



INNOVHUB
STAZIONI SPERIMENTALI
PER L'INDUSTRIA



STAZIONE SPERIMENTALE
PER I COMBUSTIBILI

Innovazione e ricerca

Il presente documento è stato prodotto nell'ambito di una ricerca finanziata da ISPESL-DIPIA.

labtermochimica@ssc.it

http://www.ssc.it/it/chi_siamo/aree_e_laboratori/laboratorio_termochimica.shtml

B45-2/02/DIPIA

**Ricerca triennale B45-2/02/DIPIA “Sviluppo di una banca dati
sperimentale sulle proprietà termochimiche delle sostanze
integrata con informazioni sulle proprietà tossicologiche e
sulle misure sanitarie da adottare sulla popolazione coinvolta
in caso di dispersione accidentale”**

Rapporto finale

Autori: Cardillo P., Lunghi A., Gigante L., Pasturenzi C.

Affiliazione: Stazione sperimentale per i Combustibili

Ricerca finanziata da:



Dipartimento Insempiamenti Produttivi e Interazione con l'Ambiente

21 marzo 2006

Indice

➤	1. Introduzione	p.	3
➤	2. Descrizione dell'attività svolta	p.	5
➤	3. Parte sperimentale	p.	10
➤	4. Contenuto della Banca Dati	p.	47
➤	Appendice 1	p.	58

1. Introduzione

Per valutare la stabilità termica dei prodotti chimici (intesa come tendenza alla decomposizione esotermica con generazione di prodotti gassosi) sono indispensabili sperimentazioni calorimetriche e termoanalitiche. I dati ricavati con l'ausilio di tecniche tipo la Termogravimetria (TG), la Calorimetria Differenziale a Scansione (DSC) e la Calorimetria Adiabatica (ARC, Phi-TEC) sono richiesti dalle autorità di controllo per ottenere l'autorizzazione ad avviare nuove produzioni industriali o per proseguire le attività che coinvolgono prodotti potenzialmente pericolosi.

La complessità di questo tipo di sperimentazione risiede nell'enorme numero di sostanze e prodotti che l'industria chimica produce, trasforma e trasporta: molto spesso le aziende sono spinte a produrre nuovi prodotti da inserire sul mercato in tempi molto brevi, in contrasto con le esigenze di cautela che richiederebbero un'attenta indagine termochimica prima di portare un processo in produzione. La valutazione della stabilità termica dei prodotti chimici è infatti una fase indispensabile dell'analisi di rischio di processi, non solo per le aziende a rischio di incidente rilevante (D.Lgs. 334/99 e D.Lgs. 238/05).

La presente ricerca è stata svolta allo scopo di realizzare una banca dati in cui far confluire i risultati delle sperimentazioni termoanalitiche e calorimetriche della Stazione sperimentale per i Combustibili (SSC) effettuate negli ultimi venti anni per conto di aziende chimiche. Nel corso di questi anni sono state esaminate diverse centinaia di prodotti utilizzando le diverse tecniche strumentali disponibili presso l'Istituto.

La Stazione sperimentale per i Combustibili (SSC) è, attualmente, l'unico ente pubblico italiano che conduce ricerche e sperimentazioni per mezzo di tecniche calorimetriche e termoanalitiche per conto delle aziende che ne fanno richiesta. L'attività della SSC in questo campo è iniziata alla fine degli anni '70 con lo studio della miscela di reazione coinvolta nell'incidente di Seveso e prosegue ancora oggi. Negli ultimi 10 anni sono stati stilati un migliaio di rapporti per diversi committenti, tra i quali figurano praticamente

tutte le industrie chimiche italiane, che considerano l'Istituto come un preciso punto di riferimento in questo settore.

Oltre alla sperimentazione calorimetrica e termoanalitica tradizionale, la SSC è in grado eseguire prove di stabilità termica di sostanze e miscele con metodi normalizzati (ASTM E 1981-98 e ASTM E 537-98) recentemente accreditati dal SINAL (Sistema nazionale per l'accreditamento di laboratori) secondo le norme di qualità UNI CEI EN 45001 e UNI EN ISO 9000.






















La disponibilità dei dati termochimici delle sostanze in un formato facilmente consultabile è senz'altro uno strumento indispensabile per consentire alle aziende di risparmiare i costi e i tempi della sperimentazione, nel caso in cui i prodotti di interesse fossero già stati studiati, e di riservare le risorse allo studio dei prodotti e dei sistemi non ancora analizzati.

La realizzazione di una banca dati termochimica, con la possibilità di essere interfacciata ad informazioni tossicologiche delle eventuali sostanze generate a seguito della decomposizione di prodotti instabili, permette di ampliare la conoscenza sui prodotti termicamente instabili, concentrando l'attenzione sui prodotti che l'industria di processo richiede di analizzare.

2. Descrizione dell'attività svolta

Questa ricerca si è svolta in stretta collaborazione tra SSC e Federchimica al fine di evitare incongruenze e dispersione di risorse nella realizzazione delle rispettive ricerche e per elaborare un prodotto finale (“... *una banca dati sperimentale sulle proprietà termochimiche delle sostanze integrata con informazioni sulle proprietà tossicologiche e sulle misure sanitarie da adottare sulla popolazione coinvolta in caso di dispersione accidentale*”) che fosse rispondente agli obiettivi della ricerca stessa e operativamente valido e facilmente utilizzabile dall'Ente finanziatore.

Nella fase iniziale del progetto pertanto, di concerto con i soggetti interessati, è stata definita la struttura del DataBase nel quale inserire le informazioni raccolte. Il DataBase è stato definito prevedendo differenti livelli di utilizzo, dal ricercatore altamente specializzato che potrà consultare tutte le informazioni caricate, all'operatore dei servizi di emergenza a cui interesserà avere rapido accesso alle informazioni che si rendano necessarie per gestire correttamente gli interventi nel caso di incidente chimico in cui sia coinvolta una data sostanza. Come esempio è riportata di seguito una scheda con, riassunti, i dati termochimici “essenziali” di una sostanza.

Idroperossido di tertbutile		Cas 15630-89-4				
LIVELLI DI PERICOLOSITA' DELLA SOSTANZA						
immagine	Pericolo di decomposizione		Cute 			
	Calore sviluppato		Inalazione 			
immagine	Aumento di pressione		Ingestione 			
			Occhi 			
(per i dati numerici vedere all'interno)						
ELENCO SOSTANZE CHE POTREBBERO ESSERE EMESSE IN CASO DI COMBUSTIONE						
% emis	CAS	Nome sostanza	Cute	Inalazione	Ingestione	Occhi
70%	85005-69-0	Acetone				
	54425-97-5	Metanolo				
6%	00405-69-0	CO2				
FRASI DI RISCHIO						
- Altamente corrosivo. CAUSA GRAVI danni alla pelle, agli occhi e alle vie respiratorie - Sviluppa FUMI TOSSICI e IRRITANTI quando il prodotto è esposto al calore o brucia - Il gas può provocare SOFFOCAMENTO senza avviso - Tossico per ingestione e inalazione - Pericoloso per gli occhi e per le vie respiratorie						
ISTRUZIONI IN CASO DI EMERGENZA						
PROTEZIONE INDIVIDUALE						
Respiratore Maschera	Tuta ignifuga	Indumento completo a tenuta di gas per interventi in prossimità con la sostanza o col vapore				
Tuta protezione chimica	Protezione occhi					
Calzature	Guanti					
AZIONI						
Acqua getto	Acqua nebulizzata	Far evacuare la zona - Spegnerne ogni fonte di accensione Utilizzare utensili che non producano scintille Coprire con sabbia e riporre in contenitori chiusi con l'ausilio di utensili che non producano scintille e trasportare all'esterno Aerare la zona e lavare l'area contaminata dal prodotto fuoriuscito dopo averlo completamente recuperato				
Polvere chimica	Schiuma					
Anidride carbonica	Idrocarburi alogenati					
PRIMO INTERVENTO						
Trasferire in ambiente aeraggiato	Respirazione artificiale	1. Trasferimento del paziente in ambiente aeraggiato 7. Non somministrare liquidi per via orale in caso di incoscienza 9. Isolare indumenti e scarpe				
Rimuovere indumenti	Lavare occhi e cute					
Non indurre vomito	Centro Antiveleni					

Scheda riassuntiva risultati

Inoltre, poiché le direttive europee sul “controllo dei pericoli di incidenti rilevanti connessi con determinate sostanze pericolose” (la Direttiva 96/82/CE e la successiva modifica intervenuta con la Direttiva 2003/105/CE), meglio note come “Seveso II e Seveso III”, recepite nel nostro Paese con i Decreti Legislativi 334/99 ed il successivo 238/05, richiedono che vengano considerate le sostanze pericolose che potrebbero essere generate in caso di incidente, la banca dati conterrà anche i risultati delle sperimentazioni condotte *ad hoc* con la tecnica TG accoppiata all’analizzatore FTIR per gas. Questa recente applicazione dell’analisi termogravimetrica per la

valutazione delle sostanze potenzialmente tossiche che possono generarsi in caso di incidente ha visto la SSC impegnata nella definizione di protocolli sperimentali adatti a questo tipo di valutazione (D. Faedo, A. Lunghi, L. Gigante, P. Cardillo, C. Di Bari, A. Pugliano: *"I depositi di prodotti chimici e la normativa Seveso: proposta di una metodologia di analisi per la valutazione dei rischi rilevanti connessi al rilascio di sostanze tossiche durante l'incendio"*, La rivista dei Combustibili, 54, 6, nov.-dic. 2001).

La fase più propriamente sperimentale del progetto è consistito nella raccolta dei dati termochimici presenti nelle varie banche dati strumentali della SSC, nella loro verifica, sottoponendoli a confronto con informazioni di letteratura ed eventuali altri studi già compiuti e nel loro inserimento nella struttura della nuova banca dati.

Il punto di partenza è stato quindi l'analisi dell'archivio dati della SSC; in particolare sono stati analizzati circa 600 rapporti di prova in cui erano stati condotti dei test termoanalitici e calorimetrici su sostanze pure prevalentemente di:

- intermedi farmaceutici;
- solventi;
- reattivi organici;
- prodotti della chimica di base;
- agrofarmaci;
- polimeri.

Nei rapporti analizzati erano presenti anche dati calorimetrici e termoanalitici di molte miscele di reazione e formulati: ovviamente non è stato possibile utilizzare anche questi dati per alimentare la Banca Dati poiché si tratta di sperimentazioni difficilmente riproducibili e pertanto poco interessanti da un punto di vista generale. Di contro, le prove condotte su miscele, possono essere considerate interessanti per valutare la potenziale incompatibilità di sostanze e, in effetti, la SSC ha recentemente prodotto per ISPESL una ricerca dal titolo "Studio sistematico del sinergismo che può determinarsi tra sostanze chimiche pericolose nel caso di loro rilascio contemporaneo, a seguito di incidenti su impianti o depositi ad alto rischio" per lo studio, con

metodi calorimetrici, della reattività/compatibilità di sostanze chimiche stoccate in insediamenti produttivi, come previsto dalle direttive “Seveso II e Severo III”.

Una parte notevole del progetto ha riguardato la verifica dei dati sperimentali, che si è svolta, come già detto, ripetendo la sperimentazione se opportuno e confrontando i risultati con la letteratura specializzata.

Come già illustrato nella fase introduttiva di questo rapporto, la ricerca delle informazioni termochimiche in letteratura non è una attività semplice: questo tipo di dati, se presente, non è raccolto organicamente in compilazioni e tanto meno in banche dati (è l'obiettivo di questo progetto è proprio quello di colmare questa lacuna) ma è “disperso” in decine monografie ed in riviste specializzate. Di seguito viene riportato un elenco non esaustivo delle principali fonti bibliografiche utilizzate per verificare i dati prodotti alla SSC.

G.J. Janz: **Thermodynamic Properties of Organic Compounds**. Academic Press, New York, 1967

D.R. Stull, E.F. Westrum, G.C. Sinke: **The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds**. Wiley & Sons, New York, 1969

J.D. Cox, G. Pilcher: **Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds**. Academic Press, Londra, 1970

J.B. Pedley, R.D. Naylor, S.P. Kirby: **Thermochemical Data of Organic Compounds**. 2nd Ed., Chapman and Hall, Londra, 1986

T.E. Daubert, R.P. Danner: **Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals**. Hemisphere Publishing Co., New York. 1989

M.W. Chase, C.A. Davies, J.R. Downey, D.J. Frurip, R.A. McDonald, A.N. Syverud: **JANAF Thermochemical Tables**. 3rd Ed. American Chemical Society, New York, 1985

J.B. Pedley: **Thermochemical Data and Structures of Organic Compounds**. Thermodynamics Research Center, Texas, 1994

M. Frenkel, G.J. Kabo, K.N. Marsh, G.N. Roganov, R.C. Wilhoit: **Thermodynamics of Organic Compounds in the Gas State**. Thermodynamics Research Center, Texas, 1994

D.R. Lide, H.V. Kehiaian: **CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data**. CRC Press, Boca Raton, 1994

I. Barin: **Thermochemical Data of Pure Substances**. 3^a Ed., VCH, Weinheim, 1995

D.R. Stull: **Fundamentals of Fire and Explosion**. AIChE Monograph Series **10** (1977)

J.H. Perry: **Chemical Engineers' Handbook**. McGraw-Hill, New York, 1950

S.W. Benson, J.H. Buss: *J. Chem. Phys.*, **29**, 546 (1958)

S.W. Benson: **Thermochemical Kinetics**. 2nd Ed., Wiley & Sons, New York, 1976

S.W. Benson et al.: *Chem. Rev.*, **69**, 279 (1969)

N. Cohen, S.W. Benson: *Chem. Rev.*, **93**, 2419 (1993)

S.E. Stein: **Structures and Properties Database and Estimation Program**, NIST, Vers. 2.01, 1994

E.S. Domalski, E.D. Hearling: *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **22** [4] 805 (1993)

E.S. Domalski, E.D. Hearling: **Estimation of Chemical Thermodynamic Properties of Organic Compounds**, NIST, 1994

L.A. Medard: **Accidental Explosions**. Vol. 1, Ellis Horwood Ltd., Chichester, 1989

J.C. Franklin: *Ind. Eng. Chem.*, **44**, 1070 (1949)

D.J. Frurip et al.: Determination of chemical process heats by experiment and prediction. Int. Symp. Runaway Reactions, CCPS/AIChE, Boston, 1995

Chemical Thermodynamic and Energy Release Program (CHETAH ver. 7.3). ASTM, 2001

HSC, Chemical Reaction and Equilibrium Software, Outokumpu, Vers. 2.0, 1994

REACT, A Chemical Equilibrium Calculator, UnitOOPS, Vers. 2.5, 1992

Barin et al.: **EquiTherm - Data base and software package for thermodynamic calculations**. VCH, 1993.

3. Parte sperimentale

Le attività del Laboratorio di Termochimica della SSC, nato nel 1978, riguardano soprattutto analisi, sperimentazioni e ricerche sulle reazioni fuggitive e per la caratterizzazione termochimica di prodotti e sostanze utilizzati nell'industria chimica di processo.

Le prove termoanalitiche e calorimetriche che vengono effettuate sono di seguito elencate.

Termogravimetria (TG) interfacciata ad un analizzatore FTIR per l'identificazione dei prodotti di decomposizione a seguito di runaway o incendio

Calorimetria differenziale a scansione (DSC)

Calorimetria a flusso di calore (C80)

Calorimetria adiabatica a bassa inerzia termica (Phi Tec II)

Calorimetria adiabatica (ARC)

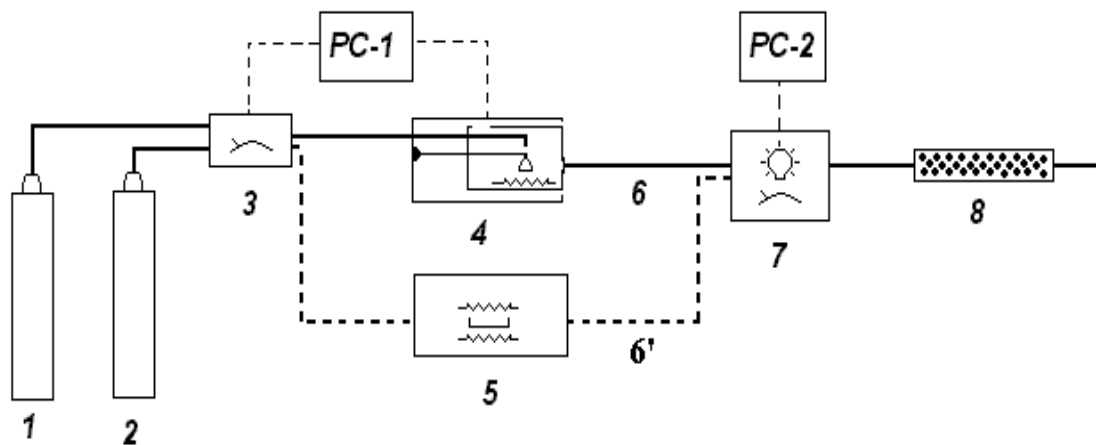
La disponibilità di differenti strumenti per misurare le proprietà termochimiche delle sostanze consente di definire, per ciascuna di esse, la metodologia analitica più adatta per effettuare la misura richiesta. Al fine di rendere più chiaro il significato dei dati termochimica prodotti, vengono di seguito descritte le apparecchiature utilizzate, ponendo enfasi sulle peculiarità di ciascuna tecnica utilizzate ed evidenziando i vantaggi e gli svantaggi che si possono avere utilizzandole.

3.1 Strumentazione utilizzata

3.1.1 Termogravimetria (TG) interfacciata ad un analizzatore FTIR per l'identificazione dei prodotti di decomposizione a seguito di runaway o incendio

L'apparecchiatura sperimentale utilizzata è costituita principalmente da un termoanalizzatore gravimetrico TGA, da un pirolizzatore veloce e da un analizzatore FTIR con cella per gas.

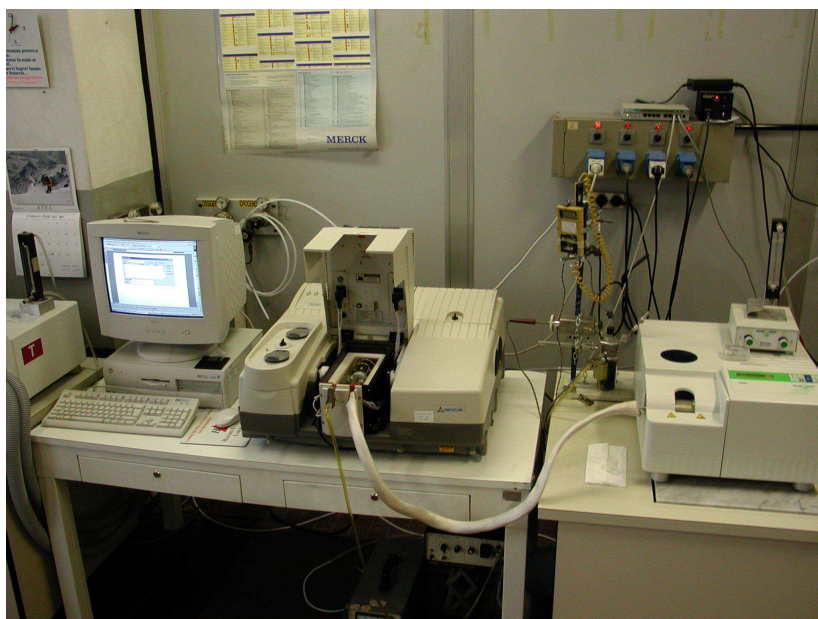
Nella figura seguente viene riportato lo schema della strumentazione utilizzata per le prove.



Schema strumentazione

- | | |
|--------------------------|----------------------------|
| 1) Bombola N2 | 5) Pirolizzatore |
| 2) Bombola aria | 6) Linea di trasferimento |
| 3) Sistema controllo gas | 7) FTIR |
| 4) TGA | 8) Filtro a carbone attivo |

Nella foto seguente è ritratta l'apparecchiatura utilizzata che mostra la termobilancia e il suo accoppiamento con l'analizzatore FTIR con cella per gas. Lo stesso tipo di interfacciamento è stato fatto con un pirolizzatore (Py), anch'esso attraverso l'uso di una linea di trasferimento riscaldata; la termobilancia ed il pirolizzatore, vengono utilizzati alternativamente.



L'accoppiamento TG-FTIR e Py-FTIR

Per quanto riguarda l'analizzatore FT-IR occorre ricordare che FT-IR è l'acronimo di "Fourier Transform Infrared spectrometry", cioè spettrometria infrarossa in trasformata di Fourier .

La regione infrarossa dello spettro comprende radiazioni con numeri d'onda che vanno da circa 12500 a 100 cm^{-1} , cioè con lunghezze d'onda da 0.8 a 100 μm . La relazione che lega numeri d'onda con lunghezze d'onda è infatti:

$$\text{cm}^{-1} = \frac{10^4}{\mu\text{m}}$$

Di solito nelle rappresentazioni spettrali si usano i numeri d'onda in quanto proporzionali all'energia di vibrazione. Infatti la relazione che lega la variazione di energia con la frequenza della radiazione assorbita o emessa è:

$$\Delta E = h\nu$$

$$\Delta E = \text{erg}$$

$$h = \text{erg} \cdot \text{sec}$$

$$\nu = \text{sec}^{-1}$$

Poiché la velocità della luce è:

$$c(\text{cm}/\text{sec}) = \lambda \nu$$

Allora:

$$\Delta E = h \frac{c}{\lambda} = hc \nu'$$

Con $\nu' = \frac{1}{\lambda}$, che non è più una frequenza in senso stretto, ma il reciproco di una lunghezza d'onda; si misura in cm^{-1} e si chiama numero d'onda.

Lo spettro infrarosso viene solitamente suddiviso in vicino, medio e lontano infrarosso. La maggior parte delle applicazioni analitiche è tuttavia ristretta alla porzione del medio infrarosso compresa tra i 4000 e i 400 cm^{-1} .

Per assorbire una radiazione infrarossa, una molecola deve subire un netto cambiamento del momento dipolare in seguito ad un moto vibrazionale o rotazionale. Se la frequenza associata alla radiazione IR di quest'ultima è esattamente uguale ad una frequenza vibrazionale naturale della molecola si verifica un trasferimento netto di energia che dà luogo ad un cambiamento dell'ampiezza della vibrazione molecolare e si ha, in conseguenza, l'assorbimento della radiazione. Lo stesso vale per la rotazione di una molecola.

Gli spettrometri a trasformata di Fourier sono costituiti da quattro componenti di base:

- 1) una sorgente che emette radiazione nella frequenza di interesse;
- 2) un interferometro di Michelson che produce l'interferogramma;
- 3) un rivelatore che produce un segnale elettrico in risposta alla radiazione che lo ha colpito;
- 4) un laser che produce una radiazione di una sola frequenza che segue lo stesso cammino della radiazione infrarossa e serve a calibrare lo strumento internamente.

Il cuore del sistema è l'interferometro; in tale dispositivo la luce incide su di uno specchio semiriflettente di germanio o KBr, il *beamsplitter*, che trasmette circa il 50% della luce incidente e ne riflette il resto. Il raggio trasmesso viene diretto verso uno specchio mobile, la parte rimanente verso uno specchio fisso. I due raggi poi si ricombinano nel *beamsplitter* dove, avendo percorso distanze diverse, generano interferenza distruttiva o costruttiva per tutte le frequenze della radiazione IR. La differenza sostanziale, rispetto ad un infrarosso tradizionale (dispersivo), è che l'interferometro misura simultaneamente tutte le frequenze anziché separarle nei singoli componenti spettrali come fa il monocromatore di uno strumento dispersivo. Il raggio risultante passa attraverso il campione in analisi e viene in parte assorbito; alla fine giunge al rivelatore.

Il segnale raccolto dal rivelatore è un interferogramma, che contiene l'informazione spettrale: l'interferogramma è la somma delle interferenze costruttive e distruttive di ogni singola lunghezza d'onda della sorgente infrarossa. L'analisi di Fourier permette poi di scomporre la curva nelle sue lunghezze d'onda componenti e di generare quindi uno spettro.

Caratteristiche dello spettrometro utilizzato (Nicolet Nexus):

Rivelatore: DTGS KBr

Beamsplitter: KBr

Laser: He/Ne

Sorgente: Ever-Glo Mid-IR Source

Il riconoscimento spettrale si basa sull'utilizzo di librerie digitali di spettri IR di prodotti in fase gassosa. Il sistema di ricerca e confronto si basa su alcuni algoritmi, di seguito elencati:

- correlazione: elimina gli effetti dovuti alla variazione della linea di base, ed è il più utilizzato;
- differenza assoluta, dà maggior peso alle piccole differenze tra lo spettro incognito e lo spettro di libreria, enfatizzando però l'effetto negativo delle impurità nella ricerca spettrale;

- differenza quadrata: enfatizza i picchi più grandi nello spettro incognito, e viene usato solitamente per spettri molto “rumorosi”;
- derivata assoluta: utile per dare risalto alla posizione dei picchi piuttosto che alla loro intensità;
- derivata quadrata: enfatizza i picchi più grandi e la forma dei picchi.

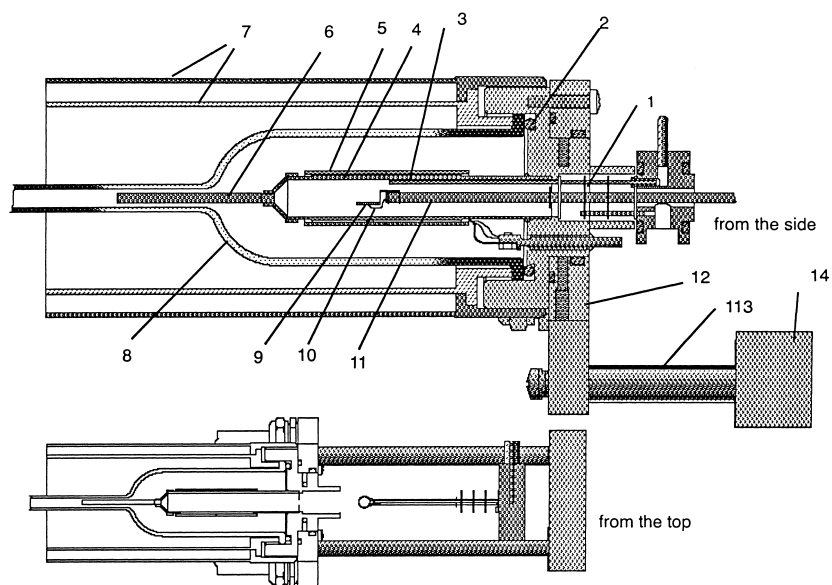
E' possibile effettuare la ricerca su tutto lo spettro, oppure su una o più regioni particolari. Solitamente con in primo tipo di ricerca si individuano i componenti presenti in quantità maggiore, mentre con il secondo si ricercano i picchi o le bande non ancora risolti.

Il software utilizzato (OMNIC E.S.P. 5.1) permette inoltre di effettuare operazioni che facilitano il riconoscimento spettrale, tra cui la correzione della linea di base e la sottrazione di uno spettro da un altro.

La termogravimetria (TG) è una tecnica d'analisi termica: con questo nome si intendono tutte le tecniche in cui si misura la variazione di una proprietà fisica di una sostanza in funzione della temperatura o del tempo.

Nell'analisi TG la proprietà fisica misurata è il peso di un campione posto in un apposito forno riscaldato a velocità costante. Per ottenere utili informazioni da questa tecnica, il campione deve liberare prodotti volatili. La curva termogravimetrica risultante fornisce informazioni sulla stabilità termica del campione iniziale, sulla composizione degli intermedi e degli eventuali prodotti di decomposizione.

Le termobalance sono costituite essenzialmente da: un forno, un programmatore di temperatura, un registratore e una bilancia, come indicato nella figura di seguito.



Schema della Termobilancia

- | | |
|--------------------------------|----------------------------|
| 1. Diaframmi di protezione | 8. Campana di metallo |
| 2. Guarnizione | 9. Portacampione (Pt) |
| 3. Capillare gas reattivo | 10. Termocoppia |
| 4. Forno | 11. Braccio della bilancia |
| 5. Camicia isolante | 12. Supporto del forno |
| 6. Condotto di scarico dei gas | 13. Braccio mobile |
| 7. Schermi radiativi | 14. Motore |

Le variazioni di peso del campione sono misurate valutando o la forza necessaria per riportare in posizione orizzontale il braccio della bilancia o valutando la deflessione di quest'ultimo. Il peso misurato dalla bilancia, opportunamente amplificato, viene registrato contemporaneamente alla temperatura misurata da una termocoppia posta in contatto con il campione o il portacampione: la tecnica permette di registrare perdite di peso dell'ordine dei microgrammi. Solitamente insieme alla curva TG si considera anche la sua derivata prima (DTG), che permette di distinguere tutti gli stadi di perdita di peso, anche quelli non facilmente individuabili dall'analisi della semplice curva TG.

Per valutare la stabilità termica dei prodotti ai fini della sicurezza le prove TG si effettuano normalmente in atmosfera ossidante (aria) e in atmosfera inerte (azoto). E' così possibile distinguere gli effetti di perdita di peso imputabili a decomposizione da quelli dovuti a una ossidazione (combustione). L'intervallo di temperatura normalmente indagata varia da temperatura ambiente fino a 1100°C.

Il campione è caricato in un crogiolo aperto (generalmente di platino o allumina) che viene appoggiato su di un piatto portacampione (9) connesso al braccio della bilancia (11). Immediatamente al di sotto del piatto in platino ha sede un sensore costituito da una termocoppia di tipo "R" (PtRh/Pt) che registra così la temperatura del campione (10). In questo modo è possibile registrare simultaneamente l'andamento del peso del campione e della temperatura differenziale tra il crogiolo ed il forno (SDTA).

Lo strumento utilizzato alla Stazione Sperimentale per i Combustibili (TGA 850 Mettler Toledo) è equipaggiato con un regolatore automatico di gas, che permette di inviare sul campione un flusso costante di aria o di azoto e che viene azionato via software all'inizio e durante la prova.

3.1.2 Calorimetria differenziale a scansione (DSC)

La determinazione quantitativa del calore in gioco è possibile per mezzo della DSC che rappresenta un'evoluzione della DTA. In questa tecnica si confronta il comportamento termico del campione in esame rispetto a un campione inerte: in corrispondenza di una trasformazione o reazione chimica, si fornisce al campione una quantità misurata di energia per mantenerlo alla stessa temperatura del campione inerte di riferimento. In altre parole, ogni modificazione eso o endotermica del campione provoca uno squilibrio del sistema, che viene immediatamente corretto per ristabilire l'eguaglianza di temperatura. L'energia elettrica necessaria per ristabilire l'equilibrio rappresenta la misura diretta dell'energia termica sviluppata o assorbita nella trasformazione. Lo strumento registra la velocità con cui il

calore viene assorbito o ceduto dal campione (dH/dt) durante la transizione in funzione della temperatura o del tempo. Si ottiene in tal modo un diagramma caratteristico che indica non solo il numero, la natura e la temperatura degli eventi termici (come nella curva DTA), ma anche l'entità dei medesimi (l'area di un picco è direttamente proporzionale alla variazione energetica)

La DSC è da tempo impiegata per studiare il comportamento termico delle sostanze e i pericoli derivanti da reazioni esotermiche. Richiede una quantità limitata di campione (pochi mg) e brevi tempi di analisi (meno di due ore). Lavorare con pochi mg di sostanza è un grande vantaggio soprattutto per un esame preliminare nel caso di sostanze sconosciute che possono decomporsi o esplodere violentemente. Per questo motivo viene utilizzata soprattutto per lo screening iniziale sui materiali di partenza, sugli intermedi isolati, sui residui di evaporazione, sui residui di distillazione, sui prodotti, sulle acque madri, ecc. La DSC è utile come screening poiché i laboratori hanno poco tempo, poco campione e molti campioni. Le prove sono spesso più qualitative che quantitative. Infatti, in alcuni casi non è possibile garantire che un campione in quantità così limitata di una miscela eterogenea corrisponda alla composizione di una miscela in un reattore. I metodi di omogeneizzazione usati nella chimica microanalitica non sempre sono applicabili perché, cambiando la grandezza dei cristalli, può cambiare la reattività della miscela. L'interesse per queste prove consiste soprattutto nell'osservare se il campione mostra segnali di instabilità termica e a quale temperatura.

Le prove in condizioni di riscaldamento dinamico sono molto veloci e possono abbracciare un largo intervallo di temperatura, inoltre consentono una maggiore sensibilità.

Le prove in condizioni isoterme sono più utili per rivelare temperature iniziali di decomposizione più significative; inoltre consentono di identificare le sostanze che hanno una stabilità termica dipendente dal tempo. Queste sostanze hanno una decomposizione termica che non segue la legge di Arrhenius, per cui la velocità di decomposizione aumenta esponenzialmente

all'aumentare della temperatura: può essere quindi necessario un lungo periodo di induzione prima che la decomposizione diventi rilevabile.

Una limitazione all'impiego DSC per la valutazione dei pericoli è la differenza tra le condizioni sperimentali e le normali condizioni operative in un impianto industriale. I dati DSC sono ottenuti con una velocità di riscaldamento costante che forza la reazione in modo tale che questa avviene a temperature più alte nello strumento di quanto avviene nella realtà. Come risultato i dati sperimentali devono spesso essere estrapolati alle condizioni operative normali. Si devono anche utilizzare prove in isoterma per convalidare l'estrapolazione a temperatura inferiore. Inoltre, con il DSC non si possono ottenere informazioni sulla pressione né sull'influenza delle condizioni sperimentali, tipo agitazione o aggiunta di reagenti.

La produzione minima di calore che è possibile rilevare con gli strumenti più moderni è di circa 25 mW (sensibilità assoluta) mentre la sensibilità relativa (che tiene conto della quantità di campione, 3-5 mg) è di 5 mW. Non si hanno problemi quando si studiano effetti fisici tipo transizioni di fase che producono o consumano una quantità di calore relativamente grande ad una temperatura ben definita. Ma la sensibilità relativa dei DSC è, rispetto ad altri strumenti appositamente progettati, certamente troppo bassa per studiare l'auto riscaldamento di un campione.

Nella valutazione della stabilità termica si incontrano spesso sostanze che fondono con conseguente successivo aumento di pressione a causa dell'evaporazione o che si decompongono liberando notevoli quantità di gas. I crogioli standard di alluminio, anche se chiusi con il coperchietto e sigillati, non possono resistere all'aumento di pressione, per cui la rottura del portacampione durante la prova rende molto difficile la valutazione quantitativa del dato. Per risolvere questo problema sono stati sviluppati diversi portacampioni ad alta pressione: celle sigillate di acciaio inossidabile, capillari in vetro sigillati, celle metalliche sigillate con teflon, crogioli in alluminio sigillati con adesivi, ampole di vetro con base piatta, microreattori sigillati in vetro. Tuttavia, i portacampioni contenenti materiali polimerici non sono sempre adatti per questo tipo di valutazione a causa delle limitazioni

dovute alla temperatura. Diverse case costruttrici hanno più recentemente proposto crogioli resistenti fino a 100 bar e il loro impiego è stato descritto in letteratura. Bisogna porre particolare attenzione anche alla scelta del materiale delle capsuline perché, per esempio, i portacampioni *standard* in alluminio possono mostrarsi reattive con molti prodotti chimici (composti alogenati, acidi e basi forti) che possono portare a risultati errati.

L'influenza dell'atmosfera che circonda il campione è stata attentamente valutata da diversi ricercatori; tuttavia, durante le determinazioni di routine, quando è necessario esaminare in crogioli chiusi un grande numero di campioni in breve tempo, l'influenza dell'aria statica che rimane nel portacampione viene spesso dimenticata con conseguenti reazioni secondarie di ossidazione, soprattutto con i crogioli in acciaio inossidabile (volume 120-270 μl). E' stato riportato che con crogioli di 270 μl , l'aria statica che rimane nel crogiolo (circa 60 μg di ossigeno) è sufficiente per ossidare circa 30 μg di sostanza organica. Quando si usano piccole quantità di campione (2-5 mg) questa reazione di ossidazione può sviluppare anche 500 J/g con comparsa di picchi esotermici non reali che possono indurre a misure preventive non necessarie con conseguente penalizzazione di un processo.

Per ovviare a questo inconveniente, presso la Stazione sperimentale per i Combustibili, è stato costruito un dispositivo molto semplice e di bassissimo costo per chiudere i crogioli direttamente in atmosfera inerte. Si tratta di una cella in plexiglass (altezza 10 cm, diametro 8,5 cm), con due valvole autobloccanti per l'ingresso e l'uscita dell'azoto. La cella è costituita da una base e dal relativo coperchio che viene avvitato su di essa per assicurare la tenuta. Attraverso il coperchio passa una speciale pinza che regge la parte superiore del crogiolo mentre nella base è stata ricavata una sede per serrare la parte inferiore. Dopo aver pesato il campione, le due parti del crogiolo vengono poste nelle rispettive sedi entro la cella, che viene chiusa avvitando il coperchio. Viene quindi fatto passare azoto per 5 min con una velocità di 5 ml/min. Dopo il lavaggio della cella, il coperchietto del crogiolo viene abbassato per mezzo dell'apposita pinza fino a combaciare con la parte inferiore e il crogiolo viene sigillato direttamente sotto azoto. Diverse

prove di confronto hanno confermato che anche minime tracce di aria statica rimasta nel crogiolo possono influenzare enormemente il tracciato della curva DSC.

Le prove in aria statica possono però essere utilizzate per valutare la reattività del campione nei confronti dell'aria. Una applicazione molto importante riguarda la stabilità dei residui di distillazione sotto vuoto, quando si rompe il vuoto con aria.

L'importanza di questo tipo di prove consiste soprattutto nell'osservare se il campione mostra segnali di instabilità termica (generalmente evidenziati da effetti esotermici) e a quale temperatura ($T_{dec.}$). Poiché la temperatura di decomposizione di una sostanza ($T_{dec.}$), non è un parametro termodinamico ma è fortemente influenzata dalle condizioni in cui viene effettuata la prova (velocità di riscaldamento, sensibilità dello strumento utilizzato, ecc.), il valore di $T_{dec.}$ determinato con una prova DSC, deve essere confermato con prove più conservative quali prove di calorimetria adiabatica (ARC o Phi-Tec) o effettuando prove DSC isoterme, soprattutto quando la temperatura di decomposizione osservata sia prossima alla temperatura operativa normale. Vi sono casi riportati in letteratura, in cui la differenza tra $T_{dec.}$ determinata con prove dinamiche DSC è risultata di circa 100 °C più alta (e quindi meno conservativa) rispetto a quella determinata con prove ARC.

3.1.3 Calorimetria a flusso di calore (C80)

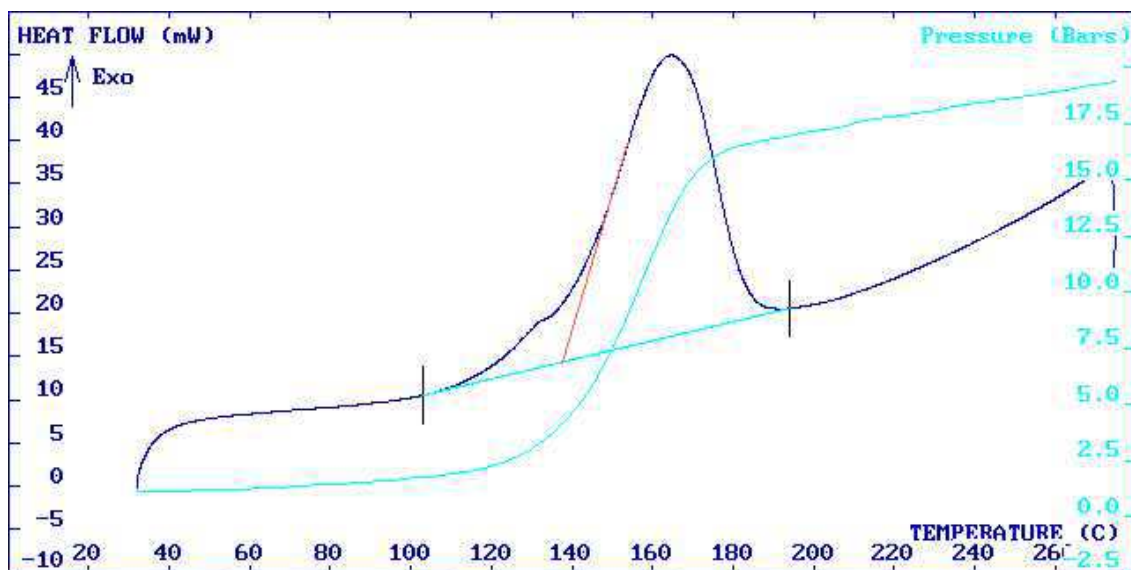
Il calorimetro a flusso di calore (C80) in dotazione alla SSC, è basato sul principio di Calvet. Il segnale derivante dal campione, misurato rispetto a quello proveniente da una cella di riferimento, è proporzionale alla potenza termica trasportata attraverso una superficie che circonda il campione e la sua cella. L'area sottesa alla curva del segnale in funzione del tempo è proporzionale alla variazione totale di energia entro il campione.

Sia il campione che il riferimento sono posizionati entro il blocco calorimetrico che agisce da pozzo di calore sia in condizioni dinamiche che isoterme. La temperatura del blocco può essere programmata per aumentare o diminuire linearmente. Anche se a prima vista il principio può sembrare simile alla DSC

ci sono significative differenze. La massa del campione può essere fino a 1000 volte maggiore; questo fatto, oltre alla considerevole stabilità termica dell'apparecchiatura, contribuisce all'effettiva sensibilità del calorimetro. Però il prezzo da pagare è l'estremamente bassa risposta termica: le velocità di riscaldamento variano nell'intervallo 0,1-2 °C/min che rendono le prove estremamente lunghe.

Lo strumento, presso la Stazione sperimentale per i Combustibili, è stato modificato e munito di un trasduttore di pressione che consente di misurare la pressione prodotta durante la reazione.

La Figura seguente riporta un esempio della curva del Flusso di Calore (Heat Flow, mW) e della pressione (Bar) in funzione della Temperatura (°C) relativa ad una prova C80 condotta su un campione di tert-butil perossido. Si osserva un effetto esotermico tra 125 e 175 °C ($\Delta H_{\text{ESO}} = -1100 \text{ J/g}$) accompagnato da un notevole aumento di pressione.



Esempio di una curva C80

3.1.4 Calorimetria adiabatica a bassa inerzia termica (Phi Tec II)

La Calorimetria Adiabatica é una tecnica molto valida per caratterizzare processi altamente esotermici come, ad esempio, le reazioni decompositive.

La Calorimetria Adiabatica a Cella Chiusa (CCAC) é stata utilizzata per diversi anni come tecnica di riferimento per gli studi di sicurezza e di caratterizzazione di stabilit  per prodotti puri e in miscela. Sono stati sviluppati molti apparecchi, spesso direttamente dei diversi utilizzatori e poi commercializzati, basati sull'utilizzo di vasi Dewar: lo scopo era quello di fornire risultati affidabili da utilizzarsi per la previsione del rischio ed il dimensionamento dei sistemi di protezione (venting).

L'Accelerating Rate Calorimeter (ARC) é stato sicuramente il calorimetro adiabatico commerciale maggiormente conosciuto ed utilizzato.

Lo strumento   stato inizialmente sviluppato dalla Dow ed   stato descritto per la prima volta da Townsend nel 1977. Il fattore chiave nella progettazione e nella costruzione dello strumento   il mantenimento del campione in condizioni di quasi perfetta adiabaticit . Sono stati sviluppati modelli matematici da cui si possono determinare i parametri cinetici per reazioni esotermiche.

Sebbene i dati prodotti dall'ARC siano formalmente direttamente esportabili nelle equazioni utilizzate nel calcolo del venting, bisogna tenere conto di un fattore, normalmente chiamato Φ o di inerzia termica, che   in relazione con la quantit  di energia rilasciata dalla reazione che   accumulata nella cella calorimetrica. Questo fattore Φ dipende dal rapporto tra le capacit  termiche del campione analizzato e della cella calorimetrica: nel caso di un reattore industriale, Φ   di poco maggiore di uno mentre in una prova standard all'ARC pu  raggiungere valori superiori a cinque. Il fattore Φ influenza drammaticamente la misura adiabatica: quanto   pi  alto il valore di Φ tanto pi    bassa la temperatura massima adiabatica rilevata per la reazione esotermica studiata, cos  come la pressione massima e la massima velocit  di autoriscaldamento.

Per un corretto dimensionamento dei sistemi di sfogo, gli esperimenti di calorimetria adiabatica dovrebbero pertanto essere condotti utilizzando celle a basso Φ , cos  come raccomandato al termine del progetto di ricerca DIERS che negli anni ottanta ha indicato le condizioni ottimali per ottenere i dati per

il venting e per la valutazione di reazioni esotermiche condotte in grande scala.

Come conseguenza degli studi del DIERS, un nuovo prodotto é stato progettato e prodotto, il Phi-Tec II che presenta le medesime caratteristiche di sensibilità di individuazione degli eventi esotermici dell'ARC e la bassa inerzia termica del VSP. Questo strumento utilizza, per una prova standard, una moderata quantità di campione e una cella portacampione dalle pareti molto sottili, al fine di minimizzare l'effetto della massa della cella di prova nel calcolo del fattore di inerzia termica. In questa maniera i dati prodotti sono immediatamente utilizzabili, senza che debbano essere corretti per il fattore di inerzia termica e, pertanto, risultano più attendibili.

Da una prova al Phi-Tec II si ottengono i seguenti risultati:

- Temperature di onset (T a cui inizia l'effetto esotermico)
- Determinazione dei parametri cinetici dell'equazione di Arrhenius (energia di attivazione, fattore di frequenza, ordine di reazione)
- Entalpia della reazione esotermica rilevata
- Sistemi di caratterizzazione secondo il criterio DIERS (ad es. dimensionamento dei dischi di rottura per sistemi in pressione)
- Diagramma Temperatura e pressione vs tempo (per le prove a cella chiusa)
- Indagine degli effetti di raffreddamento esterni
- Indagine sugli effetti di sorgenti esterne di calore

Ci sono tre modalità principale per utilizzare il Phi-Tec II.

Nella modalità HWS, per mezzo dei riscaldatori del calorimetro si porta il campione ad una temperatura prestabilita. Quindi si effettua automaticamente la sequenza HWS fino a raggiungere una velocità di autoriscaldamento del campione superiore a 0,02 °C/min come per l'ARC.

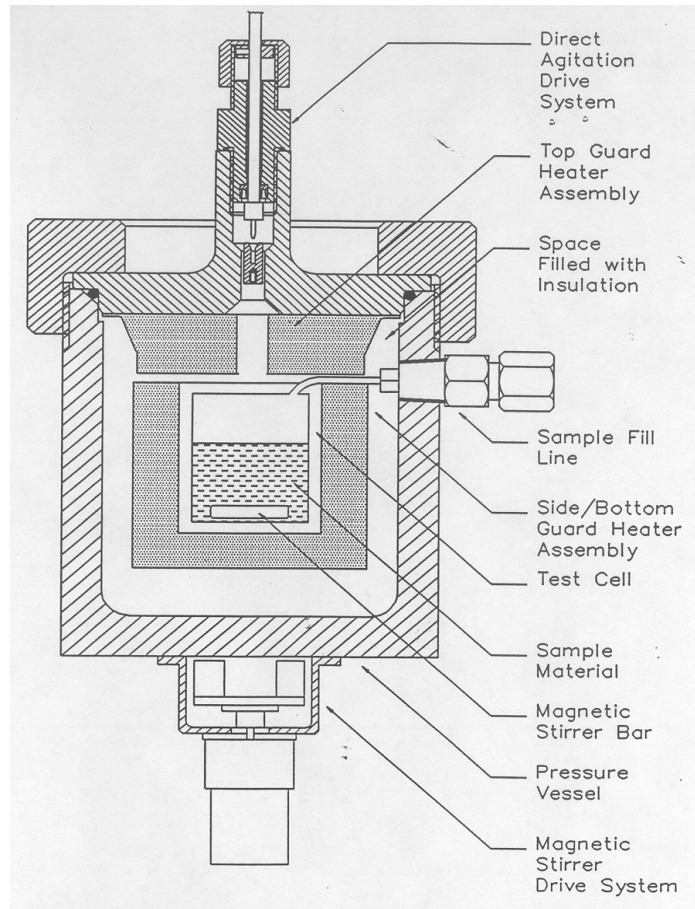
Nel caso in cui si effettui un test di tipo "closed cell", il Phi-Tec II viene usato scaldando il campione fino ad una data temperatura, senza effettuare il ciclo HWS. Nel momento in cui viene raggiunta la temperatura desiderata, i riscaldatori smettono di funzionare e il sistema seleziona la modalità *track*; in

pratica il calorimetro mantiene la temperatura dell'ambiente circostante la cella prova (vessel) alla medesima temperatura interna della cella, ricreando condizioni virtualmente adiabatiche. Il test termina quando l'effetto esotermico indagato presenta un "exotherm rate" o velocità di aumento della temperatura, inferiore al limite di sensibilità impostato (generalmente 0,01 °C/min.) o quando il campione raggiunge la massima temperatura o pressione di *track* (definita dall'operatore). Se è attivo il sistema di compensazione di pressione, la pressione del vessel viene regolata in modo da mantenere integra la cella.

L'ultima modalità, "open cell test", non prevede la compensazione di pressione, quindi la cella risulta essere alla medesima pressione del vessel. Il campione viene scaldato fino alla temperatura desiderata, alla quale il sistema seleziona la modalità *track*. Il test termina quando l'effetto esotermico indagato presenta un "exotherm rate", inferiore al limite di sensibilità impostato o quando il campione raggiunge la temperatura di *track* impostata. La velocità di formazione di un gas che si genera nel corso di una reazione di decomposizione è un parametro importante da determinare durante lo studio della sicurezza di un processo.

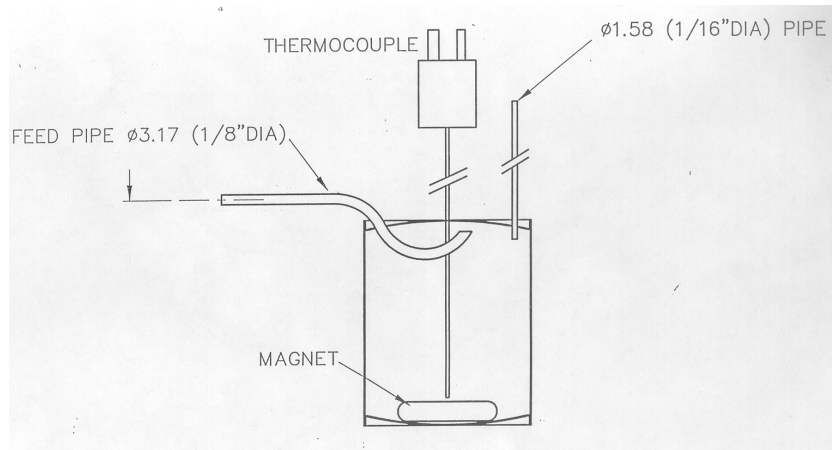
Pur ipotizzando l'impiego della legge dei gas, il volume del gas sviluppato da una reazione decompositiva in una cella calorimetrica è talmente piccolo che non può essere separato quantitativamente da quello generato durante l'espansione del liquido; inoltre la pressione interna alla cella diventa talmente elevata che non è più possibile applicare la legge dei gas ideali. Per ovviare questi problemi si fa sfiatare il gas contenuto nella cella all'interno del vessel e si misura la pressione che si viene a creare; in questo modo si può applicare la legge dei gas ideali per poter determinare velocità di formazione del gas.

La struttura del Phi-Tec II è mostrata nella seguente figura.



Schema del calorimetro Phi-Tec II

Lo strumento è costituito da una cella in vetro o, più spesso, in acciaio situata all'interno di una camera di acciaio (*vessel*) riscaldata da alcune termoresistenze; uno schema della cella utilizzata per le prove è riportato di seguito.



Schema della cella utilizzata per le prove Phi Tec II

La cella è munita di un tubo di acciaio che permette il caricamento in sicurezza dei reagenti sia in fase solida, mediante aspirazione con una pompa da vuoto, sia liquida, attraverso una siringa. E' possibile effettuare un dosaggio durante la reazione mediante l'ausilio di una pompa meccanica o della siringa (in acciaio o in vetro).

Il campione viene mantenuto sotto costante agitazione magnetica per favorire la miscelazione tra le fasi che si vengono a creare nell'ambiente di reazione.

Il volume tipico di una cella in acciaio standard è di 120 cm³; ciò permette di impiegare una maggiore quantità di campione rispetto all'ARC.

La cella è contenuta in un vessel cilindrico munito di valvole di sfiato e di caricamento, di volume pari a 2 L che può sostenere fino ad una pressione di 204 bar.

Le pareti della cella hanno spessore molto inferiore rispetto a quelle dell'ARC (0.152 mm contro 0.65 mm) e permettono di mantenere prossimo a zero il calore di reazione disperso dal campione assicurando al sistema una situazione di quasi adiabaticità.

Questa peculiarità ha stabilito la sostanziale differenza tra ARC e Phi-Tec II perchè il calore assorbito dalla bomba ARC è rilevante. Per quanto riguarda il Phi-Tec, invece, le pareti della cella sono molto sottili e assorbono molto meno calore dissipato dal campione.

Il fenomeno che si viene a creare nelle celle calorimetriche può essere quantificato in termini di fattore- Φ :

$$\Phi = 1 + \frac{M_c C_{pc}}{M_s C_{ps}}$$

dove M_s è la massa del campione, M_{cp} della cella, e C_p è la capacità termica.

Il fattore Φ è una misura diretta della frazione di calore, rilasciato dal campione, che viene impiegato per scaldare la cella; mentre in una prova tipica all'ARC si ha un fattore Φ pari a 2-3, il Phi-Tec II ha un $\Phi \approx 1$. Il valore tipico di Φ per le celle in acciaio si aggira intorno a 1.05-1.08.

Per evitare l'implosione o esplosione di una cella con pareti così sottili, il Phi-Tec II impiega un sistema di compensazione di pressione che prevede l'introduzione, mediante una serie di valvole attuatrici, di una contropressione di azoto nel *vessel* di contenimento per vincere la pressione che si può generare all'interno della cella. Quest'ultima, viene misurata (come pressione differenziale tra la cella e il *vessel*) da un trasduttore che ha un intervallo di lavoro di ± 14 bar mentre un trasduttore di pressione (che può lavorare fino a 170 bar) misura la pressione assoluta all'interno del *vessel*. Quando la pressione differenziale sorpassa il limite di set point, la valvola di entrata al *vessel* viene aperta per introdurre azoto; quando invece scende sotto il limite minimo di set point, il solenoide in uscita viene attivato permettendo lo sfiato del *vessel*.

La temperatura viene invece misurata da 4 termocoppie situate sulla testa, sul lato, sul fondo e all'interno della cella. Le quattro termocoppie sono regolate tramite un sistema di controllo di tipo feed-back PID (proportional-integral-differential).

3.1.5 Calorimetria adiabatica (ARC)

L'impiego dell'ARC è ormai consolidato e sono numerosi gli esempi di applicazione riportati in letteratura. Il fattore chiave nella progettazione e

nella costruzione dello strumento è il mantenimento del campione in condizioni di quasi perfetta adiabaticità. Il portacampione sferico di materiale diverso (titanio, Hastelloy, ecc.) è sospeso entro l'involucro del calorimetro. Questo involucro (camicia) è costruito in rame rivestito di nickel e contiene tre termocoppie per la misura della temperatura e otto riscaldatori per minimizzare la differenza di temperatura tra la parete del calorimetro e il campione durante una reazione esotermica. Una quarta termocoppia attaccata alla parete del portacampione è usata per registrare la temperatura del campione. La bomba portacampione è direttamente collegata attraverso un tubo capillare ad un trasduttore di pressione del tipo a diaframma che registra continuamente la pressione della reazione.

Nello strumento il campione, una volta iniziata la reazione esotermica, viene mantenuto in condizioni adiabatiche: il forno si scalda con la stessa velocità del portacampione.

Parte del calore liberato dalla reazione va a riscaldare la bomba portacampione. I dati sperimentali devono quindi essere corretti per tenere conto dell'inerzia termica della bomba. L'aumento adiabatico della temperatura del campione ΔT_{ad} e il calore di reazione ΔH possono essere calcolati dal ΔT strumentale, $\Delta T_{ad,s}$ con le seguenti equazioni:

$$\Delta T_{ad} = \phi * \Delta T_{ad,s} \quad (1)$$

$$\Delta H = c_p * \Delta T_{ad} \quad (2)$$

mentre la temperatura finale raggiungibile in condizioni adiabatiche, T_{fin} è calcolata dalla:

$$T_{fin} = T_o + \Delta T_{ad} \quad (3)$$

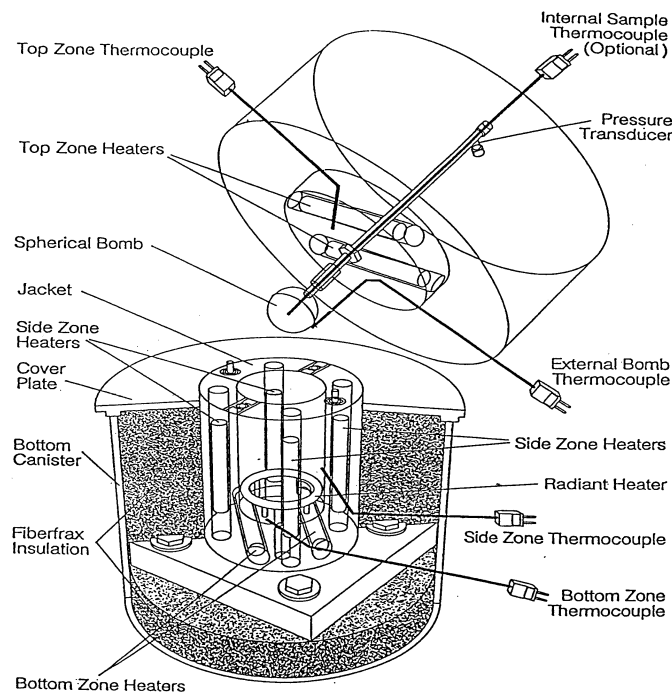
dove T_o è la temperatura iniziale dell'effetto esotermico rilevata dallo strumento. Il fattore ϕ , definito inerzia termica, è ricavabile dall'espressione seguente:

$$\phi = 1 + M_b * c_{p,b} / M_c * c_{p,c} \quad (4)$$

dove M_b , M_c , $c_{p,b}$ e $c_{p,c}$ sono le masse e i calori specifici della bomba (comprensiva della massa della fascetta che si utilizza per legare la termocoppia alla bomba) e del campione.

Per abbreviare la durata della prova, l'unità è equipaggiata da un riscaldatore raggiate a stadi, indipendente dal sistema di controllo adiabatico, che aumenta la temperatura del campione ad un livello prestabilito. Quindi si imposta la sequenza "heat" (5-10 °C), "wait" (15-30 min) e "search" fino a raggiungere una velocità di autoriscaldamento del campione superiore a 0,02 °C/min. Una volta rilevata l'esoterma, si ottengono automaticamente dati di t , T e P , in condizioni adiabatiche, finchè la reazione non è finita e la velocità di autoriscaldamento non è tornata sotto il valore limite prefissato.

L'involucro del calorimetro e il sistema portacampione sono mostrati nella seguente figura.



Schema del calorimetro adiabatico ARC

Gli intervalli operativi sono 25 - 500 °C e 1 - 170 bar (al di sopra interviene una valvola di sicurezza). Nel programmare la prova è necessario considerare l'inerzia termica della bomba e la sua influenza sui risultati. Il tipo di bomba deve essere scelto per simulare attentamente le condizioni dell'impianto. Molto spesso si utilizza l'Hastelloy C per minimizzare gli effetti catalitici, altre volte può essere opportuno aggiungere appositamente idonei catalizzatori per simulare le condizioni che si possono incontrare in pratica. Se sono richiesti dati di pressione e di velocità di aumento di pressione è importante considerare anche il grado di riempimento del portacampione.

Nel caso si debba valutare il comportamento termico di un campione da mantenere ad elevata temperatura per lunghi periodi (nel caso di essiccamento, distillazione, immagazzinamento, ecc.) è opportuno ricorrere a prove di invecchiamento in isoterma.

Ci sono due modi principali per utilizzare l'ARC. Nel primo caso, per abbreviare la durata della prova, per mezzo dei riscaldatori si può portare il campione ad una temperatura prestabilita. Quindi si effettua automaticamente la sequenza "heat", "wait" e "search" fino a raggiungere una velocità di autoriscaldamento del campione superiore a 0,02 °C/min.

Nel secondo caso, l'ARC viene usato in isoterma mantenendo il campione ad una data temperatura per un certo tempo. Se durante questa fase non si osservano effetti esotermici, lo strumento passa automaticamente nel modo "normale".

Da una singola prova ARC si ottengono i dati riportati nella seguente Tabella.

Tabella delle principali informazioni ottenibili da una prova ARC

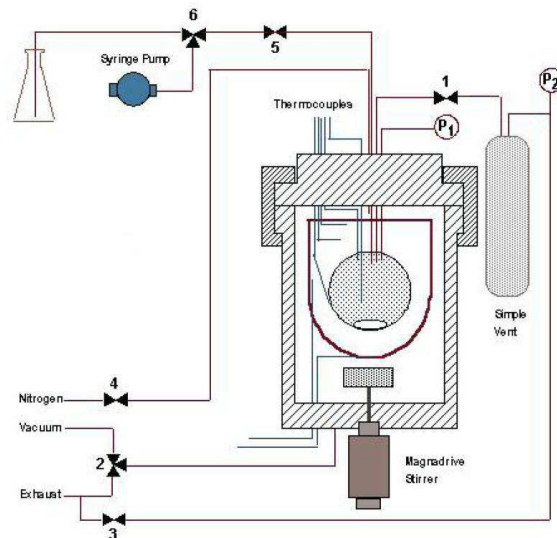
- temperatura di inizio e fine decomposizione
- velocità di autoriscaldamento ad ogni temperatura
- pressione ad ogni temperatura
- aumento adiabatico di temperatura
- velocità di aumento della pressione

- tempo all'esplosione o tempo per raggiungere la massima velocità di reazione
 - parametri cinetici della decomposizione
-

L'ARC è stato progettato soprattutto per l'analisi di liquidi omogenei. Per ottenere risultati attendibili con le bombe standard il campione deve esibire un'alta conducibilità termica e/o una bassa viscosità per favorire il trasferimento convettivo di massa. Queste caratteristiche sono necessarie per minimizzare - durante la prova - sia i gradienti di temperatura che di concentrazione. Materiali solidi che non fondono prima della decomposizione e campioni che contengono fasi liquide multiple che reagiscono fra di loro sono esempi di sostanze che possono fornire risultati non conservativi per quanto riguarda la valutazione dei pericoli di reazioni fuggitive.

L'utilità dell'ARC è stata ulteriormente aumentata con l'introduzione nel portacampione di una piccola barra magnetica rivestita in teflon (diametro 1,8 mm e lunghezza 8 mm) che funge da agitatore, in quanto viene fatta girare da un magnete posto sotto la bomba. Oltre alla possibilità di effettuare prove sotto agitazione, l'ARC consente l'introduzione nella bomba di piccole quantità di un secondo componente ad una determinata temperatura di reazione, per mezzo di un opportuno raccordo sul capillare del trasduttore di pressione che reca un setto del tipo usato per l'introduzione, mediante siringa, in gas cromatografia.

Il calorimetro ARC ha subito recentemente una reingegnerizzazione: il nuovo modello di calorimetro adiabatico chiamato New ARC possiede diverse caratteristiche di innovazione rispetto al precedente. Lo strumento è formato da due unità: una contenete il campione con tutte le apparecchiature annesse, l'altra contenete i sistemi di controllo della strumentazione, compreso il terminale che riporta a quadro i dati sperimentali.



Schema del new ARC e delle apparecchiature annesse

Lo strumento rimane comunque un calorimetro adiabatico fornito di un forno riscaldato da termoresistenze, che nella nuova versione sono 4 e non più 3. Non sono cambiate infatti le termoresistenze che riscaldano il campione lateralmente, dal basso e dall'alto, ma è stata installata anche una quarta resistenza che riscalda la linea di alimentazione alla cella calorimetrica, mantenendola alla stessa temperatura del campione. Ciò permette di ridurre la presenza di effetti di riflusso all'interno della linea di carico, riducendo così i disturbi sulla lettura della temperatura della cella e rendendo più sensibile lo strumento nella ricerca di un eventuale effetto esotermico. Nel caso in cui vi sia l'inizio di una reazione esotermica della massa analizzata, lo strumento passa in modalità adiabatica, riuscendo a seguire il profilo di temperatura con maggiore prontezza: le termoresistenze sono infatti in grado di riscaldarsi fino a 200 °C/min contro i 15 °C/min della precedente versione dell'ARC.

Il New ARC è sempre in grado di leggere l'evoluzione della pressione nel tempo durante lo svolgersi di una prova, che può essere eseguita nelle classiche modalità in Iso-Aging e Heat-Wait-Search.

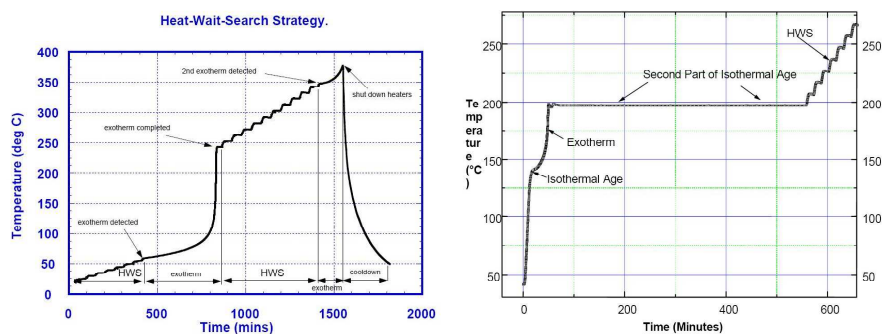
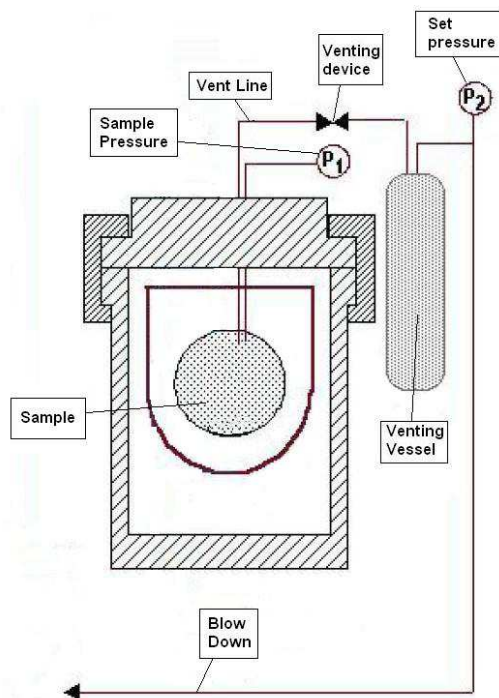


Grafico di una tipica prova in modalità HWS e di una prova in modalità iso-ageing con due stadi di invecchiamento sulla stessa miscela reagente

E' possibile inoltre utilizzare un apposito dosatore che, mantenendo in pressione il composto da alimentare, è in grado di simulare delle aggiunte di reagente durante lo svolgersi della prova, anche nel caso in cui la cella, contenete il campione analizzato, si trovi in pressione.

Lo strumento in dotazione alla SSC è provvisto di un dispositivo che, grazie all'accoppiamento magnetico tra un magnete rotante e un'ancoretta all'interno della massa reagente, è in grado di agitare il campione sottoposto all'indagine calorimetrica. Si ha in questo modo una migliore efficienza di scambio termico tra i riscaldatori e la massa campione, inoltre è possibile variare la velocità di agitazione durante lo svolgersi della prova potendo così simulare effettive esigenze di processo o scenari incidentali.

Novità assoluta, per questo tipo di calorimetro adiabatico, è la presenza di un sistema di sfiato che permette di far sfogare la massa reagente, ad una pressione fissata dall'operatore, all'interno di un serbatoio esterno durante lo svolgersi di una prova sperimentale. Questa caratteristica permette di raccogliere dati adeguati e di caratterizzare i sistemi reagenti al fine del dimensionamento dei dispositivi di sfogo delle sovrappressioni, come valvole di sicurezza o dischi di rottura, da installare sul reattore che esegue la sintesi.



Schema del sistema di sfiato

Alla data di consegna del presente lavoro, sono stati inserite nella struttura del Database circa 300 sostanze, tra quelle di maggior interesse industriale poiché coinvolte in sperimentazioni propedeutiche alla industrializzazione di prodotto e pertanto significativamente rappresentanti di quelle presenti in ambito industriale.

3.2 Sostanze analizzate

L'elenco delle sostanze inserite (comprensivo di numero identificativo CAS e classe di prodotto) nella banca dati è di seguito riportato.

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica

acido 2-nitrocinnammico	612-41-9	nitroderivati
acido 2-nitrofenil acetico	3740-52-1	nitroderivati
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo	6358-07-2	nitroderivati
2-ammino-4-nitroanisolo	99-59-2	nitroderivati
2-ammino-4-nitrofenolo	99-57-0	nitroderivati

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

4-cloro-2-nitroanilina	89-63-4	nitroderivati
4-cloro nitrobenzene	100-00-5	nitroderivati
2-cloro-5-nitropiridina	4548-45-2	nitroderivati
2,4-dicloro-6-nitroanilina	2683-43-4	nitroderivati
3,4-dicloronitrobenzene	99-54-7	nitroderivati
2,4-difluoronitrobenzene	446-35-5	nitroderivati
4-fluoro-2-nitrotoluene	446-10-6	nitroderivati
8-idrossi-5-nitrochinolina	4008-48-4	nitroderivati
3-metil-4-nitrofenolo	2581-34-2	nitroderivati
2-metossi-5-nitropiridina	5446-92-4	nitroderivati
3-nitroacetanilide	122-28-1	nitroderivati
3-nitroacetofenone	121-89-1	nitroderivati
2-nitroanilina	88-74-4	nitroderivati
2-nitroanisolo	91-23-6	nitroderivati
4-nitrobenzammide	619-80-7	nitroderivati
nitrobenzene	98-95-3	nitroderivati
4-nitrobenzilacetato	619-90-9	nitroderivati
4-nitrobenzoilcloruro	122-04-3	nitroderivati
4-nitrobenzotrile	619-72-7	nitroderivati
4-nitrobenzotrifluoruro	402-54-0	nitroderivati
3-nitrobenzotrifluoruro	98-46-4	nitroderivati
6-nitrochinolina	613-50-3	nitroderivati
4-nitro-3-cresolo	2581-34-2	nitroderivati
2-nitrofenolo	88-75-5	nitroderivati
2-nitrotoluene	88-72-2	nitroderivati
3-nitro-o-toluidina	603-83-8	nitroderivati

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

5-nitrovanillina	6635-20-7	nitroderivati
2,3,4-tricloronitrobenzene	17700-09-3	nitroderivati
perossido di benzoile	94-36-0	perossidi
idroperossido di tertbutile	75-91-2	perossidi
idroperossido di cumene	80-15-9	perossidi
perossido di tertbutile	110-05-4	perossidi
cinnamonitrile	4360-47-8	nitrile
cloro acetonitrile	107-14-2	nitrile
2-cloro-6-metil benzonitrile	6575-09-3	nitrile
3-cloro propionitrile	542-76-7	nitrile
crotononitrile	4786-20-3	nitrile
3,5-diclorobenzonitrile	6575-00-4	nitrile
2,6-difluorobenzonitrile	1897-52-5	nitrile
3-(dimetilammino) propionitrile	1738-25-6	nitrile
3,4-dimetossifenil acetonitrile	93-17-4	nitrile
3,4-dinitrobenzonitrile	4248-33-3	nitrile
fumaronitrile	764-42-1	nitrile
glutaronitrile	544-13-8	nitrile
isoftalonitrile	626-17-5	nitrile
malononitrile	109-77-3	nitrile
4-nitrobenzonitrile	619-72-7	nitrile
acido aceton dicarbossilico	542-05-2	acidi
acido adipico	124-04-9	acidi
acido cicloesan carbossilico	98-89-5	acidi
acido cinnammico	621-82-9	acidi
acido 2-clorobenzoico	118-91-2	acidi

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

acido 2-cloro-3,5-dinitro benzoico	2497-91-8	acidi
acido 2,4-dimetossi benzoico	91-52-1	acidi
acido 2,4-dinitrobenzoico	610-30-0	acidi
acido 4-idrossifenil piruvico	156-39-8	acidi
acido 3-idrossi-4-metossi cinnammico	537-73-5	acidi
acido isoftalico	121-91-5	acidi
acido 4 (metiltio) benzoico	13205-48-6	acidi
alcol allilico	107-18-6	alcoli
alcol 2(2-amminoetossi) etilico	929-06-6	alcoli
alcol 2-(2-cloroetossi) etilico	628-89-7	alcoli
alcol 2-dimetilammino etilico	108-01-0	alcoli
alcol 2,3-epossipropilico	556-52-5	alcoli
alcol tetraidrofurfurilico	97-99-4	alcoli
alcol 2,4,6-trimetilbenzilico	4170-90-5	alcoli
acrilaldeide	107-02-8	aldeidi
aldeide cinnammica	107-02-8	aldeidi
benzaldeide	100-52-7	aldeidi
2,4-diidrossibenzaldeide	95-01-2	aldeidi
3,4-dimetossibenzaldeide	120-14-9	aldeidi
α-esilcinnamalaldeide	101-86-0	aldeidi
2-etilbutirraldeide	97-96-1	aldeidi
3-fenilpropionaldeide	104-53-0	aldeidi
propionaldeide	123-38-6	aldeidi
acido 2-clorobenzoico	118-91-2	alogenoderivati
2-ammino-4-clorofenolo	95-85-2	alogenoderivati
o-bromoanilina	615-36-1	alogenoderivati

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

m-bromoanilina	591-19-5	alogenoderivati
p-bromoanilina	106-40-1	alogenoderivati
4-bromobenzofenone	90-90-4	alogenoderivati
1-bromo-4-clorobutano	6940-78-9	alogenoderivati
1-bromo-3-cloropropano	109-70-6	alogenoderivati
2-bromo-4,6-dinitroanilina	1817-73-8	alogenoderivati
2'-cloroacetofenone	2142-68-9	alogenoderivati
3-cloroanilina	108-42-9	alogenoderivati
2-clorobenzil cloruro	611-19-8	alogenoderivati
2-clorobenzoil cloruro	609-65-4	alogenoderivati
2-clorobenzotricloruro	2136-89-2	alogenoderivati
1-cloro-3,4-dinitrobenzene	610-40-2	alogenoderivati
2-cloro-6-fluorobenzaldeide	387-45-1	alogenoderivati
2-cloro-6-fluorotoluene	443-83-4	alogenoderivati
cloruro di benzile	100-44-7	alogenoderivati
2,4-dibromoanilina	615-57-6	alogenoderivati
3,5-dibromosalicilaldeide	90-59-5	alogenoderivati
1,3-diclorobenzene	541-73-1	alogenoderivati
2,4-diclorobenzilcloruro	94-99-5	alogenoderivati
2,4-diclorobenzotricloruro	13014-18-1	alogenoderivati
2,6-dicloro-3-metilaniilina	64063-37-2	alogenoderivati
2,6-dicloropirazina	4774-14-5	alogenoderivati
difenil bromometano	776-74-9	alogenoderivati
2'-fluoroacetofenone	445-27-2	alogenoderivati
3-fluorobenzaldeide	456-48-4	alogenoderivati
fluorobenzene	462-06-6	alogenoderivati

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

4-fluorobenzil cloruro	352-11-4	alogenoderivati
2,4,6-tribromoanilina	147-82-0	alogenoderivati
epicloridrina	106-89-8	epossidi
1,2-epossibutano	106-88-7	epossidi
ossido di cicloesene	286-20-4	epossidi
ossido di etilene	75-21-8	epossidi
ossido di mesitile	141-79-7	epossidi
ossido di propilene	75-56-9	epossidi
ossido di stirene	96-09-3	epossidi
butilbenzene	104-51-8	idrocarburi
difenilmetano	101-81-5	idrocarburi
etilbenzene	100-41-4	idrocarburi
isooottano	540-84-1	idrocarburi
1-fenil eptano	1078-71-3	idrocarburi
allil ammina	107-11-9	ammine
N-amminoesametenimmina	5906-35-4	ammine
2(2-ammino etossi) etanolo	929-06-6	ammine
4-ammino fenolo	123-30-8	ammine
3-ammino-5-metilissazolo	1072-67-9	ammine
2-ammino-2-metil-1-propanolo	124-68-5	ammine
anilina	62-53-3	ammine
benzilammina	100-46-9	ammine
n-butilammina	109-73-9	ammine
cicloesilammina	108-91-8	ammine
2,2'-diamminodibenzile		ammine
3,4-diamminotoluene	496-72-0	ammine

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

N,N-dibutilanilina	613-29-6	ammine
1,2-difenil etilammina	25611-78-3	ammine
N,N-dimetilanilina	121-69-7	ammine
N,N-dimetil-p-toluidina	99-97-8	ammine
2,4-dimetossianilina	2735-04-8	ammine
N-etil-N-metilanilina	613-97-8	ammine
N-etil-o-toluidina	94-68-8	ammine
furfurilammina	617-89-0	ammine
N-metilanilina	100-61-8	ammine
2-metossianilina	90-04-0	ammine
3-metossibenzilammina	5071-96-5	ammine
2-metossietilammina	109-85-3	ammine
propilammina	107-10-8	ammine
tribenzilammina	620-40-6	ammine
acetato di allile	591-87-7	esteri
acetoacetato di metile	105-45-3	esteri
benzoato di etile	93-89-0	esteri
benzoato di propile	2315-68-6	esteri
cianoacetato di metile	105-34-0	esteri
cinnammato di metile	103-26-4	esteri
etil-2-cloroacetoacetato	609-15-4	esteri
2-etilesil tioglicolato	7659-86-1	esteri
fenil propionato	637-27-4	esteri
formiato di etile	109-94-4	esteri
acetammide	60-35-5	ammidi
acetanilide	103-84-4	ammidi

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

acetoacetanilide	102-01-2	ammidi
2-acetoacetanisidide	92-15-9	ammidi
2-acetoacetotoluidide	93-68-5	ammidi
4-acetofenetidide	62-44-2	ammidi
4-acetotoluidide	103-89-9	ammidi
diacetammide	625-77-4	ammidi
N,N-dimetilacetammide	127-19-5	ammidi
N,N-dimetilformammide	68-12-2	ammidi
propionammide	79-05-0	ammidi
succinammide	110-14-5	ammidi
acetofenone	98-86-2	chetoni
acetonilacetone	110-13-4	chetoni
ciclopentanone	120-92-3	chetoni
dietilamminoacetone	1620-14-0	chetoni
2',4'-diidrossiacetofenone	89-84-9	chetoni
2',4'-dimetossiacetofenone	829-20-9	chetoni
3,4-dimetossifenilacetone	776-99-8	chetoni
3-esanone	589-38-8	chetoni
2'-idrossiacetofenone	118-93-4	chetoni
2-idrossi-4-ottilossibenzofenone	1843-05-6	chetoni
2-idrossipropiofenone	610-99-1	chetoni
2-metil-1,3-ciclopentandione	765-69-5	chetoni
2-metossiacetofenone	579-74-8	chetoni
4- <i>tert</i> -butilcicloesano	98-53-3	chetoni
1,3-cicloesandione	504-02-9	chetoni
4-acetilpiridina	1122-54-9	eterocicli

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica -Segue

2-ammino-4-metilpirimidina	108-52-1	eterocicli
3-amminopiridina	462-08-8	eterocicli
aziridina	151-56-4	eterocicli
3-benzoilpiridina	5424-19-1	eterocicli
chinaldina	91-63-4	eterocicli
chinolina	91-22-5	eterocicli
1-cianoacetilpiperidina	15029-30-8	eterocicli
2-cianopiridina	100-70-9	eterocicli
3-cianopiridina	100-54-9	eterocicli
2-cloro-6-metossipiridina	17228-64-7	eterocicli
2,5-diidrofurano	1708-29-8	eterocicli
2,6-dimetilpiridina	108-48-5	eterocicli
fenil-4-piridil chetone	14548-46-0	eterocicli
2-idrazinopiridina	4930-98-7	eterocicli
4-idrossimetilpiridina	586-95-8	eterocicli
3-idrossipiridina	109-00-2	eterocicli
imidazolo	288-32-4	eterocicli
isossazolo	288-14-2	eterocicli
3-metilisossazolo	30842-90-1	eterocicli
2-metilpiridina	109-06-8	eterocicli
1-metil-2-piridone	694-85-9	eterocicli
N-metil pirrolidone	872-50-4	eterocicli
piperidina	110-89-4	eterocicli
pirazina	290-37-9	eterocicli
pirazolo	288-13-1	eterocicli
piridazina	289-80-5	eterocicli

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

piridina	110-86-1	eterocicli
tetraidropirano	142-68-7	eterocicli
tetrazolo	288-94-8	eterocicli
tiofene	110-02-1	eterocicli
1,2,4-triazolo	288-88-0	eterocicli
2,4,5-triidrossipirimidina	20636-41-3	eterocicli
atrazina	1912-24-9	eterocicli
simazina	122-34-9	eterocicli
propazina	139-40-2	eterocicli
terbutilazina	5915-41-3	eterocicli
ametrina	834-12-8	eterocicli
simetrina	1014-70-6	eterocicli
prometrina	7287-19-6	eterocicli
chloridazon	1698-60-8	eterocicli
benalaxyl	71626-11-4	ammidi
tetraconazolo	112281-77-3	eterocicli
N-metil-idrossilammina cloridrato	4229-44-1	ammine
N,O-dimetil-idrossilammina cloridrato	6638-79-5	ammine
acido acetoidrossammico	546-88-3	ammidi
metossiammina cloridrato	593-56-6	ammine
idrossilammina cloridrato	5470-11-1	ammine
idrossilammina solfato	10039-54-0	ammine
idrossilammina soluzione 50% in acqua	7803-49-8	ammine
idrossilammina fosfato	20845-01-6	ammine
1-azide-3-metil benzene	4113-72-8	azidi

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

4-toluensulfonil azide	941-55-9	azidi
idrossiurea	127-07-1	ammidi
metansolfonil cloruro	124-63-0	alogenoderivati
4-cloro-3-nitrobenzil alcol	55912-20-4	nitroderivati
4-cloro-2-nitrobenzil alcol	22996-18-5	nitroderivati
2-cloro-5-nitrobenzil alcol	80866-80-4	nitroderivati
5-cloro-2-nitrobenzil alcol	73033-58-6	nitroderivati
2-cloro-6-nitrobenzaldeide	6361-22-4	nitroderivati
2-cloro-5-nitrobenzaldeide	6361-21-3	nitroderivati
5-cloro-2-nitrobenzaldeide	6628-86-0	nitroderivati
4-cloro-3-nitrobenzaldeide	16588-34-4	nitroderivati
3-nitrobenzilalcol	619-25-0	nitroderivati
4-nitrobenzilalcol	619-73-8	nitroderivati
o-nitrobenzilalcol	612-25-9	nitroderivati
4-nitrobenzaldeide	555-16-8	nitroderivati
o-nitrobenzaldeide	552-89-6	nitroderivati
3,5-dinitrobenzilalcol	71022-43-0	nitroderivati
4-idrossi-3-nitrobenzaldeide	3011-34-5	nitroderivati
5-idrossi-2-nitrobenzaldeide	42454-06-8	nitroderivati
3-idrossi-4-nitrobenzaldeide	704-13-2	nitroderivati
3-metossi-2-nitrobenzaldeide	53055-05-3	nitroderivati
tetraciano etilene	670-54-2	nitrili
1,2,3,4-tetraciano benzene	712-74-3	nitrili
3,5-dimetilisossazolo	300-87-8	ammine
3-amminoisossazolo	36216-80-5	ammine

Tabella - Elenco delle sostanze inserite nella banca dati termochimica - Segue

3-fenil-5-isossazolone	1076-59-1	eterocicli
difenilammina	122-39-4	ammine
2-idrossipiridina-N-ossido	13161-30-3	eterocicli
3-nitro-1,8-naftalenedicarbossilica anidride	3027-38-1	nitroderivati
2,4,7-trinitro-9-fluorenone	129-79-3	nitroderivati
3-nitro anidride ftalica	641-70-3	nitroderivati
adenosina	58-61-7	eterocicli
1,4-diclorobenzene	106-46-7	alogenoderivati
citidina	65-43-3	eterocicli
isopropildenuridina	362-43-6	eterocicli

4. Contenuto della Banca Dati

4.1 Dati Termochimici

La banca dati, per la parte che riguarda i dati termochimica di competenza della SSC presenta le seguenti informazioni principali:

- Temperatura di inizio transizione (endo-esotermica) da prova di calorimetria differenziale (in atmosfera di aria e di azoto, DSC o C80) o adiabatica
- Entalpia di transizione da prova di calorimetria differenziale (in atmosfera di aria e di azoto, DSC o C80)
- Temperatura di inizio decomposizione da prova adiabatica (ARC o Phi Tec II)
- Incremento adiabatico di temperatura da prova adiabatica (ARC o Phi Tec II)
- Incremento di pressione dovuto alla decomposizione della sostanza analizzata da prova adiabatica (C80, ARC o Phi Tec II)
- TMR, da prova adiabatica (ARC o Phi Tec II)
- Perdita di peso a seguito della decomposizione della sostanza analizzata (TGA) con identificazione e classificazione di pericolosità delle sostanze prodotte (FTIR).

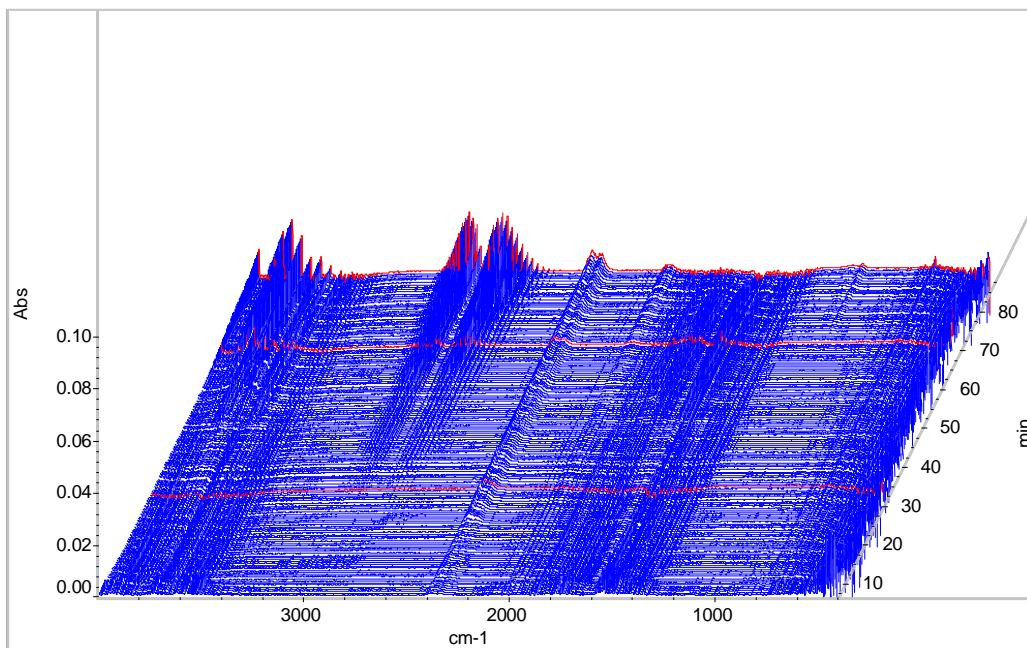
Le sostanze raccolte e di cui è stato fornito l'elenco, sono state analizzate almeno con una delle tecniche calorimetriche e termoanalitiche descritte nella sezione 3.1 e, di seguito, si fornisce una descrizione dettagliata del tipo di dati raccolti per ciascuna tecnica sperimentale utilizzata.

4.1.1 Termogravimetria (TG) interfacciata ad un analizzatore FTIR per l'identificazione dei prodotti di decomposizione a seguito di runaway o incendio

La termogravimetria (TG) è basata sulla misura, in funzione della temperatura (T) o del tempo (t), del peso di un campione posto in un apposito forno riscaldato a velocità costante. Per ottenere utili informazioni da questa tecnica, il campione deve liberare prodotti volatili. La curva termogravimetrica risultante fornisce informazioni sulla stabilità termica del campione iniziale, sulla stabilità termica e sulla composizione degli intermedi e sulla composizione di un eventuale residuo. In una reazione di decomposizione si possono individuare due temperature caratteristiche: T_i che è definita temperatura iniziale di decomposizione e T_f che è la temperatura finale. T_i è la temperatura a cui la perdita di peso raggiunge il valore corrispondente alla sensibilità dello strumento; T_f è la temperatura a cui la perdita di peso raggiunge il suo massimo valore, corrispondente alla decomposizione completa. Le variazioni di peso del campione possono essere valutate quantitativamente dalla differenza di livello sulla curva. I fattori che più influenzano una curva TG sono soprattutto strumentali (velocità di riscaldamento, atmosfera nel forno e nel portacampione, geometria del forno e del portacampione, natura del portacampione) o direttamente dipendenti dal campione (quantità, solubilità nel campione dei gas svolti, dimensioni delle particelle, impaccamento del campione, conducibilità termica). Tra questi fattori quelli più studiati sono la velocità di riscaldamento e l'atmosfera nel forno.

Per le prove condotte per il riconoscimento dei prodotti di decomposizione, i gas rilasciati durante il riscaldamento vengono trascinati dal flusso di azoto attraverso una linea riscaldata e convogliati nella cella FTIR dove vengono analizzati in continuo. Come risultato della prova si ottiene, da una parte la perdita di peso del campione in funzione del tempo e della temperatura (analisi TG) e dall'altra una "cascata" di spettri che rappresenta qualitativamente la composizione della miscela gassosa in uscita dal forno

della termobilancia (analisi FTIR), come mostrato nell'esempio della figura di seguito.



Esempio della “cascata” di spettri FTIR

I risultati delle prove TG riportate nel Database contemplano la descrizione delle condizioni operative utilizzate nella sperimentazione:

- Intervallo di temperatura indagato (°C);
- Tipo di crogiolo portacampione (tipicamente in Platino, Pt);
- Velocità di riscaldamento (°C/min) per le prove in scansione;
- Atmosfera nel forno (tipo di gas e flusso).

I dati termochimici ottenibili da questo tipo di prova (per le prove condotte in scansione di temperatura) sono i seguenti:

- Temperatura di inizio della variazione di peso (T onset)
- Percentuale di variazione di peso (Delta m %)
- Temperatura finale della variazione di peso (T end)

Per le prove condotte al fine di ottenere il riconoscimento di eventuali prodotti pericolosi di decomposizione (prove TG-FTIR), essi vengono riportati indicandone:

- nome;
- CAS#;
- percentuale di emissione rispetto al peso del campione analizzato (%);

Nella parte del Database di competenza degli altri soggetti coinvolti, tali informazioni saranno integrate con le indicazioni di pericolo e le istruzioni di comportamento da adottare in caso di emergenza.

4.1.2. Calorimetria differenziale a scansione (DSC)

La Calorimetria Differenziale a Scansione (DSC) è da tempo impiegata per studiare il comportamento termico delle sostanze e i pericoli derivanti da reazioni esotermiche. Richiede una quantità limitata di campione (pochi mg) e brevi tempi di analisi (meno di due ore). Lavorare con pochi milligrammi di sostanza è un grande vantaggio soprattutto per un esame preliminare (*screening*) nel caso di sostanze sconosciute che possono decomporsi o esplodere violentemente. Per questo motivo viene utilizzata soprattutto per lo *screening* iniziale sui materiali di partenza, sugli intermedi isolati, sui residui di evaporazione, sui residui di distillazione, sui prodotti, sulle acque madri, ecc. Le prove sono però spesso più qualitative che quantitative, poiché in alcuni casi non è possibile garantire che un campione in quantità limitata sia sempre rappresentativo. L'importanza di questo tipo di prove consiste soprattutto nell'osservare se il campione mostra segnali di instabilità termica (generalmente evidenziati da effetti esotermici) e a quale temperatura ($T_{dec.}$). Poiché la temperatura di decomposizione di una sostanza ($T_{dec.}$), non è un parametro termodinamico ma è fortemente influenzata dalle condizioni in cui viene effettuata la prova (velocità di riscaldamento, sensibilità

dello strumento utilizzato, ecc.), il valore di $T_{dec.}$ determinato con una prova DSC, deve essere confermato con prove più conservative quali prove di calorimetria adiabatica (ARC o Phi-Tec) o effettuando prove DSC isoterme, soprattutto quando la temperatura di decomposizione osservata sia prossima alla temperatura operativa normale. Vi sono casi riportati in letteratura, in cui la differenza tra $T_{dec.}$ determinata con prove dinamiche DSC è risultata di circa 100 °C più alta (e quindi meno conservativa) rispetto a quella determinata con prove ARC.

I risultati delle prove DSC riportate nel Database contemplano la descrizione delle condizioni operative utilizzate nella sperimentazione:

- Intervallo di temperatura indagato (°C);
- Tipo di crogiolo portacampione (tipicamente acciaio inox, chiuso);
- Velocità di riscaldamento (°C/min), per le prove in scansione;
- Atmosfera nel crogiolo (tipo di gas).

I dati termochimici ottenibili da questo tipo di prova (per le prove condotte in scansione di temperatura) sono i seguenti:

- Temperatura di inizio degli effetti termici osservati (T onset)
- Temperatura del picco degli effetti termici osservati (T Peak)
- Temperatura finale degli effetti termici osservati (T end)
- Entalpia di trasformazione (Delta H, kJ/g)

Gli effetti esotermici (generalmente associati a decomposizioni) sono evidenziati dal valore negativo del Delta H, quelli endotermici (fusioni, sublimazioni) presentano un valore positivi di Delta H.

4.1.3 Calorimetria a flusso di calore (C80)

Il calorimetro a flusso di calore è basato sul principio di Calvet. Il segnale derivante dal campione, misurato rispetto a quello proveniente da una cella di riferimento, è proporzionale alla potenza termica trasportata attraverso una superficie che circonda il campione e la sua cella. L'area sottesa alla curva del segnale in funzione del tempo è proporzionale alla variazione totale di energia entro il campione.

Sia il campione che il riferimento sono posizionati entro il blocco calorimetrico che agisce da pozzo di calore sia in condizioni dinamiche che isoterme. La temperatura del blocco può essere programmata per aumentare o diminuire linearmente. Anche se a prima vista il principio può sembrare simile alla DSC ci sono significative differenze. La massa del campione può essere fino a 1000 volte maggiore; questo fatto, oltre alla considerevole stabilità termica dell'apparecchiatura, contribuisce all'effettiva sensibilità del calorimetro. Però il prezzo da pagare è l'estremamente bassa risposta termica: le velocità di riscaldamento variano nell'intervallo 0,1-2 °C/min che rendono le prove estremamente lunghe. Lo strumento, presso la Stazione sperimentale per i Combustibili, è stato modificato e munito di un trasduttore di pressione che consente di misurare la pressione prodotta durante la reazione.

I risultati delle prove C80 riportate nel Database contemplano la descrizione delle condizioni operative utilizzate nella sperimentazione:

- Intervallo di temperatura indagato (°C);
- Tipo di crogiolo portacampione (tipicamente vetro, in cella di acciaio chiusa);
- Velocità di riscaldamento (°C/min), per le prove in scansione;
- Atmosfera nel crogiolo (tipo di gas);

- Grado di riempimento.

I dati termochimici ottenibili da questo tipo di prova (per le prove condotte in scansione di temperatura) sono i seguenti:

- Temperatura di inizio degli effetti termici osservati (T onset);
- Pressione in corrispondenza dell'inizio degli effetti termici osservati (P onset)
- Temperatura del picco degli effetti termici osservati (T Peak)
- Temperatura finale degli effetti termici osservati (T end)
- Pressione in corrispondenza della fine degli effetti termici osservati (P end)
- Entalpia di trasformazione (Delta H, kJ/g)

Gli effetti esotermici (generalmente associati a decomposizioni) sono evidenziati dal valore negativo del Delta H, quelli endotermici (fusioni, sublimazioni) presentano un valore positivi di Delta H. La misurazione della pressione permette di interpretare meglio anche la natura degli effetti termici misurati, ad esempio un effetto esotermico associato ad aumento di pressione sarà probabilmente da attribuire ad una decomposizione esotermica. Le prove C80 i cui risultati sono stati introdotti nella Banca Dati, sono state condotte utilizzando celle portacampione di acciaio o vetro del volume di 2 ml.

4.1.4 Calorimetria adiabatica a bassa inerzia termica (Phi Tec II)

Nel Database, i dati ottenuti con questo tipo di strumentazione sono inseriti nella stessa sezione delle prove ARC (4.1.5); sarà possibile riconoscere i dati provenienti da questo strumento dal valore di inerzia termica (Φ) che, per le prove Phi Tec II è tipicamente di 1,05-1,15. Il calorimetro adiabatico Phi-Tec II infatti, presenta le medesime caratteristiche di sensibilità di individuazione degli eventi esotermici

dell'ARC ma una più bassa inerzia termica. Questo strumento utilizza, per una prova standard, una moderata quantità di campione e una cella portacampione dalle pareti molto sottili, al fine di minimizzare l'effetto della massa della cella di prova nel calcolo del fattore di inerzia termica. In questa maniera i dati prodotti sono immediatamente utilizzabili, senza che debbano essere corretti per il fattore di inerzia termica e, pertanto, risultano più attendibili.

Per un corretto dimensionamento dei sistemi di sfogo, gli esperimenti di calorimetria adiabatica dovrebbero pertanto essere condotti utilizzando celle a basso Φ , così come raccomandato al termine del progetto di ricerca DIERS che negli anni ottanta ha indicato le condizioni ottimali per ottenere i dati per il *venting* e per la valutazione di reazioni esotermiche condotte in grande scala.

I risultati delle prove Phi Tec II riportate nel Database contemplano la descrizione delle condizioni operative utilizzate nella sperimentazione:

- Intervallo di temperatura indagato (°C);
- Fattore di inerzia termica (Φ), tipicamente di 1,05-1,15;
- Tipo di prova (dinamica o iso-ageing);
- Grado di riempimento.

I dati termochimici ottenibili da questo tipo di prova sono i seguenti:

- Temperatura di inizio decomposizione;
- Pressione all'inizio della decomposizione;
- Velocità di autoriscaldamento (SHR) iniziale;
- Velocità di autoriscaldamento massima (SHR max);
- Temperatura finale di decomposizione;
- Pressione finale di decomposizione;
- Aumento adiabatico di temperatura osservato (Delta T strum.);

- Aumento adiabatico di temperatura corretto (Delta T corr.);
- Entalpia di decomposizione (Delta H, kJ/g)

La misurazione della pressione permette di interpretare meglio anche la natura degli effetti termici misurati, ad esempio un effetto esotermico associato ad aumento di pressione sarà probabilmente da attribuire ad una decomposizione esotermica.

Le prove Phi Tec II i cui risultati sono stati introdotti nella Banca Dati, sono state condotte utilizzando celle portacampione di acciaio o vetro del volume di 100 ml.

4.1.5 Calorimetria adiabatica (ARC)

L'impiego dell'ARC è ormai consolidato e sono numerosi gli esempi di applicazione riportati in letteratura. Il fattore chiave nella progettazione e nella costruzione dello strumento è il mantenimento del campione in condizioni di quasi perfetta adiabaticità. Il portacampione sferico di materiale diverso (titanio, Hastelloy, ecc.) è sospeso entro l'involucro del calorimetro. Questo involucro (camicia) è costruito in rame rivestito di Nickel e contiene tre termocoppie per la misura della temperatura e otto riscaldatori per minimizzare la differenza di temperatura tra la parete del calorimetro e il campione durante una reazione esotermica. Una quarta termocoppia attaccata alla parete del portacampione è usata per registrare la temperatura del campione. La bomba portacampione è direttamente collegata attraverso un tubo capillare ad un trasduttore di pressione del tipo a diaframma che registra continuamente la pressione della reazione.

Nello strumento il campione, una volta iniziata la reazione esotermica, viene mantenuto in condizioni adiabatiche: il forno si scalda con la stessa velocità del portacampione. Parte del calore liberato dalla reazione va a riscaldare la bomba portacampione. I dati sperimentali

devono quindi essere corretti per tenere conto dell'inerzia termica della bomba. L'aumento adiabatico della temperatura del campione ΔT_{ad} e il calore di reazione ΔH possono essere calcolati dal ΔT strumentale (misura diretta della prova adiabatica).

La descrizione delle condizioni operative utilizzate nella sperimentazione ARC e i dati termochimici ottenibili da questo tipo di prova sono i medesimi di quelli riportati per la sperimentazione al Phi Tec II (4.1.5). Le prove ARC i cui risultati sono stati introdotti nella Banca Dati, sono state condotte utilizzando celle portacampione di acciaio o vetro del volume di 9 ml.

4.2 Altri Dati presenti

La scheda generale della sostanza, integrata con i dati chimico-fisici e quelli di carattere tossicologico conterrà anche le seguenti informazioni:

4.2.1 Informazioni generali sulla sostanza analizzata

- Nome chimico
- Formula bruta
- Numero CAS
- Formula di struttura
- Stato fisico
- Purezza (della sostanza analizzata)
- Punto di fusione
- Punto di ebollizione
- Flash point

4.2.2 Informazioni sulle caratteristiche di pericolosità della sostanza analizzata

- Classificazione ed etichettatura
- Caratteristiche tossicologiche (LD₅₀, TLV, ecc.)
- Reattività
- Compatibilità
- Eventuale coinvolgimento in incidenti

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

La presente appendice riassume, in formato tabellare, i dati termochimici raccolti in questa ricerca. Per ciascun composto inserito, sono presenti differenti sezioni. Di seguito viene presentato un elenco delle sezioni ed il tipo di dati presenti in ciascuna sezione.

A1. Dati Base	CAS # Gruppo ¹ Formula Peso Molecolare (g/mol) Purezza ² Stato fisico (liquido, l. o solido, s.) ³
A2 Dati termodinamici	DH ^o f ⁴ DHd totale ⁵
A3 Dati DSC	Temperatura di inizio dell'effetto termico (°C) ⁶ Temperatura di onset (°C) Temperatura di picco (°C)

¹ Indica la classe alla quale il prodotto appartiene e viene scelta in base al gruppo funzionale presente nella molecola. Per sostanze polifunzionalizzate, viene indicata la classe del prodotto più rilevante (ad es. un alcol che presenta anche un gruppo nitro, verrà inserito nel gruppo dei nitroderivati e non in quello degli alcoli)

² Indica il grado di purezza del prodotto che è stato sottoposto a prove termochimiche.

³ Non sono state introdotte prove su campioni allo stato gassoso

⁴ E' l'entalpia standard di formazione per sostanze a 25 °C ed in fase gassosa. E' stata calcolata principalmente utilizzando il programma CHETAH dell'ASTM (ver. 7.3, 2001) o, in alternativa, consultando la banca dati NIST (Chemistry Webbook, <http://webbook.nist.gov/>, 2006)

⁵ E' l'entalpia massima di decomposizione, ovvero la massima energia che può essere rilasciata dalla molecola in esame per effetto della decomposizione. E' stata calcolata utilizzando il programma CHETAH dell'ASTM

⁶ Viene riportato un set di dati per ogni trasformazione, endotermica o esotermica osservata; il segno negativo sul valore del DH indica un effetto esotermico, il segno positivo è distintivo degli effetti endotermici.

Temperatura di fine effetto (°C)

DH (kJ/g)

A4 Dati ARC

Temperatura di inizio dell'effetto termico (°C)⁷

Pressione alla T di inizio effetto termico (bar)

SHR iniziale⁸ (°C/min)

Temperatura alla SHR massima (°C)

Temperatura finale strumentale (°C)⁹

Pressione alla T fin.dell'effetto termico (bar)

DT adiabatico strumentale (°C)¹⁰

DT adiabatico corretto per Φ (°C)¹¹

Temperatura finale corretta per Φ (°C)

DH (kJ/g)

A5 Dati C80

Temperatura di inizio dell'effetto termico (°C)¹²

Temperatura di onset (°C)

Pressione di onset (bar)¹³

Temperatura di picco (°C)

Pressione di picco (bar)

Temperatura finale (°C)

Pressione finale (bar)

DH (kJ/g)

A6 Dati TG

Temperatura di inizio dell'effetto termico (°C)

Dm (%)¹⁴

⁷ E' la temperatura alla quale il SHR supera il limite di rilevazione di 0,02 °C/min

⁸ E' la velocità di autoriscaldamento all'inizio dell'effetto esotermico rilevato

⁹ E' la temperatura alla quale il SHR discende al di sotto del limite di rilevazione di 0,02 °C/min

¹⁰ E' l'incremento di temperatura adiabatico associato all'effetto termico rilevato, non corretto per il fattore di inerzia termica Φ

¹¹ E' l'incremento di temperatura adiabatico associato all'effetto termico rilevato, corretto per il fattore di inerzia termica Φ

¹² Viene riportato un set di dati per ogni trasformazione, endotermica o esotermica osservata; il segno negativo sul valore del Dm indica una perdita di peso del campione (ad es. una decomposizione), il segno positivo un aumento di peso (ad es. una ossidazione).

¹³ E' la pressione in corrispondenza della temperatura di onset

Temperatura finale (°C)

A7 Dati Pr. Decomp.

Prodotti di Decomposizione¹⁵

Tipo di prova

Metodo

Atmosfera

¹⁴ E' la variazione di massa corrispondente all'effetto termico osservato. Viene riportato un set di dati per ogni trasformazione, il segno negativo sul valore del DH indica un effetto esotermico, il segno positivo e distintivo degli effetti endotermici

¹⁵ Vengono elencati i prodotti di decomposizione individuati

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
acido 2-nitrocinnammico	612-41-9	nitroderivati	C ₉ H ₇ NO ₄	193,17	99	s.	-250,2	-3,6	256				-3,09
acido 2-nitrofenil acetico	3740-52-1	nitroderivati	C ₈ H ₇ NO ₄	181,16	98	s.	-335,97	-3,35	218				-0,96
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo	02/07/6358	nitroderivati	C ₆ H ₅ ClN ₂ O ₃	188,58	96	s.	-133,89	-3,39					
2-ammino-4-nitroanisolo	99-59-2	nitroderivati	C ₇ H ₈ N ₂ O ₄	184,17	99	s.	-84,93	-4,02	260				-2,22
2-ammino-4-nitrofenolo	99-57-0	nitroderivati	C ₆ H ₅ N ₂ O ₄	169,13	99	s.	-104,6	-4,02	152				-0,84
4-cloro-2-nitroanilina	89-63-4	nitroderivati	C ₆ H ₅ ClN ₂ O ₂	172,58	99	s.	44,77	-3,56					
4-cloro nitrobenzene	100-00-5	nitroderivati	C ₆ H ₄ ClNO ₂	157,56	98	s.	37,24	-3,76					
2-cloro-5-nitropiridina	4548-45-2	nitroderivati	C ₅ H ₃ ClN ₂ O ₂	158,55	99	s.	-8,37	-3,3					
2,4-dicloro-6-nitroanilina	2683-43-4	nitroderivati	C ₆ H ₄ Cl ₂ NO ₂	193,01	98	s.	15,06	-3,1					
3,4-dicloronitrobenzene	99-54-7	nitroderivati	C ₆ H ₃ Cl ₂ NO ₂	192	98	s.	8,79	-3,18					
2,4-difluoronitrobenzene	446-35-5	nitroderivati	C ₆ H ₃ F ₂ NO ₂	159,1	99	l.	-310,87	-4,06					
4-fluoro-2-nitrotoluene	446-10-6	nitroderivati	C ₇ H ₆ FNO ₂	155,14	98	l.	-153,13	-4,02					
8-idrossi-5-nitrochinolina	4008-48-4	nitroderivati	C ₉ H ₆ N ₂ O ₃	190,17	99	s.	-41	-3,72	247				-1,55
3-metil-4-nitrofenolo	2581-34-2	nitroderivati	C ₇ H ₇ NO ₃	153,15	99	s.	-143,09	-3,93					
2-metossi-5-nitropiridina	5446-92-4	nitroderivati	C ₆ H ₆ N ₂ O ₃	154,14	99	s.	-128,44	-3,89					
3-nitroacetanilide	122-28-1	nitroderivati	C ₈ H ₈ NO ₃	166,17	99	s.	-126,77	-3,51					
3-nitroacetofenone	121-89-1	nitroderivati	C ₈ H ₇ NO ₃	165,16	98	s.	-99,16	-3,89	283				-1,84
2-nitroanilina	88-74-4	nitroderivati	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂	138,14	99	s.	63,6	-4,22	280	340	360	400	-0,305
2-nitroanisolo	91-23-6	nitroderivati	C ₇ H ₇ NO ₃	153,15	98	l.	-84,51	-4,3					
4-nitrobenzammide	619-80-7	nitroderivati	C ₇ H ₆ N ₂ O ₃	166,15	99	s.	-61,92	-3,97	<300				
nitrobenzene	98-95-3	nitroderivati	C ₆ H ₅ NO ₂	123,12	99	l.	67,36	-4,64	<300				-1,76

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-nitrobenzoiocloruro	122-04-3	nitroderivati	C ₇ H ₄ ClNO ₃	185,57	99	s.	-119,24	-3,39	70				0,121
4-nitrobenzotrifluoruro	402-54-0	nitroderivati	C ₇ H ₄ F ₃ NO ₂	191,12	99	s.	-604,17	-3,26					
3-nitrobenzotrifluoruro	98-46-4	nitroderivati	C ₇ H ₄ F ₃ NO ₂	191,12	98	l.	-604,17	-3,26					
6-nitrochinolina	613-50-3	nitroderivati	C ₉ H ₆ N ₂ O ₂	174,17	99	s.	-199,58	-4,14					
4-nitro-3-cresolo	2581-34-2	nitroderivati	C ₇ H ₇ NO ₃	153,15	98	s.	-151,04	-3,89	234				-2,26
2-nitrofenolo	88-75-5	nitroderivati	C ₆ H ₅ NO ₃	139,12	98	s.	-96,23	-4,35					
2-nitrotoluene	88-72-2	nitroderivati	C ₇ H ₇ NO ₂	137,15	99	l.	45,6	-4,27					
3-nitro-o-toluidina	603-83-8	nitroderivati	C ₇ H ₈ N ₂ O ₂	152,17	98	s.	41,42	-3,93	280				-1,00
5-nitrovanillina	6635-20-7	nitroderivati	C ₈ H ₇ NO ₅	197,16	99	s.	-374,05	-3,89	184				-2,30
2,3,4-tricloronitrobenzene	17700-09-3	nitroderivati	C ₆ H ₄ Cl ₃ NO ₂	228,46	97	s.	-20,08	-2,59					
perossido di benzoile	94-36-0	perossidi	C ₁₄ H ₁₀ O ₄	242,24	70	s.	-271,12	-3,01					
idroperossido di tertbutile	75-91-2	perossidi	C ₄ H ₁₀ O ₂	90,14	70	l.	-246,01	-3,89	85				-1,05
idroperossido di cumene	80-15-9	perossidi	C ₉ H ₁₂ O ₂	152,21	70	l.	-78,66	-3,64	124				-1,88
perossido di tertbutile	110-05-4	perossidi	C ₈ H ₁₈ O ₂	146,26	70	l.	-348,94	-2,72					
cinnamitrile	4360-47-8	nitrile	C ₉ H ₇ N	129,17	98	l.	277,8	-3,18	--				--
cloro acetonitrile	107-14-2	nitrile	C ₂ H ₂ ClN	75,5	98	l.	87,86	-2,63	--				--
2-cloro-6-metilbenzotrifluoruro	6575-09-3	nitrile	C ₈ H ₆ ClN	151,6	98	s.	151,5	-2,21	--				--
3-cloro propionitrile	542-76-7	nitrile	C ₃ H ₄ ClN	89,53	98	l.	-28,87	-1,97	--				--
crotononitrile	4786-20-3	nitrile	C ₄ H ₅ N	67,1			150,6	-3,64	--				--
3,5-diclorobenzonitrile	6575-00-4	nitrile	C ₇ H ₃ Cl ₂ N	172,01	98	s.	159,4	-2,09	--				--
2,6-difluorobenzonitrile	1897-52-5	nitrile	C ₇ H ₃ F ₂ N	139,11	97	s.	166,1	-5,23	--				--
3-(dimetilammino)propionitrile	1738-25-6	nitrile	C ₅ H ₁₀ N ₂	98,17	98	l.	83,26	-2,76	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
3,4-dinitrobenzotrile	4248-33-3	nitrile	C ₇ H ₃ N ₃ O ₄	193,13	97		184,1	-5,39					
fumaronitrile	764-42-1	nitrile	C ₄ H ₂ N ₂	78,08		s.	340,1	-4,85					
glutaronitrile	544-13-8	nitrile	C ₅ H ₆ N ₂	94,13		l.	171,1	-3,01	200				-0,92
isofaltonitrile	626-17-5	nitrile	C ₆ H ₄ N ₂	128,14		s.	364	-3,43	--				--
malononitrile	109-77-3	nitrile	C ₃ H ₂ N ₂	66,07	99	s.	249,8	-4,35					
4-nitrobenzotrile	619-72-7	nitrile	C ₇ H ₄ N ₂ O ₂	148,13	97	s.	197,9	-4,6					
acido acetone dicarbossilico	542-05-2	acidi	C ₅ H ₆ O ₅	146,11	97	s.	-974,45	-1,00	--				--
acido adipico	124-04-9	acidi	C ₆ H ₁₀ O ₄	146,16	99	s.	-864,83	-0,96	--				--
acido cicloesano carbossilico	98-89-5	acidi	C ₇ H ₁₂ O ₂	128,19	97	s.	-499,99	-1,29	--				--
acido cinnamico	621-82-9	acidi	C ₉ H ₈ O ₂	148,17		s.	-225,93	-2,26	--				--
acido 2-clorobenzoico	118-91-2	acidi	C ₇ H ₅ ClO ₂	156,57	98	s.	-319,23	-1,63	--				--
acido 2-cloro-3,5-dinitrobenzoico	2497-91-8	acidi	C ₇ H ₃ ClN ₂ O ₆	246,57	98	s.	-354,8	-3,89	116				-4,14
acido 2,4-dimetossibenzoico	91-52-1	acidi	C ₉ H ₁₀ O ₄	182,19	98	s.	-611,7	-2,17	--				--
acido 2,4-dinitrobenzoico	610-30-0	acidi	C ₇ H ₄ N ₂ O ₆	212,13	98	s.	-325,93	-4,43					
acido 4-idrossifenilpiruvico	156-39-8	acidi	C ₉ H ₈ O ₄	180,17		s.	-594,13	-2,09	--				--
acido 3-idrossi-4-metossicinnamico	537-73-5	acidi	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	194,2	98	s.	-567,35	-2,26	--				--
acido isoftalico	121-91-5	acidi	C ₈ H ₆ O ₄	166,14	99	s.	-696,21	-1,38	--				--
acido 4 (metiltio)benzoico	13205-48-6	acidi	C ₈ H ₈ O ₂ S	168,22			-282,84	-1,63	--				--
alcol allilico	107-18-6	alcoli	C ₃ H ₆ O	58,09	99	l.	-131,8	-3,18					
alcol 2(2-amminoetossi)etilico	929-06-6	alcoli	C ₄ H ₁₁ NO ₂	105,16		l.	-364,43	-2,38	--				--
alcol 2-(2-cloroetossi)etilico	628-89-7	alcoli	C ₄ H ₉ ClO ₂	124,58	99		-422,16	-1,84	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
alcol 2,3-epossipropilico	556-52-5	alcoli	C ₃ H ₆ O ₂	74,09	99	l.	-239,74	-3,72					
alcol tetraidrofurfurilico	97-99-4	alcoli	C ₅ H ₁₀ O ₂	102,15	98	l.	-369,02	-2,21	--				--
alcol 2,4,6-trimetilbenzilico	4170-90-5	alcoli	C ₁₀ H ₁₄ O	150,24	99	s.	-195,81	-1,8	--				--
acrilaldeide	107-02-8	aldeidi	C ₃ H ₄ O	56,07	99	l.	-80,75	-3,55					
aldeide cinnammica	104-55-2	aldeidi	C ₉ H ₈ O	132,17	98	l.	20,5	-2,84					
benzaldeide	100-52-7	aldeidi	C ₇ H ₆ O	106,13	98	l.	-36,81	-2,63	255				
3,4-dimetossibenzaldeide	120-14-9	aldeidi	C ₉ H ₁₀ O ₃	166,19	99	s.	-165,27	-2,84					
a-esilcinnamalaldeide	101-86-0	aldeidi	C ₁₅ H ₂₀ O	216,35	98	s.	-113,8	-2,13	--				--
2-etilbutirraldeide	97-96-1	aldeidi	C ₈ H ₁₂ O	100,18	94	l.	-255,22	-1,71	--				--
3-fenilpropionaldeide	104-53-0	aldeidi	C ₉ H ₁₀ O	134,19	90	l.	-71,54	-2,38	--				--
propionaldeide	123-38-6	aldeidi	C ₃ H ₆ O	58,09	97	l.	-192,04	-2,13	--				--
acido 2-clorobenzoico	118-91-2	alogenoderivati	C ₇ H ₅ ClO ₂	156,57	98	s.	-319,24	-1,63	--				--
2-ammino-4-clorofenolo	95-85-2	alogenoderivati	C ₆ H ₆ ClNO	143,58	97	s.	-118,82	-1,88	--				--
o-bromoanilina	615-36-1	alogenoderivati	C ₆ H ₆ BrN	172,03	98	s.	109,6	-1,46	--				--
m-bromoanilina	591-19-5	alogenoderivati	C ₆ H ₆ BrN	172,03	98	l.	109,6	-1,46	--				--
p-bromoanilina	106-40-1	alogenoderivati	C ₆ H ₆ BrN	172,03	97	s.	109,6	-1,46	--				--
4-bromobenzofenone	90-90-4	alogenoderivati	C ₁₃ H ₉ BrO	261,12	98	s.	83,68	-1,8	--				--
1-bromo-4-clorobutano	6940-78-9	alogenoderivati	C ₄ H ₈ BrCl	171,47	98	l.	-128,87	-0,67	--				--
1-bromo-3-cloropropano	109-70-6	alogenoderivati	C ₃ H ₆ BrCl	157,44	99	l.	-108,36	-0,58	--				--
2-bromo-4,6-dinitroanilina	1817-73-8	alogenoderivati	C ₆ H ₄ BrN ₃ O ₄	262,03	94	s.	78,65	-3,68					

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
3-cloroanilina	108-42-9	alogenoderivati	C ₆ H ₆ ClN	127,58		l.	57,32	-1,92	--				--
2-clorobenzil cloruro	611-19-8	alogenoderivati	C ₇ H ₆ Cl ₂	161,03	98	l.	-8,37	-1,55	--				--
2-clorobenzoil cloruro	609-65-4	alogenoderivati	C ₇ H ₄ Cl ₂ O	175,01		l.	-39,33	-1,42	--				--
2-clorobenzotricloruro	2136-89-2	alogenoderivati	C ₇ H ₄ Cl ₄	229,91		s.	-39,32	-1,42	--				--
1-cloro-3,4-dinitrobenzene	610-40-2	alogenoderivati	C ₆ H ₃ ClN ₂ O ₄	202,56			23,85	-4,64					
2-cloro-6-fluorobenzaldeide	387-45-1	alogenoderivati	C ₇ H ₄ ClFO	158,56		s.	-257,32	-2,17					
2-cloro-6-fluorotoluene	443-83-4	alogenoderivati	C ₇ H ₆ ClF	144,58	98		-170,71	-2,3	--				--
cloruro di benzile	100-44-7	alogenoderivati	C ₇ H ₇ Cl	126,59	97	l.	18,83	-1,76	--				--
2,4-dibromoanilina	615-57-6	alogenoderivati	C ₆ H ₅ Br ₂ N	250,92	98	l.	132,2	-1,04	--				--
3,5-dibromosalicilaldeide	90-59-5	alogenoderivati	C ₇ H ₄ Br ₂ O ₂	279,91	98	l.	-168,19	-1,21	--				--
1,3-diclorobenzene	541-73-1	alogenoderivati	C ₆ H ₄ Cl ₂	147	98	l.	30,12	-1,71	--				--
2,4-diclorobenzilcloruro	94-99-5	alogenoderivati	C ₇ H ₅ Cl ₃	195,47	98	l.	-31,38	-1,46	--				--
2,4-diclorobenzotricloruro	13014-18-1	alogenoderivati	C ₇ H ₃ Cl ₅	264,35		s.	-59,83	-1	--				--
2,6-dicloro-3-metilanilina	64063-37-2	alogenoderivati	C ₇ H ₇ Cl ₂ N	176,05		s.	-2,93	-1,55	--				--
2,6-dicloropirazina	4774-14-5	alogenoderivati	C ₄ H ₂ Cl ₂ N ₂	148,98		s.	135,6	-2,13					
difenil bromometano	776-74-9	alogenoderivati	C ₁₃ H ₁₁ Br	247,14	95	s.	169,9	-1,59	--				--
2'-fluoroacetofenone	445-27-2	alogenoderivati	C ₈ H ₇ FO	138,15	97		-280,32	-2,21	--				--
3-fluorobenzaldeide	456-48-4	alogenoderivati	C ₇ H ₅ FO	124,12	97		-280,33	-2,59	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-fluorobenzil cloruro	352-11-4	alogenoderivati	C ₇ H ₆ ClF	144,58	99	l.	-174,05	-1,84	--				--
2,4,6-tribromoanilina	147-82-0	alogenoderivati	C ₆ H ₄ Br ₃ N	329,81	98	s.	154,8	-0,84	--				--
epicloridrina	106-89-8	epossidi	C ₃ H ₅ ClO	92,53	99	l.	-107,94	-2,84					
1,2-epossibutano	106-88-7	epossidi	C ₄ H ₈ O	72,12		l.	-110,04	-3,39					
ossido di cicloesene	286-20-4	epossidi	C ₆ H ₁₀ O	98,16		l.	-125,52	-2,72	--				--
ossido di etilene	75-21-8	epossidi	C ₂ H ₄ O	44,06		l.	-52,72	-5,15					
ossido di mesitile	141-79-7	epossidi	C ₆ H ₁₀ O	98,16		l.	-195,39	-2,00	--				--
ossido di propilene	75-56-9	epossidi	C ₃ H ₆ O	58,09		l.	-92,47	-3,85					
ossido di stirene	96-09-3	epossidi	C ₈ H ₈ O	120,16		l.	39,75	-3,26					
butilbenzene	104-51-8	idrocarburi	C ₁₀ H ₁₄	134,24		l.	-13,81	-1,84	--				--
difenilmetano	101-81-5	idrocarburi	C ₁₃ H ₁₂	168,25		l.	138,1	-2,17	--				--
etilbenzene	100-41-4	idrocarburi	C ₈ H ₁₀	106,18	99	l.	29,71	-2,05	--				--
iso ottano	540-84-1	idrocarburi	C ₈ H ₁₈	114,26	99	l.	-208,36	-1,13	--				--
1-fenil eptano	1078-71-3	idrocarburi	C ₁₃ H ₂₀	176,33	98		-75,73	-1,67	--				--
allil ammina	107-11-9	ammine	C ₃ H ₇ N	57,11	98	l.	28,87	-2,8	--				--
N-amminoesametenilammina	5906-35-4	ammine	C ₆ H ₁₄ N ₂	114,22			-79,91	-1,59	--				--
2(2-ammino etossi) etanolo	929-06-6	ammine	C ₄ H ₁₁ NO ₂	105,16		l.	-364,42	-2,38	--				--
4-ammino fenolo	123-30-8	ammine	C ₆ H ₇ NO	109,14	98	s.	-89,11	-2,26	--				--
3-ammino-5-metilisossazolo	1072-67-9	ammine	C ₄ H ₆ N ₂ O	98,12	98	s.	20,92	-3,43					
2-ammino-2-metil-1-propanolo	124-68-5	ammine	C ₄ H ₁₁ NO	89,16	98	l.	-271,12	-1,55	--				--
anilina	62-53-3	ammine	C ₆ H ₇ N	93,14	99	l.	87,02	-1,8	--				--
benzilammina	100-46-9	ammine	C ₇ H ₉ N	107,17	98	l.	62,34	-2,13	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
cicloesilammina	108-91-8	ammine	C ₆ H ₁₃ N	99,2	98	l.	-105,01	-1,38	--				--
2,2'-diamminodibenzile		ammine	C ₁₄ H ₁₆ N ₂	212,32			187,9	-2,26	--				--
3,4-diamminotoluene	496-72-0	ammine	C ₇ H ₁₀ N ₂	122,19		s.	57,73	-2	--				--
N,N-dibutilanilina	613-29-6	ammine	C ₁₄ H ₂₃ N	205,38			-46,02	-1,88	--				--
1,2-difenil etilammina	25611-78-3	ammine	C ₁₄ H ₁₅ N	197,3			162,3	-2,26	--				--
N,N-dimetilanilina	121-69-7	ammine	C ₈ H ₁₁ N	121,2	99	l.	84,1	-2,38	--				--
N,N-dimetil-p-toluidina	99-97-8	ammine	C ₉ H ₁₃ N	135,23	99		66,94	-2,3	--				--
N-etil-N-metil-anilina	613-97-8	ammine	C ₉ H ₁₃ N	135,23			12,55	-2,26	--				--
N-etil-o-toluidina	94-68-8	ammine	C ₉ H ₁₃ N	135,23			25,94	-2	--				--
furfurilammina	617-89-0	ammine	C ₅ H ₇ NO	97,13		l.	-33,89	-3,1					
N-metil-anilina	100-61-8	ammine	C ₇ H ₉ N	107,17	99	l.	85,35	-2,38	--				--
2-metossianilina	90-04-0	ammine	C ₇ H ₉ NO	123,17	99	l.	58,58	-2,55	--				--
3-metossibenzilammina	5071-96-5	ammine	C ₈ H ₁₁ NO	137,2			-71,55	-2,47	--				--
2-metossietilammina	109-85-3	ammine	C ₃ H ₉ NO	75,13		l.	-184,1	-2,51	--				--
propilammina	107-10-8	ammine	C ₃ H ₉ N	59,13	98	l.	-72,38	-1,63	--				--
tribenzilammina	620-40-6	ammine	C ₂₁ H ₂₁ N	287,43		s.	305,4	-2,43	--				--
acetato di allile	591-87-7	esteri	C ₉ H ₈ O ₂	100,13		l.	-333,88	-2,26	--				--
acetoacetato di metile	105-45-3	esteri	C ₈ H ₈ O ₃	116,13	99	l.	-691,61	-1,51	--				--
benzoato di etile	93-89-0	esteri	C ₉ H ₁₀ O ₂	150,19	99	l.	-284,09	-2,09	--				--
benzoato di propile	2315-68-6	esteri	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	164,22		l.	-333,46	-1,84	--				--
cianoacetato di metile	105-34-0	esteri	C ₄ H ₅ NO ₂	99,1	99	l.	-236,81	-2,68					
cinnammato di metile	103-26-4	esteri	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	162,2	99	s.	-214,64	-2,34	--				--
etil-2-cloroacetato	609-15-4	esteri	C ₆ H ₉ ClO ₃	164,6	97		-635,97	-1,3	--				--
2-etilesil tioglicolato	7659-86-1	esteri	C ₁₀ H ₂₀ O ₂ S	172,3			-533,88	-1,21	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
formiato di etile	109-94-4	esteri	C ₃ H ₆ O ₂	74,09	97	l.	-371,12	-2	--				--
acetammide	60-35-5	ammidi	C ₂ H ₅ NO	59,08	98	s.	-238,07	-1	--				--
acetanilide	103-84-4	ammidi	C ₈ H ₉ NO	135,18	98	s.	-128,44	-1,8	--				--
acetoacetanilide	102-01-2	ammidi	C ₁₀ H ₁₁ NO ₂	177,22	98	s.	-274,05	-1,92	--				--
2-acetoacetanisidide	92-15-9	ammidi	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃	207,25	98	s.	-430,53	-2,05	--				--
2-acetoacetotoluidide	93-68-5	ammidi	C ₁₁ H ₁₃ NO ₂	191,25	98	s.	-307,52	-1,8	--				--
4-acetofenetidide	62-44-2	ammidi	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179,24	97	s.	-301,25	-1,97	--				--
4-acetotoluidide	103-89-9	ammidi	C ₉ H ₁₁ NO	133,21	98	s.	-144,35	-1,8	--				--
diacetammide	625-77-4	ammidi	C ₄ H ₇ NO ₂	101,12	98	s.	-436,81	-1	--				--
N,N-dimetilacetammide	127-19-5	ammidi	C ₄ H ₉ NO	87,14	99	l.	-225,1	-1,71	--				--
N,N-dimetilformammide	68-12-2	ammidi	C ₃ H ₇ NO	73,11	99	l.	-191,62	-1,8	--				--
propionammide	79-05-0	ammidi	C ₃ H ₇ NO	73,11	99	s.	-264,01	-0,96	--				--
succinammide	110-14-5	ammidi	C ₄ H ₈ N ₂ O ₂	116,14	97	s.	-442,25	-0,98	--				--
acetofenone	98-86-2	chetoni	C ₈ H ₈ O	120,16	99	l.	-87,03	-2,22	--				--
ciclopentanone	120-92-3	chetoni	C ₅ H ₈ O	84,13	99	l.	-194,14	-1,88	--				--
dietilamminoacetone	1620-14-0	chetoni	C ₇ H ₁₅ NO	129,23			-222,59	-2,05	--				--
2',4'-diidrossiacetofenone	89-84-9	chetoni	C ₈ H ₈ O ₃	152,16	98	s.	-439,32	-2,13	--				--
2',4'-dimetossiacetofenone	829-20-9	chetoni	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	180,22	98		-399,99	-2,43	--				--
3,4-dimetossifenilacetone	776-99-8	chetoni	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	194,25	98		-417,14	-2,34	--				--
3-esanone	589-38-8	chetoni	C ₆ H ₁₂ O	100,18	99		-279,9	-1,5	--				--
2'-idrossiacetofenone	118-93-4	chetoni	C ₈ H ₈ O ₂	136,16	98	l.	-263,59	-2,17	--				--
2-idrossi-4-ottilossibenzofenone	1843-05-6	chetoni	C ₂₁ H ₂₆ O ₃	326,47			-252,71	-2,05	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
2-metil-1,3-ciclopentandione	765-69-5	chetoni	C ₆ H ₈ O ₂	112,14	98	l.	-337,65	-1,97	--				--
2-metossiacetofenone	579-74-8	chetoni	C ₉ H ₁₀ O ₂	150,19	99		-218,4	-2,51	--				--
4-tert-butilcicloesano	98-53-3	chetoni	C ₁₀ H ₁₈ O	154,28	98	s.	-327,19	-1,38	--				--
1,3-cicloesandione	504-02-9	chetoni	C ₆ H ₈ O ₂	112,14	97	s.	-330,54	-2,05	--				--
4-acetilpiridina	1122-54-9	eterocicli	C ₇ H ₇ NO	121,15	98	l.	-31,38	-2,51	--				--
2-ammino-4-metilpirimidina	108-52-1	eterocicli	C ₅ H ₇ N ₃	109,15	98	s.	164	-2,72	--				--
3-amminopiridina	462-08-8	eterocicli	C ₅ H ₆ N ₂	94,13	99	s.	142,2	-2,72	--				--
aziridina	151-56-4	eterocicli	C ₂ H ₅ N	43,08		l.	126,3	-5,1	--				--
3-benzoilpiridina	5424-19-1	eterocicli	C ₁₂ H ₉ NO	183,22	97	s.	163,2	-2,93	--				--
chinaldina	91-63-4	eterocicli	C ₁₀ H ₉ N	143,2	98	l.	176,9	-2,43	--				--
chinolina	91-22-5	eterocicli	C ₉ H ₇ N	129,17	96	l.	222,2	-2,72	--				--
1-cianoacetilpiperidina	15029-30-8	eterocicli	C ₈ H ₁₂ N ₂ O	152,22	98	s.	-130,12	-1,97	--				--
2-cianopiridina	100-70-9	eterocicli	C ₆ H ₄ N ₂	104,12	99	s.	274,9	-3,35	--				--
3-cianopiridina	100-54-9	eterocicli	C ₆ H ₄ N ₂	104,12	98	s.	276,1	-3,39	--				--
2-cloro-6-metossipiridina	17228-64-7	eterocicli	C ₆ H ₆ ClNO	143,58			-47,28	-2,38	--				--
2,5-diidrofurano	1708-29-8	eterocicli	C ₄ H ₆ O	70,1	97	l.	-66,94	-3,56	--				--
2,6-dimetilpiridina	108-48-5	eterocicli	C ₇ H ₉ N	107,17	98	l.	58,58	-2,13	--				--
fenil-4-piridil chetone	14548-46-0	eterocicli	C ₁₂ H ₉ NO	183,22	98	s.	166,5	-2,93	--				--
2-idrazinopiridina	4930-98-7	eterocicli	C ₅ H ₇ N ₃	109,15			263,2	-3,6	--				--
4-idrossimetilpiridina	586-95-8	eterocicli	C ₆ H ₇ NO	109,14	99	s.	-50,63	-2,59	--				--
3-idrossipiridina	109-00-2	eterocicli	C ₅ H ₅ NO	95,11	98	s.	-46,02	-2,63	--				--
imidazolo	288-32-4	eterocicli	C ₃ H ₄ N ₂	68,09	99	s.	146,4	-3,26	--				--
isossazolo	288-14-2	eterocicli	C ₃ H ₃ NO	69,07			76,15	-4,89	--				--

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
2-metilpiridina	109-06-8	eterocicli	C ₆ H ₇ N	93,14		l.	98,74	-2,47	--				--
1-metil-2-piridone	694-85-9	eterocicli	C ₆ H ₇ NO	109,14		s.	-83,68	-2,3	--				--
N-metil pirrolidone	872-50-4	eterocicli	C ₅ H ₉ NO	99,15		l.	-195,39	-1,8	--				--
piperidina	110-89-4	eterocicli	C ₅ H ₁₁ N	85,17		l.	-48,95	-1,84	--				--
pirazina	290-37-9	eterocicli	C ₄ H ₄ N ₂	80,1		s.	196,2	-3,39	--				--
pirazolo	288-13-1	eterocicli	C ₃ H ₄ N ₂	68,09		s.	181,2	-3,76	--				--
piridazina	289-80-5	eterocicli	C ₄ H ₄ N ₂	80,1		l.	278,2	-4,39	--				--
piridina	110-86-1	eterocicli	C ₅ H ₅ N	79,11		l.	140,2	-2,97	--				--
tetraidropirano	142-68-7	eterocicli	C ₅ H ₁₀ O	86,15		l.	-223,84	-1,97	--				--
tetrazolo	288-94-8	eterocicli	CH ₂ N ₄	58,06		s.	334,3	-5,31	--				--
tiofene	110-02-1	eterocicli	C ₄ H ₄ S	84,14		l.	115,9	-2,26	--				--
1,2,4-triazolo	288-88-0	eterocicli	C ₂ H ₃ N ₃	69,08		s.	192,5	-3,59	--				--
2,4,5-triidrossipirimidina	20636-41-3	eterocicli	C ₄ H ₄ N ₂ O ₃	128,1			-334,72	-2,72	--				--
atrazina	1912-24-9	eterocicli	C ₈ H ₁₄ CIN ₅	215,7		s.			160	175	177	200	0,22
simazina	122-34-9	eterocicli	C ₇ H ₁₂ CIN ₅	201,7		s.			214	228	230	239	0,298
propazina	139-40-2	eterocicli	C ₉ H ₁₆ CIN ₅	229,7		s.			193	215	217	230	0,242
terbutilazina	5915-41-3	eterocicli	C ₉ H ₁₆ CIN ₅	229,7		s.			155	173	173	191	0,205
ametrina	834-12-8	eterocicli	C ₉ H ₁₇ N ₅ S	227,3		s.			68	85	88	106	0,123
simetrina	1014-70-6	eterocicli	C ₈ H ₁₅ N ₅ S	213,3		s.							
prometrina	7287-19-6	eterocicli	C ₁₀ H ₁₉ N ₅ S	241,4		s.			107	118	121	137	0,145
chloridazon	1698-60-8	eterocicli	C ₁₀ H ₈ CIN ₃ O	221,6		s.			92	113	125	137	0,018
benalaxyl	71626-11-4	ammidi	C ₂₀ H ₂₃ NO ₃	325		s.							
tetraconazolo	112281-77-3	eterocicli	C ₁₃ H ₁₁ Cl ₂ F ₄ N ₃ O	371,8					117	126	128	143	0,078

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
acido acetoidrossammico	546-88-3	ammidi	C ₂ H ₅ NO ₂	70,1		s.			125		192	200	-1,243
metossiammina cloridrato	593-56-6	ammine	CH ₆ CINO	83,5		s.			110		133	150	-1,162
idrossilammina cloridrato	5470-11-1	ammine	CIH4NO	69,5		s.			170			245	
idrossilammina solfato	10039-54-0	ammine	H ₈ N ₂ O ₆ S	164,1		s.			190		205	260	
idrossilammina soluzione 50% in acqua	7803-49-8	ammine	H ₃ NO	33		s.			110		185	230	
idrossilammina fosfato	20845-01-6	ammine	H ₁₂ N ₃ O ₇ P	197,1		s.			150		155	180	-1,796
1-azide-3-metil benzene	4113-72-8	azidi	C ₇ H ₇ N ₃	133,1		l.	0,353	-3,63	135		200	230	-1,244
1-azide-4-metil benzene	2101-86-2	azidi	C ₇ H ₇ N ₃	133,1		l.	0,353	-3,63	120		200	230	-1,330
4-toluensulfonil azide	941-55-9	azidi	C ₇ H ₇ N ₃ O ₂ S	197,2		l.	0,317	-4,49	120		185	240	-1,640
idrossiurea	127-07-1	ammidi	CH ₄ N ₂ O ₂	76,0		s.			125		145	165	-2,139
metansolfonil cloruro	124-63-0	alogenoderivati	CH ₃ ClO ₂ S	114,5		l.			240	245	258	273	0,012
4-cloro-3-nitrobenzil alcol	55912-20-4	nitroderivati	C ₇ H ₆ ClNO ₃	187,6		s.			50	64	65	81	0,125
4-cloro-2-nitrobenzil alcol	22996-18-5	nitroderivati	C ₇ H ₆ ClNO ₃	187,6		s.							
2-cloro-5-nitrobenzil alcol	80866-80-4	nitroderivati	C ₇ H ₆ ClNO ₃	187,6		s.							
5-cloro-2-nitrobenzil alcol	73033-58-6	nitroderivati	C ₇ H ₆ ClNO ₄	187,6		s.							
2-cloro-6-nitrobenzaldeide	6361-22-4	nitroderivati	C ₇ H ₄ ClNO ₃	185,6		s.							
5-cloro-2-nitrobenzaldeide	6628-86-0	nitroderivati	C ₇ H ₄ ClNO ₃	185,6		s.							
4-cloro-3-nitrobenzaldeide	16588-34-4	nitroderivati	C ₇ H ₄ ClNO ₃	185,6		s.							

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-nitrobenzilalcol	619-73-8	nitroderivati	C7H7NO3	153,1		s.							
o-nitrobenzilalcol	612-25-9	nitroderivati	C7H7NO3	153,1		s.							
4-nitrobenzaldeide	555-16-8	nitroderivati	C ₇ H ₅ NO ₃	115,1		s.							
o-nitrobenzaldeide	552-89-6	nitroderivati	C7H5NO3	115,1		s.							
3,5-dinitrobenzilalcol	71022-43-0	nitroderivati	C7H6N2O5	198,1		s.							
4-idrossi-3-nitrobenzaldeide	3011-34-5	nitroderivati	C7H5NO4	167,1		s.							
5-idrossi-2-nitrobenzaldeide	42454-06-8	nitroderivati	C7H5NO4	167,1		s.							
3-idrossi-4-nitrobenzaldeide	704-13-2	nitroderivati	C7H5NO4	167,1		s.							
3-metossi-2-nitrobenzaldeide	53055-05-3	nitroderivati	C7H7NO4	181,1		s.							
tetraciano etilene	670-54-2	nitrili	C6N4	128,09		s.							
1,2,3,4-tetraciano benzene	712-74-3	nitrili	C10H2N4	178,1		s.							
3,5-dimetiliossazolo	300-87-8	ammine	C5H7NO	97,1		s.							
3-amminoisossazolo	36216-80-5	ammine	C3H4N2O	84,1		s.							
4-ammino-3-isossazolidone	68-41-7	ammine	C3H6N2O2	102,1		s.							
3-fenil-5-isossazolone	1076-59-1	eterocicli	C9H7NO2	161,1		s.							
difenilammina	122-39-4	ammine	C12H11N	169,5		s.							
2-idrossipiridina-N-ossido	13161-30-3	eterocicli	C5H5NO2	111,1		s.							
2,4,7-trinitro-9-fluorenone	129-79-3	nitroderivati	C13H5N3O7	315,2		s.							
3-nitro anidride ftalica	641-70-3	nitroderivati	C8H3NO5	193,1		s.							
adenosina	58-61-7	eterocicli	C10H13N5O4	267,2		s.							
1,4-diclorobenzene	106-46-7	alogenoderivati	C ₆ H ₄ Cl ₂	147,0		s.							

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DATI BASE						DATI TERMODINAMICI		DSC (primo effetto)				
	CAS number	gruppo	formula	peso molecolare(g/mol)	purezza	stato fisico	DHf (KJ/mol)	DHd totale (KJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
citidina	65-43-3	eterocicli	C9H16N3O5	243,2		s.							
isopropildenuridina	362-43-6	eterocicli	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₆	284,0		s.							
3-ammino-5-metilossazolo	1072-67-9	ammine	C4H6N2O	98,1		s.							
propilammina	107-10-8	ammine	C3H9N	59,1		l.							
3-nitro-1,8-naftalenedicarbossilica anidride	3027-38-1	nitroderivati	C12H5NO5	243,2		s.							
N-metil-idrossilammina cloridrato	4229-44-1	ammine	CH6ClNO	83,5		s.							
N,O-dimetil-idrossilammina cloridrato	6638-79-5	ammine	C2H8ClNO	97,5		s.							
2-cloro-5-nitrobenzaldeide	6361-21-3	nitroderivati	C ₇ H ₄ ClNO ₃	185,6		s.							
3-nitrobenzilalcol	619-25-0	nitroderivati	C ₇ H ₇ NO ₃	153,1		s.							

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
acido 2-nitrocinnammico										
acido 2-nitrofenil acetico										
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo										
2-ammino-4-nitroanisolo										
2-ammino-4-nitrofenolo										
4-cloro-2-nitroanilina										
4-cloro nitrobenzene										
2-cloro-5-nitropiridina										
2,4-dicloro-6-nitroanilina										
3,4-dicloronitrobenzene										
2,4-difluoronitrobenzene										
4-fluoro-2-nitrotoluene										
8-idrossi-5-nitrochinolina										
3-metil-4-nitrofenolo										
2-metossi-5-nitropiridina										
3-nitroacetanilide										
3-nitroacetofenone										
2-nitroanilina										
2-nitroanisolo										
4-nitrobenzammide										
nitrobenzene										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-nitrobenzoi cloruro	277				-0,8					
4-nitrobenzotrile										
4-nitrobenzotrifluoruro										
3-nitrobenzotrifluoruro										
6-nitrochinolina										
4-nitro-3-cresolo										
2-nitrofenolo										
2-nitrotoluene										
3-nitro-o-toluidina										
5-nitrovanillina										
2,3,4- tricloronitrobenzene										
perossido di benzoile										
idroperossido di tertbutile										
idroperossido di cumene										
perossido di tertbutile										
cinnamotrile										
cloro acetonitrile										
2-cloro-6-metil benzotrile										
3-cloro propionitrile										
crotononitrile										
3,5-diclorobenzotrile										
2,6-difluorobenzotrile										
3-(dimetilammino) propionitrile										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
3,4-dinitrobenzotrile fumarotrile glutarotrile isoftalotrile malonotrile 4-nitrobenzotrile acido aceton dicarbossilico acido adipico acido cicloesan carbossilico acido cinnammico acido 2-clorobenzoico acido2-cloro-3,5-dinitro benzoico acido 2,4-dimetossi benzoico acido 2,4-dinitrobenzoico acido 4-idrossifenil piruvico acido 3-idrossi-4-metossi cinnammico acido isoftalico acido 4 (metiltio) benzoico alcol allilico alcol 2(2-amminoetossi) etilico alcol 2-(2-cloroetossi) etilico										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
alcol 2,3-epossipropilico										
alcol tetraidrofurfurilico										
alcol 2,4,6- trimetilbenzilico										
acrilaldeide										
aldeide cinnammica										
benzaldeide										
3,4- dimetossibenzaldeide										
a-esilcinnamaldeide										
2-etilbutirraldeide										
3-fenilpropionaldeide										
propionaldeide										
acido 2-clorobenzoico										
2-ammino-4-clorofenolo										
o-bromoanilina										
m-bromoanilina										
p-bromoanilina										
4-bromobenzofenone										
1-bromo-4-clorobutano										
1-bromo-3-cloropropano										
2-bromo-4,6- dinitroanilina										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
3-cloroanilina										
2-clorobenzil cloruro										
2-clorobenzoil cloruro										
2-clorobenzotricloruro										
1-cloro-3,4- dinitrobenzene										
2-cloro-6- fluorobenzaldeide										
2-cloro-6-fluorotoluene										
cloruro di benzile										
2,4-dibromoanilina										
3,5-dibromosalicilaldeide										
1,3-diclorobenzene										
2,4-diclorobenzilcloruro										
2,4- diclorobenzotricloruro										
2,6-dicloro-3-metil-anilina										
2,6-dicloropirazina										
difenil bromometano										
2'-fluoroacetofenone										
3-fluorobenzaldeide										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-fluorobenzil cloruro										
2,4,6-tribromoanilina										
epicloridrina										
1,2-epossibutano										
ossido di cicloesene										
ossido di etilene										
ossido di mesitile										
ossido di propilene										
ossido di stirene										
butilbenzene										
difenilmetano										
etilbenzene										
iso ottano										
1-fenil eptano										
allil ammina										
N-amminoesametenilammina										
2(2-ammino etossi) etanolo										
4-ammino fenolo										
3-ammino-5-metilisossazolo										
2-ammino-2-metil-1-propanolo										
anilina										
benzilammina										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
cicloesilammina										
2,2'-diamminodibenzile										
3,4-diamminotoluene										
N,N-dibutilanilina										
1,2-difenil etilammina										
N,N-dimetilanilina										
N,N-dimetil-p-toluidina										
N-etil-N-metilanilina										
N-etil-o-toluidina										
furfurilammina										
N-metilanilina										
2-metossianilina										
3-metossibenzilammina										
2-metossietilammina										
propilammina										
tribenzilammina										
acetato di allile										
acetoacetato di metile										
benzoato di etile										
benzoato di propile										
cianoacetato di metile										
cinnammato di metile										
etil-2-cloroacetoacetato										
2-etilesil tioglicolato										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
formiato di etile										
acetammide										
acetanilide										
acetoacetanilide										
2-acetoacetanisidide										
2-acetoacetotoluidide										
4-acetofenetidide										
4-acetotoluidide										
diacetammide										
N,N-dimetilacetammide										
N,N-dimetilformammide										
propionammide										
succinammide										
acetofenone										
ciclopentanone										
diethylaminoacetone										
2',4'- diidrossiacetofenone										
2',4'- dimetossiacetofenone										
3,4- dimetossifenilacetone										
3-esanone										
2'-idrossiacetofenone										
2-idrossi-4- ottilossibenzofenone										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
2-metil-1,3-ciclopentandione 2-metossiacetofenone 4- <i>tert</i> -butilcicloesano 1,3-cicloesandione 4-acetilpiridina 2-ammino-4-metilpirimidina 3-amminopiridina aziridina 3-benzoilpiridina chinaldina chinolina 1-cianoacetilpiperidina 2-cianopiridina 3-cianopiridina 2-cloro-6-metossipiridina 2,5-diidrofurano 2,6-dimetilpiridina fenil-4-piridil chetone 2-idrazinopiridina 4-idrossimetilpiridina 3-idrossipiridina imidazolo isossazolo										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
2-metilpiridina										
1-metil-2-piridone										
N-metil pirrolidone										
piperidina										
pirazina										
pirazolo										
piridazina										
piridina										
tetraidropirano										
tetrazolo										
tiofene										
1,2,4-triazolo										
2,4,5-triidrossipirimidina										
atrazina	210	233	262	280	-0,47					
simazina	239	246	253	280	-0,66					
propazina	230	252	277	280	-0,33					
terbutilazina	210	245	260	265	-0,27					
ametrina										
simetrina										
prometrina										
chloridazon	139	152	159	167	0,013	168	183	195	210	0,085
benalaxyl										
tetraconazolo										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
acido acetoidrossammico										
metossiammina cloridrato										
idrossilammina cloridrato										
idrossilammina solfato										
idrossilammina soluzione 50% in acqua										
idrossilammina fosfato										
1-azide-3-metil benzene										
1-azide-4-metil benzene										
4-toluensulfonil azide										
idrossiurea										
metansolfonil cloruro										
4-cloro-3-nitrobenzil alcol	244	245		300	-0,05					
4-cloro-2-nitrobenzil alcol										
2-cloro-5-nitrobenzil alcol										
5-cloro-2-nitrobenzil alcol										
2-cloro-6-nitrobenzaldeide										
5-cloro-2-nitrobenzaldeide										
4-cloro-3-nitrobenzaldeide										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
4-nitrobenzilalcol o-nitrobenzilalcol 4-nitrobenzaldeide o-nitrobenzaldeide 3,5-dinitrobenzilalcol 4-idrossi-3-nitrobenzaldeide 5-idrossi-2-nitrobenzaldeide 3-idrossi-4-nitrobenzaldeide 3-metossi-2-nitrobenzaldeide tetraciano etilene 1,2,3,4-tetraciano benzene 3,5-dimetilisossazolo 3-amminoisossazolo 4-ammino-3-isossazolidone 3-fenil-5-isossazolone difenilammina 2-idrossipiridina-N-ossido 2,4,7-trinitro-9-fluorenone 3-nitro anidride ftalica adenosina 1,4-diclorobenzene										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	DSC (secondo effetto)					DSC (terzo effetto)				
	T(°C) inizio secondo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio terzo effetto	T(°C) onset	T(°C) picco	T(°C) fine effetto	DH(kJ/g)
citidina										
isopropildenuridina										
3-ammino-5- metilisossazolo propilammina										
3-nitro-1,8- naftalenedicarbossilica anidride										
N-metil-idrossilammina cloridrato	70		95	135	-2,025					
N,O-dimetil- idrossilammina cloridrato	110		125	145	-0,993					
2-cloro-5- nitrobenzaldeide 3-nitrobenzilalcol										

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
acido 2-nitrocinnammico											
acido 2-nitrofenil acetico											
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo	160										-1,00
2-ammino-4-nitroanisolo											
2-ammino-4-nitrofenolo											
4-cloro-2-nitroanilina	295										-2,00
4-cloro nitrobenzene	316										-1,76
2-cloro-5-nitropiridina	344										-0,67
2,4-dicloro-6-nitroanilina	320										-1,25
3,4-dicloronitrobenzene	175										
2,4-difluoronitrobenzene	330										-0,92
4-fluoro-2-nitrotoluene	319										-0,84
8-idrossi-5-nitrochinolina											
3-metil-4-nitrofenolo	181										-1,00
2-metossi-5-nitropiridina	314										-2,43
3-nitroacetanilide	324										-2,05
3-nitroacetofenone											
2-nitroanilina	270	3	0,07	80	334	375	51	105	1115	1385	-2,20
2-nitroanisolo	328										-1,80
4-nitrobenzammide											
nitrobenzene	360										-1,76

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
4-nitrobenzoiocloruro	202								565		-0,8
4-nitrobenzotrifluoruro	325										-1,71
4-nitrobenzotrifluoruro	300										
3-nitrobenzotrifluoruro	300										
6-nitrochinolina	340										-1,42
4-nitro-3-cresolo											
2-nitrofenolo	260										-2,13
2-nitrotoluene	317										-1,71
3-nitro-o-toluidina											
5-nitrovanillina											
2,3,4-tricloronitrobenzene	332										-0,67
perossido di benzoile	90										-1,84
idroperossido di tertbutile											
idroperossido di cumene											
perossido di tertbutile	102										
cinnamonitrile											
cloro acetonitrile											
2-cloro-6-metil benzonitrile											
3-cloro propionitrile											
crotononitrile											
3,5-diclorobenzonitrile											
2,6-difluorobenzonitrile											
3-(dimetilammino) propionitrile											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
3,4-dinitrobenzotrile	360										-3,39
fumaronitrile	340										-0,46
glutaronitrile											
isofalonnitrile											
malononitrile	180										-1,63
4-nitrobenzotrile	325										-1,71
acido aceton dicarbossilico											
acido adipico											
acido cicloesan carbossilico											
acido cinnammico											
acido 2-clorobenzoico											
acido 2-cloro-3,5-dinitro benzoico											
acido 2,4-dimetossi benzoico											
acido 2,4-dinitrobenzoico	298										-1,84
acido 4-idrossifenil piruvico											
acido 3-idrossi-4-metossi cinnammico											
acido isoftalico											
acido 4 (metiltio) benzoico											
alcol allilico	360										-0,67
alcol 2(2-amminoetossi) etilico											
alcol 2-(2-cloroetossi) etilico											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
alcol 2,3-epossipropilico	62										-1,38
alcol tetraidrofurfurilico											
alcol 2,4,6-trimetilbenzilico											
acrilaldeide	70										-88
aldeide cinnammica	327										-0,5
benzaldeide											
3,4-dimetossibenzaldeide	324										-0,42
a-esilcinnamaldeide											
2-etilbutirraldeide											
3-fenilpropionaldeide											
propionaldeide											
acido 2-clorobenzoico											
2-ammino-4-clorofenolo											
o-bromoanilina											
m-bromoanilina											
p-bromoanilina											
4-bromobenzofenone											
1-bromo-4-clorobutano											
1-bromo-3-cloropropano											
2-bromo-4,6-dinitroanilina	263										-0,63

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
3-cloroanilina											
2-clorobenzil cloruro											
2-clorobenzoil cloruro											
2-clorobenzotricloruro											
1-cloro-3,4-dinitrobenzene	345										-1,80
2-cloro-6-fluorobenzaldeide	302										1,05
2-cloro-6-fluorotoluene											
cloruro di benzile											
2,4-dibromoanilina											
3,5-dibromosalicilaldeide											
1,3-diclorobenzene											
2,4-diclorobenzilcloruro											
2,4-diclorobenzotricloruro											
2,6-dicloro-3-metilaniilina											
2,6-dicloropirazina	131										-1,17
difenil bromometano											
2'-fluoroacetofenone											
3-fluorobenzaldeide											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
4-fluorobenzil cloruro											
2,4,6-tribromoanilina											
epicloridrina	375										-0,5
1,2-epossibutano	145										-0,12
ossido di cicloesene											
ossido di etilene	320										-1,51
ossido di mesitile											
ossido di propilene	340										-1,13
ossido di stirene	252										-0,46
butilbenzene											
difenilmetano											
etilbenzene											
iso ottano											
1-fenil eptano											
allil ammina											
N-amminoesametenilammina											
2(2-ammino etossi) etanolo											
4-ammino fenolo											
3-ammino-5-metilisossazolo	140										-1,30
2-ammino-2-metil-1-propanolo											
anilina											
benzilammina											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
cicloesilammina											
2,2'-diamminodibenzile											
3,4-diamminotoluene											
N,N-dibutilanilina											
1,2-difenil etilammina											
N,N-dimetilanilina											
N,N-dimetil-p-toluidina											
N-etil-N-metilanilina											
N-etil-o-toluidina											
furfurilammina	112										-0,92
N-metilanilina											
2-metossianilina											
3-metossibenzilammina											
2-metossietilammina											
propilammina											
tribenzilammina											
acetato di allile											
acetoacetato di metile											
benzoato di etile											
benzoato di propile											
cianoacetato di metile	289										-0,15
cinnammato di metile											
etil-2-cloroacetoacetato											
2-etilesil tioglicolato											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
formiato di etile											
acetammide											
acetanilide											
acetoacetanilide											
2-acetoacetanisidide											
2-acetoacetotoluidide											
4-acetofenetidide											
4-acetotoluidide											
diacetammide											
N,N-dimetilacetammide											
N,N-dimetilformammide											
propionammide											
succinammide											
acetofenone											
ciclopentanone											
dietilamminoacetone											
2',4'-diidrossiacetofenone											
2',4'-dimetossiacetofenone											
3,4-dimetossifenilacetone											
3-esanone											
2'-idrossiacetofenone											
2-idrossi-4-ottilossibenzofenone											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
2-metil-1,3-ciclopentandione											
2-metossiacetofenone											
4-tert-butilcicloesano											
1,3-cicloesandione											
4-acetilpiridina											
2-ammino-4-metilpirimidina											
3-amminopiridina											
aziridina	100										-2,12
3-benzoilpiridina											
chinaldina											
chinolina											
1-cianoacetilpiperidina											
2-cianopiridina											
3-cianopiridina											
2-cloro-6-metossipiridina											
2,5-diidrofurano											
2,6-dimetilpiridina											
fenil-4-piridil chetone											
2-idrazinopiridina	165										-0,88
4-idrossimetilpiridina											
3-idrossipiridina											
imidazolo											
isossazolo	136										-1,34

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
2-metilpiridina											
1-metil-2-piridone											
N-metil pirrolidone											
piperidina											
pirazina											
pirazolo											
piridazina											
piridina											
tetraidropirano											
tetrazolo	145										-3,93
tiofene											
1,2,4-triazolo	262										-1,09
2,4,5-triidrossipirimidina											
atrazina											
simazina											
propazina											
terbutilazina											
ametrina											
simetrina											
prometrina											
chloridazon											
benalaxyl											
tetraconazolo											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
acido acetoidrossammico											
metossiammina cloridrato											
idrossilammina cloridrato											
idrossilammina solfato											
idrossilammina soluzione 50% in acqua											
idrossilammina fosfato											
1-azide-3-metil benzene											
1-azide-4-metil benzene											
4-toluensulfonil azide											
idrossiurea											
metansolfonil cloruro											
4-cloro-3-nitrobenzil alcol											
4-cloro-2-nitrobenzil alcol											
2-cloro-5-nitrobenzil alcol											
5-cloro-2-nitrobenzil alcol											
2-cloro-6-nitrobenzaldeide											
5-cloro-2-nitrobenzaldeide											
4-cloro-3-nitrobenzaldeide											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
4-nitrobenzilalcol											
o-nitrobenzilalcol											
4-nitrobenzaldeide											
o-nitrobenzaldeide											
3,5-dinitrobenzilalcol											
4-idrossi-3-nitrobenzaldeide											
5-idrossi-2-nitrobenzaldeide											
3-idrossi-4-nitrobenzaldeide											
3-metossi-2-nitrobenzaldeide											
tetraciano etilene											
1,2,3,4-tetraciano benzene											
3,5-dimetilisossazolo											
3-amminoisossazolo											
4-ammino-3-isossazolidone											
3-fenil-5-isossazolone											
difenilammina											
2-idrossipiridina-N-ossido											
2,4,7-trinitro-9-fluorenone											
3-nitro anidride ftalica											
adenosina											
1,4-diclorobenzene											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	ARC										
	T(°C) iniziale	p(bar) iniziale	SHR(°C) iniziale	SHRmax phi corrected (°C/min)	T(°C) al SHRmax	T(°C) finale strumentale	p(bar) finale	DTad strumentale	DTad phi corrected	T(°C) finale phi corrected	DH(kJ/g)
citidina isopropildenuridina 3-ammino-5-metilissazolo propilammina 3-nitro-1,8-naftalenedicarbossilica anidride N-metil-idrossilammina cloridrato N,O-dimetil-idrossilammina cloridrato 2-cloro-5-nitrobenzaldeide 3-nitrobenzilalcol											

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80										TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine		
acido 2-nitrocinnammico																
acido 2-nitrofenil acetico																
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo																
2-ammino-4-nitroanisolo																
2-ammino-4-nitrofenolo																
4-cloro-2-nitroanilina																
4-cloro nitrobenzene																
2-cloro-5-nitropiridina																
2,4-dicloro-6-nitroanilina																
3,4-dicloronitrobenzene																
2,4-difluoronitrobenzene																
4-fluoro-2-nitrotoluene																
8-idrossi-5-nitrochinolina																
3-metil-4-nitrofenolo																
2-metossi-5-nitropiridina																
3-nitroacetanilide																
3-nitroacetofenone																
2-nitroanilina																
2-nitroanisolo																
4-nitrobenzammide																
nitrobenzene																

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80										TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine		
4-nitrobenzoi cloruro																
4-nitrobenzotrile																
4-nitrobenzotrifluoruro																
3-nitrobenzotrifluoruro																
6-nitrochinolina																
4-nitro-3-cresolo																
2-nitrofenolo																
2-nitrotoluene																
3-nitro-o-toluidina																
5-nitrovanillina																
2,3,4-tricloronitrobenzene																
perossido di benzoile																
idroperossido di tertbutile																
idroperossido di cumene																
perossido di tertbutile																
cinnamotrile																
cloro acetonitrile																
2-cloro-6-metil benzonitrile																
3-cloro propionitrile																
crotononitrile																
3,5-diclorobenzonitrile																
2,6-difluorobenzonitrile																
3-(dimetilammino) propionitrile																

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
3,4-dinitrobenzotrile fumarotrile glutarotrile isofalotrile malonotrile 4-nitrobenzotrile acido aceton dicarbossilico acido adipico acido cicloesan carbossilico acido cinnammico acido 2-clorobenzoico acido 2-cloro-3,5-dinitro benzoico acido 2,4-dimetossi benzoico acido 2,4-dinitrobenzoico acido 4-idrossifenil piruvico acido 3-idrossi-4-metossi cinnammico acido isoftalico acido 4 (metiltio) benzoico alcol allilico alcol 2(2-amminoetossi) etilico alcol 2-(2-cloroetossi) etilico															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
alcol 2,3-epossipropilico															
alcol tetraidrofurfurilico															
alcol 2,4,6-trimetilbenzilico															
acrilaldeide															
aldeide cinnammica															
benzaldeide															
3,4-dimetossibenzaldeide															
a-esilcinnamaldeide															
2-etilbutirraldeide															
3-fenilpropionaldeide															
propionaldeide															
acido 2-clorobenzoico															
2-ammino-4-clorofenolo															
o-bromoanilina															
m-bromoanilina															
p-bromoanilina															
4-bromobenzofenone															
1-bromo-4-clorobutano															
1-bromo-3-cloropropano															
2-bromo-4,6-dinitroanilina															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80										TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine		
3-cloroanilina																
2-clorobenzil cloruro																
2-clorobenzoil cloruro																
2-clorobenzotricloruro																
1-cloro-3,4-dinitrobenzene																
2-cloro-6-fluorobenzaldeide																
2-cloro-6-fluorotoluene																
cloruro di benzile																
2,4-dibromoanilina																
3,5-dibromosalicilaldeide																
1,3-diclorobenzene																
2,4-diclorobenzilcloruro																
2,4-diclorobenzotricloruro																
2,6-dicloro-3-metilnilina																
2,6-dicloropirazina																
difenil bromometano																
2'-fluoroacetofenone																
3-fluorobenzaldeide																

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
4-fluorobenzil cloruro															
2,4,6-tribromoanilina															
epicloridrina															
1,2-epossibutano															
ossido di cicloesene															
ossido di etilene															
ossido di mesitile															
ossido di propilene															
ossido di stirene															
butilbenzene															
difenilmetano															
etilbenzene															
iso ottano															
1-fenil eptano															
allil ammina															
N-amminoesametenilammina															
2(2-ammino etossi) etanolo															
4-ammino fenolo															
3-ammino-5-metilisossazolo															
2-ammino-2-metil-1-propanolo															
anilina															
benzilammina															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
cicloesilammina															
2,2'-diamminodibenzile															
3,4-diamminotoluene															
N,N-dibutilanilina															
1,2-difenil etilammina															
N,N-dimetilanilina															
N,N-dimetil-p-toluidina															
N-etil-N-metilanilina															
N-etil-o-toluidina															
furfurilammina															
N-metilanilina															
2-metossianilina															
3-metossibenzilammina															
2-metossietilammina															
propilammina															
tribenzilammina															
acetato di allile															
acetoacetato di metile															
benzoato di etile															
benzoato di propile															
cianoacetato di metile															
cinnammato di metile															
etil-2-cloroacetoacetato															
2-etilesil tioglicolato															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
formiato di etile															
acetammide															
acetanilide															
acetoacetanilide															
2-acetoacetanisidide															
2-acetoacetotoluidide															
4-acetofenetidide															
4-acetotoluidide															
diacetammide															
N,N-dimetilacetammide															
N,N-dimetilformammide															
propionammide															
succinammide															
acetofenone															
ciclopentanone															
dietilamminoacetone															
2',4'- diidrossiacetofenone															
2',4'- dimetossiacetofenone															
3,4- dimetossifenilacetone															
3-esanone															
2'-idrossiacetofenone															
2-idrossi-4- ottilossibenzofenone															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
2-metil-1,3-ciclopentandione 2-metossiacetofenone 4-tert-butilcicloesano 1,3-cicloesandione 4-acetilpiridina 2-ammino-4-metilpirimidina 3-amminopiridina aziridina 3-benzoilpiridina chinaldina chinolina 1-cianoacetilpiperidina 2-cianopiridina 3-cianopiridina 2-cloro-6-metossipiridina 2,5-diidrofurano 2,6-dimetilpiridina fenil-4-piridil chetone 2-idrazinopiridina 4-idrossimetilpiridina 3-idrossipiridina imidazolo isossazolo															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
2-metilpiridina 1-metil-2-piridone N-metil pirrolidone piperidina pirazina pirazolo piridazina piridina tetraidropirano tetrazolo tiofene 1,2,4-triazolo 2,4,5-triidrossipirimidina atrazina simazina propazina terbutilazina ametrina simetrina prometrina chloridazon benalaxyl tetraconazolo															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80										TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine		
acido acetoidrossammico																
metossiammina cloridrato																
idrossilammina cloridrato																
idrossilammina solfato																
idrossilammina soluzione 50% in acqua																
idrossilammina fosfato																
1-azide-3-metil benzene																
1-azide-4-metil benzene																
4-toluensulfonil azide																
idrossiurea																
metansolfonil cloruro																
4-cloro-3-nitrobenzil alcol																
4-cloro-2-nitrobenzil alcol																
2-cloro-5-nitrobenzil alcol																
5-cloro-2-nitrobenzil alcol																
2-cloro-6-nitrobenzaldeide																
5-cloro-2-nitrobenzaldeide																
4-cloro-3-nitrobenzaldeide																

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
4-nitrobenzilalcol															
o-nitrobenzilalcol															
4-nitrobenzaldeide															
o-nitrobenzaldeide															
3,5-dinitrobenzilalcol															
4-idrossi-3-nitrobenzaldeide															
5-idrossi-2-nitrobenzaldeide															
3-idrossi-4-nitrobenzaldeide															
3-metossi-2-nitrobenzaldeide															
tetraciano etilene															
1,2,3,4-tetraciano benzene															
3,5-dimetilisossazolo															
3-amminoisossazolo															
4-ammino-3-isossazolidone															
3-fenil-5-isossazolone															
difenilammina															
2-idrossipiridina-N-ossido															
2,4,7-trinitro-9-fluorenone															
3-nitro anidride ftalica															
adenosina															
1,4-diclorobenzene															

Appendice 1 – Informazioni termochimiche inserite in Banca Dati

Composto	C80									TG (1° effetto)			TG (2° effetto)		
	T(°C) inizio primo effetto	T(°C) onset	p(bar) onset	T(°C) picco	p(bar) picco	T(°C) fine effetto	p(bar) fine effetto	DH(kJ/g)	T(°C) inizio primo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	T(°C) inizio secondo effetto	Dm(%)	T(°C) fine	
citidina															
isopropildenuridina															
3-ammino-5-metilisossazolo															
propilammina															
3-nitro-1,8-naftalenedicarbossilica anidride															
N-metil-idrossilammina cloridrato									150	97	400				
N,O-dimetil-idrossilammina cloridrato									100	96	350				
2-cloro-5-nitrobenzaldeide															
3-nitrobenzilalcol															

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
acido 2-nitrocinnammico				
acido 2-nitrofenil acetico				
2-ammino-4-cloro-5-nitrofenolo				
2-ammino-4-nitroanisolo				
2-ammino-4-nitrofenolo				
4-cloro-2-nitroanilina				
4-cloro nitrobenzene				
2-cloro-5-nitropiridina				
2,4-dicloro-6-nitroanilina				
3,4-dicloronitrobenzene				
2,4-difluoronitrobenzene				
4-fluoro-2-nitrotoluene				
8-idrossi-5-nitrochinolina				
3-metil-4-nitrofenolo				
2-metossi-5-nitropiridina				
3-nitroacetanilide				
3-nitroacetofenone				
2-nitroanilina				
2-nitroanisolo				
4-nitrobenzammide				
nitrobenzene				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
4-nitrobenzoincloruro				
4-nitrobenzotrifluoruro				
4-nitrobenzotrifluoruro				
3-nitrobenzotrifluoruro				
6-nitrochinolina				
4-nitro-3-cresolo				
2-nitrofenolo				
2-nitrotoluene				
3-nitro-o-toluidina				
5-nitrovanillina				
2,3,4-tricloronitrobenzene				
perossido di benzoile				
idroperossido di tertbutile				
idroperossido di cumene				
perossido di tertbutile				
cinnamitrile				
cloro acetonitrile				
2-cloro-6-metil benzonitrile				
3-cloro propionitrile				
crotononitrile				
3,5-diclorobenzonitrile				
2,6-difluorobenzonitrile				
3-(dimetilammino) propionitrile				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
3,4-dinitrobenzotrile fumarotrile glutarotrile isoftalotrile malonotrile 4-nitrobenzotrile acido aceton dicarbossilico acido adipico acido cicloesan carbossilico acido cinnammico acido 2-clorobenzoico acido2-cloro-3,5-dinitro benzoico acido 2,4-dimetossi benzoico acido 2,4-dinitrobenzoico acido 4-idrossifenil piruvico acido 3-idrossi-4-metossi cinnammico acido isoftalico acido 4 (metiltio) benzoico alcol allilico alcol 2(2-amminoetossi) etilico alcol 2-(2-cloroetossi) etilico				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
alcol 2,3-epossipropilico				
alcol tetraidrofurfurilico				
alcol 2,4,6-trimetilbenzilico				
acrilaldeide				
aldeide cinnammica				
benzaldeide				
3,4-dimetossibenzaldeide				
a-esilcinnamaldeide				
2-etilbutirraldeide				
3-fenilpropionaldeide				
propionaldeide				
acido 2-clorobenzoico				
2-ammino-4-clorofenolo				
o-bromoanilina				
m-bromoanilina				
p-bromoanilina				
4-bromobenzofenone				
1-bromo-4-clorobutano				
1-bromo-3-cloropropano				
2-bromo-4,6-dinitroanilina				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
3-cloroanilina				
2-clorobenzil cloruro				
2-clorobenzoil cloruro				
2-clorobenzotricloruro				
1-cloro-3,4-dinitrobenzene				
2-cloro-6-fluorobenzaldeide				
2-cloro-6-fluorotoluene				
cloruro di benzile				
2,4-dibromoanilina				
3,5-dibromosalicilaldeide				
1,3-diclorobenzene				
2,4-diclorobenzilcloruro				
2,4-diclorobenzotricloruro				
2,6-dicloro-3-metilaniilina				
2,6-dicloropirazina				
difenil bromometano				
2'-fluoroacetofenone				
3-fluorobenzaldeide				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
4-fluorobenzil cloruro 2,4,6-tribromoanilina epicloridrina 1,2-epossibutano ossido di cicloesene ossido di etilene ossido di mesitile ossido di propilene ossido di stirene butilbenzene difenilmetano etilbenzene iso ottano 1-fenil eptano allil ammina N- amminoesametenilimin a 2(2-ammino etossi) etanolo 4-ammino fenolo 3-ammino-5- metilisossazolo 2-ammino-2-metil-1- propanolo anilina benzilammina				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
cicloesilammina 2,2'-diamminodibenzile 3,4-diamminotoluene N,N-dibutilanilina 1,2-difenil etilammina N,N-dimetilanilina N,N-dimetil-p-toluidina N-etil-N-metilanilina N-etil-o-toluidina furfurilammina N-metilanilina 2-metossianilina 3-metossibenzilammina 2-metossietilammina propilammina tribenzilammina acetato di allile acetoacetato di metile benzoato di etile benzoato di propile cianoacetato di metile cinnammato di metile etil-2-cloroacetoacetato 2-etilesil tioglicolato				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
formiato di etile				
acetammide				
acetanilide				
acetoacetanilide				
2-acetoacetanisidide				
2-acetoacetotoluidide				
4-acetofenetidide				
4-acetotoluidide				
diacetammide				
N,N-dimetilacetammide				
N,N-dimetilformammide				
propionammide				
succinammide				
acetofenone				
ciclopentanone				
dietilamminoacetone				
2',4'- diidrossiacetofenone				
2',4'- dimetossiacetofenone				
3,4- dimetossifenilacetone				
3-esanone				
2'-idrossiacetofenone				
2-idrossi-4- ottilossibenzofenone				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
2-metil-1,3-ciclopentandione 2-metossiacetofenone 4- <i>tert</i> -butilcicloesano 1,3-cicloesandione 4-acetilpiridina 2-ammino-4-metilpirimidina 3-amminopiridina aziridina 3-benzoilpiridina chinaldina chinolina 1-cianoacetilpiperidina 2-cianopiridina 3-cianopiridina 2-cloro-6-metossipiridina 2,5-diidrofurano 2,6-dimetilpiridina fenil-4-piridil chetone 2-idrazinopiridina 4-idrossimetilpiridina 3-idrossipiridina imidazolo isossazolo				

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
2-metilpiridina				
1-metil-2-piridone				
N-metil pirrolidone				
piperidina				
pirazina				
pirazolo				
piridazina				
piridina				
tetraidropirano				
tetrazolo				
tiofene				
1,2,4-triazolo				
2,4,5-triidrossipirimidina				
atrazina	HCN, HNCO, CO, HCl	TG-FTIR	riscaldamento fino a 100C aria / N2	
simazina	HCN, NH3, CO, cloroetano, HCl, etilene	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
propazina	HCN, HCl, N,N'-diisopropilcarbodiimide	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
terbutilazina	isobutilene, HCl, HCN, cloroetano	PY-FTIR	riscaldamento fino a 100C N2	
ametrina	NH3, HCN, acido isocianico	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
simetrina	acetaldeide	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
prometrina	HCN, CH4	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	
chloridazon	HCN, CO, NH3, fenilisocianato, HCl, CO2, NO2	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
benalaxyl	4-fenilbutirrato di metile, CO, metanolo, N,N-dibutilacetammide,	TG-FTIR	riscaldamento fino a 800 ^o aria / N2	
tetraconazolo	HF, HCN, acido isocianico, CO, 1,1-difluoroetano, triclorotoluene, toluene, CO2, acido formico	TG-FTIR	riscaldamento fino a 100C aria / N2	

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
acido acetoidrossammico	NH3, N2O, nitrometano, acido acetico, acetato di metile, acetammide	TG-FTIR	riscaldamento fino a 500°C	N2
metossiammina cloridrato	HCN, HNCO, Cl2, metanolo, HCl, clorometano, N2O, NO2	TG-FTIR-MS	riscaldamento fino a 500°C	N2
idrossilammina cloridrato	N2O, HCl, N2, H2O,	TG-FTIR-MS	riscaldamento fino a 500°C	N2
idrossilammina solfato	N2O, SO2, N2, H2O	TG-FTIR-MS	riscaldamento fino a 500°C	N2
idrossilammina soluzione 50% in acqua	N2O, NH3, NO, H2O, N2	TG-FTIR-MS	riscaldamento fino a 500°C	N2
idrossilammina fosfato	NH3, N2O, N2, H2O	TG-FTIR-MS	riscaldamento fino a 1000°C	N2
1-azide-3-metil benzene				N2
1-azide-4-metil benzene				N2
4-toluensulfonil azide	SO2, toluene	TG-FTIR	riscaldamento fino a 400°C	
idrossiurea	NH3, CO2, acido isocianico	TG-FTIR	riscaldamento fino a 500°C	N2
metansolfonil cloruro	SO2, CH4, COS, CS2, HCl	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-cloro-3-nitrobenzil alcol	clorobenzene, HCN, CO, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-cloro-2-nitrobenzil alcol	clorobenzene, HCN, CO, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
2-cloro-5-nitrobenzil alcol	CO, HCN, CH4, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
5-cloro-2-nitrobenzil alcol	clorobenzene, HCN, CO2, CO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
2-cloro-6-nitrobenzaldeide	HCN, CO, HCl, clorobenzene, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
5-cloro-2-nitrobenzaldeide	HCN, CO, HCl, clorobenzene, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-cloro-3-nitrobenzaldeide	HCN, CO, HCl, clorobenzene, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
4-nitrobenzilalcol	benzene, HCN, NO, CO, CO2, benzaldeide	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
o-nitrobenzilalcol	benzene, HCN, NO, CO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-nitrobenzaldeide	benzene, HCN, NO, CO, CO3	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
o-nitrobenzaldeide	benzene, HCN, NO, CO, CO4	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3,5-dinitrobenzilalcol	CO, HCN, NO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-idrossi-3-nitrobenzaldeide	HCN, CO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
5-idrossi-2-nitrobenzaldeide	HCN, CO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-idrossi-4-nitrobenzaldeide	HCN, CO, NO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-metossi-2-nitrobenzaldeide	CO, HCN, NO, CO2, CH4	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
tetraciano etilene	HCNO, NH3, HCN, CO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
1,2,3,4-tetraciano benzene	NH3, HCN, CO, CO2, CH4, 2,3-dimetilene	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3,5-dimetilissosazolo	C2H4, CH4, CO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-amminoisosazolo	HCN, NH3, CO, CH4, HCNO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
4-ammino-3-isosazolidone	NH3, HCN, CO, CH4, HCNO, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-fenil-5-isosazolone	CO2, CO, NH3	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
difenilammina	benzene, CO, CH4, 2-esene, C2H4, C3H6, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
2-idrossipiridina-N-ossido	CO, HCN, NH3, CO2, CH4, butene, HCNO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
2,4,7-trinitro-9-fluorenone	CO, NO, HCN, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-nitro anidride ftalica	CO, NO, HCN, CO2,	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
adenosina	HCN, NH3, CO, CO2, CH4	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
1,4-diclorobenzene	HCl, benzene	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2

Composto	PRODOTTI DECOMPOSIZIONE			
	PRODOTTI DI DECOMPOSIZIONE	tipo di prova	metodo	atmosfera
citidina	NH3, HCN, COCH4, CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
isopropildenuridina	CO, HCN, HCNO, CO2, CH4, , NH3, 2,5-dimetilesanolo, C2H4	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-ammino-5-metilissazolo	CO, HCN, CH4, CO2, C2H4,			
propilammina	CH4, NH3	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-nitro-1,8-naftalenedicarbossilica anidride	CO, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
N-metil-idrossilammina cloridrato	HCl; HCN, CO, acqua; CO2; acido formico	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
N,O-dimetil-idrossilammina cloridrato	HCN, formaldeide,CO, metanolo, HCl, CH4, N2O	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
2-cloro-5-nitrobenzaldeide	HCN, CO, HCl, clorobenzene, CO2, NO	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2
3-nitrobenzilalcol	benzene, CO,NO, 3-nitrobenzaldeide, nitrobenzene, N2O,CO2	PY-FTIR	riscaldamento fino a 1000°C	N2