

Инвариантные корреляционные зависимости, кинетические константы и сходимость результатов анализа кинетики неизотермического разложения аммониевой соли хлорной кислоты

© Попок Владимир Николаевич

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: перхлорат аммония, термическое разложение, кинетические кривые, аппроксимация, уравнение регрессии, кинетические константы, энергия активации, предэкспоненциальный множитель, инвариантные и компенсационные зависимости, сходимость.

Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных термического разложения аммониевой соли хлорной кислоты – перхлората аммония (ПХА), в том числе с добавками разного назначения, в неизотермических условиях термогравиметрического (ТГА) анализа, дифференциальной термогравиметрии (ДТГ), дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и данных анализа отходящих газов (АОГ) на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей.

Для анализа выбраны доступные воспроизводимые группы литературных данных, отвечающие требованию значительных качественных и количественных отличий в форме первичных кинетических кривых и по результатам определения кинетических констант. С использованием двухэтапного метода линеаризации первичных неизотермических данных ТГА, ДТГ, ДСК, АОГ для ПХА, ПХА+катализаторы разложения, ПХА + полимерные добавки, сокристаллизат ПХА, определены инвариантные для каждой области линейности (стадии разложения) кинетические зависимости – для разных исходных независимых переменных (T или t), в том числе компенсационные. Показана устойчивость и сходимость инвариантных кинетических зависимостей (по значениям коэффициентов уравнений регрессии) в двух областях линейности к изменению: групп данных, типов кинетических кривых для ПХА, используемых образцов (ПХА, композиции), условий испытаний, что позволяет применять полученные инвариантные зависимости в качестве базы (критерия) для обобщения разнородных кинетических данных. Определены, с использованием двухэтапного метода линеаризации групп первичных данных неизотермических ТГА, ДТГ, ДСК, АОГ для ПХА, эффективные значения кинетических констант (E , $\ln(Z)$), их зависимости от степени превращения для разных аппроксимирующих функций с выполнением условий сходимости, проведено сравнение с литературными данными.

Показано, что для аппроксимации кинетических кривых в двухэтапном методе линеаризации могут использоваться разные двухпараметрические линеаризуемые функции, приводящие к разным видам инвариантных зависимостей. Это определяет множественность в принципе равноправных описаний кинетических кривых. Расширен каталог результатов кинетического анализа термического разложения энергоёмких соединений с использованием предлагаемого метода.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Инвариантные корреляционные зависимости, кинетические константы и сходимость результатов анализа кинетики неизотермического разложения аммониевой соли хлорной кислоты. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.82. №6. С.46-66. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-6-12

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Инвариантные корреляционные зависимости, кинетические константы и сходимость результатов анализа кинетики неизотермического разложения аммониевой соли хлорной кислоты. *Бутлеровские сообщения А*. 2025. Т.10. №2. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-6-46/ROI-jbc-RA/25-10-2-12

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

Vladimir N. Popok. Invariant correlation dependences, kinetic constants and convergence of results of analysis of kinetics of nonisothermal decomposition of ammonium salt of perchloric acid. *Butlerov Communications A*. 2025. Vol.10. No.2. Id.12. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-6-46/ROI-jbc-A/25-10-2-12