

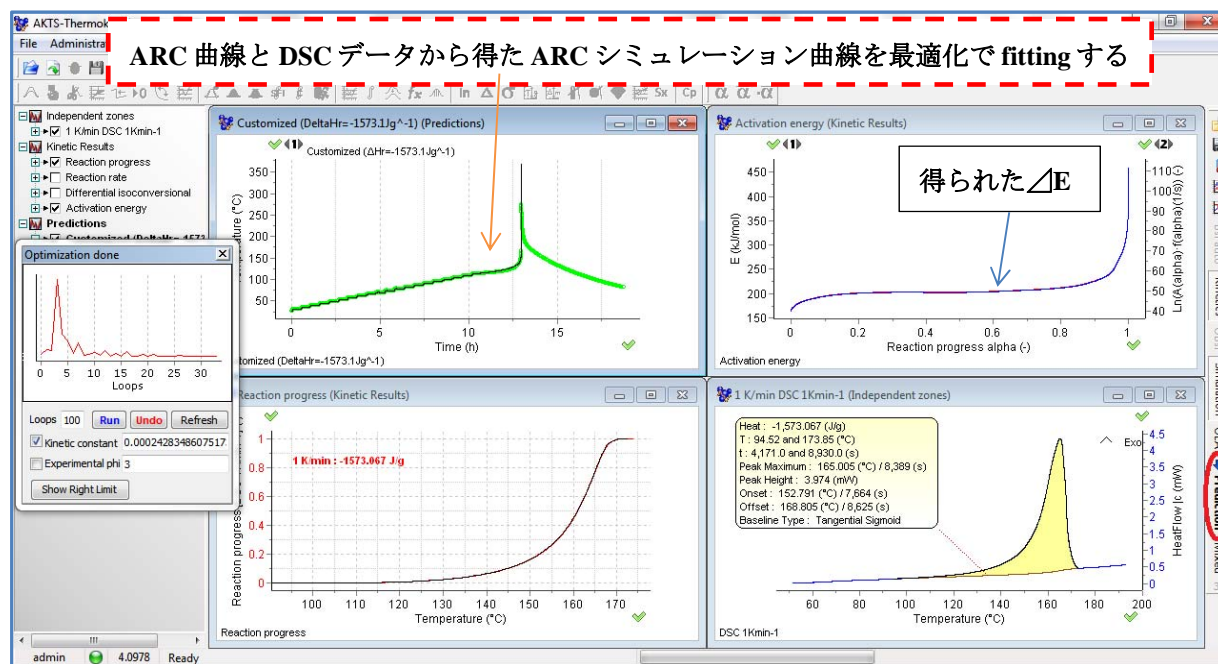
## DSC & ARC データから TMRad24h を算出する優位性について

ARC 曲線から TMRad24h を算出するには反応式を 0 次式とする仮定だけでなく、下記の課題があります。

- 1) ARC 曲線は 1 個の測定データいわゆる単一曲線方式である特性を考慮する必要があります。  
(ARC 曲線は 1 個の温度曲線 (断熱温度曲線) であることを考慮する必要があります。)
- 2) 0 次式の反応速度論モデルを仮定した場合、DSC 曲線をトレースしても事実はまったく違って 0 次式の曲線にはならないはずです。
- 3) TMRad24h の熱慣性係数  $\phi$  補正は反応モデルに強く依存しています。  
もし 0 次式の仮定が間違っているとすれば、 $\phi$  補正は間違った補正になります。

以上より、より優れた解析手順は ARC データに加えて 1 個の DSC 測定データから iso-conversional 法を使って反応速度論的なパラメータをコンピュータ計算することを基礎とすべきです。

下図は AKTS ソフトウェアの ARC & DSC から TMRad24 を求める操作画面の一部です。



AKTS の推奨する解析手法は

- 01 : DSC 曲線を正しく記述することができない 0 次式の仮定を避けること。
- 02 : 0 次式という簡略化された仮定に基づく間違った熱慣性係数補正 ( $\phi$  補正) を避けること。
- 03 : 1 個の ARC 曲線だけを基礎として単一曲線で解析することを避けること。
- 04 : DSC と ARC の 2 つの測定で得られる反応熱を比較することにより、ARC 測定条件から算出される  $\phi$  値の正確度を点検することができます。同一化学物質の対象とする化学反応の反応熱は等しくあるべきであり、反応熱は使用される DSC や ARC 実験装置に依存するものではありません。  
DSC と ARC の両データを使い、フリーモデルの iso-conversional 法を使ってシミュレーションする方が ARC 曲線だけを 0 次式を反応モデルとする解析手法より優れていることは明らかです。

それゆえ、AKTS は ARC データとは別に 1 個の DSC 測定データを使って ARC 曲線のシミュレーションを検証する解析手法を強くお勧めします。