

Анализ и линеаризация кинетических зависимостей термического разложения 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадициклогексана, сходимость результатов определения кинетических констант

© Попок Владимир Николаевич

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

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

Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных термического разложения 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадициклогексана в неизотермических условиях термогравиметрического и дифференциального термического анализов, дифференциальной термогравиметрии, дифференциальной сканирующей калориметрии на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей.

Двухэтапным методом линеаризации кинетических кривых проведен анализ первичных данных, полученных в неизотермических условиях испытаний образцов RDX, 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 RDX к инвариантным (к варьированию условий испытаний) линейным уравнениям регрессии, хорошо согласующимся между собой и с компенсационной зависимости для нитраминов. 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. Показана в целом хорошая сходимость (по двум критериям) результатов анализа с литературными данными, в том числе полученными в изотермических условиях. Подтверждено, что в двухэтапном методе для аппроксимации экспериментальных данных могут использоваться разные двухпараметрические функции, что определяет множественность в принципе равноправных описаний кинетических кривых. Подтверждена работоспособность правила секущих. Показано, что для первичной оценки кинетических констант термического разложения RDX может быть использован метод аппроксимации одной кинетической кривой. Расширен каталог результатов кинетического анализа термического разложения энергоемких соединений с использованием предлагаемого метода.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Анализ и линеаризация кинетических зависимостей термического разложения 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадициклогексана, сходимость результатов определения кинетических констант. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.81. №2. С.39-49. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-39

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Анализ и линеаризация кинетических зависимостей термического разложения 1,3,5-тринитро-1,3,5-триазадициклогексана, сходимость результатов определения кинетических констант. *Бутлеровские сообщения В*. 2025. Т.10. №1. Id.5. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-39/ROI-jbc-RB/25-10-1-5

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

Vladimir N. Popok. Analysis and linearization of kinetic dependences of thermal decomposition of 1,3,5-trinitro-1,3,5-triazacyclohexane, convergence of results of determination of kinetic constants. *Butlerov Communications B*. 2025. Vol.10. No.1. Id.5. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-81-2-39/ROI-jbc-B/25-10-1-5