

## Кинетика неизотермического разложения 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола: корреляционные зависимости, кинетические константы, сходимость и устойчивость результатов анализа

© Попок\*+ Владимир Николаевич, Жилин Глеб Владимирович

Кафедра материаловедения. МИРЭА-Российский технологический университет.  
пр-т Вернадского, 78. г. Москва, 119454. Россия. Тел.: +7 (499) 600-80-80, доб. 43005.  
E-mail: vnpopok@mail.ru

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** термическое разложение, кинетические кривые, аппроксимация, уравнение регрессии, кинетические константы, энергия активации, предэкспоненциальный множитель, изокинетическая температура, компенсационная зависимость, сходимость.

### Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных термического разложения 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола (ТАТВ), полученных в неизотермических условиях термогравиметрического и дифференциального термического анализов, дифференциальной термогравиметрии, дифференциальной сканирующей калориметрии, и данных анализа отходящих газов – для непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей. С использованием предлагаемого двухэтапного метода линейаризации кинетических кривых определены эффективные значения кинетических констант (энергии активации и предэкспоненциального множителя) и изокинетической температуры, их зависимость от степени превращения, в том числе при использовании разных независимых переменных – температуры или времени. Показано, что использование температуры в качестве независимой переменной приводит при анализе кинетических кривых к инвариантным линейным уравнениям регрессии, хорошо согласующимся между собой и с уточненной в этой работе компенсационной зависимостью для ТАТВ и аминотринитробензолов. Использование времени в качестве независимой переменной позволяет получать разные линейные уравнения регрессии для кинетических кривых, полученных при разной скорости нагрева, с асимптотической точкой пересечения прямых, соответствующих этим уравнениям, что используется для определения кинетических констант. Проведена модификация метода для случая аппроксимации кинетических кривых линейной функцией, что позволяет уточнять результаты анализа в окрестности асимптотик кинетических кривых. Показана хорошая сходимость (по двум критериям) результатов проведенного анализа, их соответствие надежным литературным данным, в том числе для изотермических условий. Показана устойчивость уточненной компенсационной зависимости к варьированию методов определения и анализа кинетических кривых. Подтверждена работоспособность правила секущих и множественность в принципе равноправных описаний кинетических кривых. Показано, что для приемлемой оценки значений кинетических констант термического разложения ТАТВ, можно использовать одну кинетическую кривую. Расширен каталог результатов кинетического анализа термического разложения энергоемких соединений с использованием предлагаемого метода.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н., Жилин Г.В. Кинетика неизотермического разложения 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола: корреляционные зависимости, кинетические константы, сходимость и устойчивость результатов анализа. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.81. №2. С.23-38. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-23

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н., Жилин Г.В. Кинетика неизотермического разложения 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола: корреляционные зависимости, кинетические константы, сходимость и устойчивость результатов анализа. *Бутлеровские сообщения В*. 2025. Т.10. №1. Id.4. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-23/ROI-jbc-RB/25-10-1-4

### The output for citing the English online version of the article:

Vladimir N. Popok, Gleb V. Zhilin. Kinetics of non-isothermal decomposition of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene: correlation dependencies, kinetic constants, convergence and stability of analysis results. *Butlerov Communications B*. 2025. Vol.10. No.1. Id.4. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-23/ROI-jbc-B/25-10-1-4