات دانشگاه صنعتي مالك اشتر
 ليتوگرافي، چاپ و صحافي: انتشارات دانشگاه صنعتي مالك اشتر
 صفحه‌آرایی رایانه‌ای: مهدي ملايي
 ويراستاري ادبي: زهرا جباري
 شمارگان: ۱۰ جلد
 نوبت چاپ: اول، زمستان ۹۵
 قيمت: ۱۲۰۰۰۰ ريال

ISBN: 978-600-7736-35-7

كليۀ حقوق چاپ براي ناشر محفوظ است.

نقل مطالب فقط با ذكر مشخصات كامل كتاب و با اشاره به نام ناشر مجاز است.

آدرس: تهران، لويزان، دانشگاه صنعتي مالك اشتر، مركز فناوری اطلاعات و مديريت دانش.

مديريت انتشارات. تلفن: ۲۲۹۳۲۸۹۱

فهرست مطالب

نمادها و علائم اختصاری ا

پیشگفتار ج

مقدمه فنی خ

فصل اول: دمای ذوب ۳

۱-۱- پیشبینی دمای ذوب ترکیبات پرانرژی ۳

۱-۱-۱- پیشبینی تقریبی دمای ذوب ترکیبات پرانرژی نیتراآمین‌ها، نیترات ... ۵

۱-۱-۲- پیشبینی دمای ذوب ترکیبات نیتروآروماتیک ۸

۱-۱-۳- پیشبینی دمای ذوب ترکیبات پرانرژی غیرآروماتیک ۱۱

۲-۱- روش عمومی برای پیشبینی دمای ذوب مواد پرانرژی ۱۴

۱-۲-۱- سهم‌پذیری پارامترهای ساختاری مختلف در محاسبه دمای غیر افزایشی ۱۷

۱-۲-۲- روش جدید با دو مدل مختلف ۲۲

۳-۱- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی ۲۵

فهرست منابع ۲۵

فصل دوم: گرمای (آنتالپی) ذوب ۲۹

۱-۲- استفاده از روش سهم‌پذیری برای تخمین گرمای ذوب ۳۰

۲-۲- گرمای ذوب نیتراآمین‌ها ۳۰

۳-۲- گرمای ذوب کربوکسیلیک نیتروآروماتیک‌ها ۳۵

۴-۲- گرمای ذوب ترکیبات پرانرژی دارای گروه‌های عاملی، ترو، نیترات و نیتراآمین ۳۹

۵-۲- روش عمومی برای پیشبینی گرمای ذوب مواد پرانرژی ۴۲

۱-۵-۲- عوامل ساختاری مؤثر در تعیین آنتالپی ذوب ۵۱

۲-۵-۲- پارامترهای ساختاری مؤثر در تعیین آنتالپی ذوب ۵۲

۳-۵-۲- اثر گروه‌های مختلف NO_2 و ONO_2 روی آنتالپی افزایشی ۵۳

۶-۲- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی ۵۴

فهرست منابع ۵۵

فصل سوم: پیش‌بینی گرمای (آنتالپی) تصعید	۵۹
۱-۳- گرمای تصعید نیتروآمین‌ها	۶۱
۲-۳- گرمای تصعید نیتروآروماتیک‌ها	۶۲
۳-۳- روش عمومی پیش‌بینی گرمای تصعید مواد پراثرژی	۶۷
۴-۳- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی	۷۸
فهرست منابع	۷۸
 فصل چهارم: روش‌های تخمین قدرت انفجاری	۸۱
۱-۴- آزمون‌های کارکرد مواد منفجره	۸۱
۱-۱-۴- آزمون سنجش شوک هوایی	۸۲
۲-۱-۴- آزمون خمپاره‌بالیستیک یا هاون پرتاب‌های	۸۳
۳-۱-۴- آزمون ترانزیشن	۸۵
۴-۱-۴- آزمون فرو رفتن در محفظه	۸۹
۵-۱-۴- آزمون تکه‌تکه شدن	۹۰
۶-۱-۴- آزمون استوانه	۹۱
۲-۴- امواج شوک در هوا	۹۴
۳-۴- سنجش شوک هوایی	۹۶
۴-۴- روش‌های تئوری پیش‌بینی قدرت مواد پراثرژی	۹۸
۱-۴-۴- روش تعیین قدرت انفجاری بر اساس آزمون ترانزیشن	۱۰۰
۱-۱-۴-۴- گرمای انفجار تصحیح‌شده بر اساس	۱۰۰
۲-۱-۴-۴- رابطه بین یک ترکیب پراثرژی و گرمای انفجار	۱۰۳
۳-۱-۴-۴- مزیت‌های محاسبه قدرت انفجاری بر اساس ضربه ویژه	۱۰۸
۴-۱-۴-۴- محاسبه قدرت انفجاری بر اساس نسبت تعداد	۱۰۹
۲-۴-۴- آزمایش هاون پرتابه‌ای یا خمپاره‌بالیستیک	۱۱۹
۱-۲-۴-۴- تعادل اکسیژن و قدرت ماده منفجره	۱۱۹
۲-۲-۴-۴- استخراج معادله جدید	۱۲۰
۵-۴- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی	۱۲۶
فهرست منابع	۱۲۷

۱۳۳	فصل پنجم: دمای سوزش
۱۳۳	۱-۵- مقدمه
۱۳۵	۲-۵- به کارگیری ساختار مولکولی برای پیشبینی دمای سوزش
۱۳۷	۱-۲-۵- پیش‌بینی افزایش سهم غیراضافی پارامترهای ساختاری (F+non-add)
۱۴۵	۲-۲-۵- پیش‌بینی کاهش سهم غیراضافی پارامترهای ساختاری (F-non-add)
۱۴۵	۳-۲-۵- ترکیبات شامل افزایش و کاهش سهم‌های غیراضافی ...
۱۴۶	۵-۳- مقایسه نتایج پیش‌بینی شده با داده‌های تجربی
۱۴۹	۵-۴- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی
۱۴۹	فهرست منابع
۱۵۳	پیوست: معرفی QSPR و MLR
۱۷۳	واژه‌نامه
۱۷۳	واژه‌نامه فارسی به انگلیسی
۱۷۵	واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

پیشگفتار

به وادی که دارای پیوندهای پرانرژی بوده و می‌توانند مقدار شیمیایی ذخیره‌شده آزاد کنند، واد پرانرژی گفته می‌شود. این مواد از جمله مواد بسیار خطرناکی به حساب می‌آیند که پیش‌بینی خواص آنها قبل از سنتز آزمایشگاهی و بررسی خواص اهمیت زیادی دارد. مراحلی در پرانرژی با کارایی و ایمنی مناسب در سطح جهان اهمیت زیادی داشته و در همه منابع انسانی و مالی جلوگیری خواهد نمود. با پیشرفت‌های حاصل طی چند سال اخیر در این مدل‌های تئوری مناسب، ارائه روش‌های ساده برای پیش‌بینی خواص برای پیش‌بینی حقایق و انشجویان مقاطع تحصیلات تکمیلی بسیار مفید خواهد بود.

کتاب حاضر به آخرین دستاوردهای این زمینه در مورد خواص ترموشیمیایی انتقال فاز، قدرت انفجاری و دمای سوزش مواد پرانرژی می‌پردازد؛ همچنین مکمل مباحث عنوان‌شده در کتاب‌هایی با عناوین "مواد پرانرژی - خواص ترموشیمیایی و کارایی" [۱] و "روش‌های تعیین خواص شیمی - فیزیکی و حساسیت انفجار مواد منفجره قوی" [۲] (انتشارات دانشگاه صنعتی مالک اشتر) می‌باشد. این کتاب در سه فصل اول می‌باشد که بعد از مقدمه فنی ارائه خواهند شد. در فصل اول الی سوم، مباحث مربوط به روش‌های پیش‌بینی دمای ذوب، گرمای ذوب و تصعید مواد پرانرژی که دارای عناصر کربن، هیدروژن، نیتروژن و اکسیژن هستند، می‌پردازد. مباحث مربوط به قدرت انفجاری و دمای سوزش مواد منفجره ثانویه در فصل‌های چهارم و پنجم مطرح خواهد شد که آخرین

دستاوردهای علمی در مورد پیش‌بینی قابل‌اعتماد خواص یادشده با روش‌های ساده را بیان می‌کند. با توجه به هزینه‌های زیاد سنتز آزمایشگاهی، بررسی خواص فیزیکی و ترموشیمیایی مواد پرانرژی، رویکرد محققان و صنایع به‌سوی ارزیابی خواص قبل از سنتز آزمایشگاهی مواد پرانرژی است. مواد پرانرژی که در این کتاب به بررسی آن‌ها پرداخته می‌شود دارای پیوندهای پرانرژی NO_2 ، ONO_2 ، N-NO_2 و N_3 می‌باشند که در مواد منفجره اولیه، ثانویه و پیشرفته‌های دوپایه مورد استفاده قرار می‌گیرند.

تیراً مدل‌های تئوری مناسبی برای پیش‌بینی خواص ترموشیمیایی انتقال فاز مواد پرانرژی شاس؛ مایه ذوب مواد پرانرژی، تغییر آنتالپی ذوب و تغییر آنتالپی تصعید صورت گرفته است. این خواص می‌تواند به‌منظور پیش‌بینی پایداری حرارتی، فرایندپذیری، ثابت رخدادگی و تجزیه‌پذیری آن‌ها و تخمین پایداری ترمودینامیکی برای نگهداری در ابارها ررد استفاده قرار گیرد. دمای سوزش یک ماده منفجره نیز به‌عنوان دمایی به‌حساب می‌آید که با گرم کردن یک ماده منفجره در یک ظرف سر بسته محترق یا منفجر می‌شود. به‌منظور افزایش ایمنی محققان، این پارامتر می‌تواند میزان واکنش‌پذیری و تخریب یک ماده پرانرژی را مشخص سازد.

فهرست کلمه‌های تخصصی: مواد پرانرژی، انتقال فاز، پیش‌بینی، دمای ذوب، گرمای ذوب، گرمای تصعید، دمای سوزش و قدرت انفجاری.