

Инвариантные корреляционные зависимости характеристик термического разложения компонентов и полимерных композиций на их основе

© 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: термическое разложение, компоненты и полимерные композиции, тепловой взрыв, зажигание, воспламенение, энергия активации, предэкспонента, уравнение Аррениуса, корреляция, уравнение регрессии, инвариантная зависимость.

Аннотация

В настоящей работе для ряда компонентов и полимерных композиций представлены результаты анализа экспериментальных данных по характеристикам кинетики их термического разложения, воспламенения, зажигания и теплового взрыва на предмет приведения их к инвариантным корреляционным соотношениям. Под инвариантностью понимается как инвариантность корреляционных соотношений к варьированию отдельных факторов структуры композиций и условий испытаний, так и к варьированию некоторой совокупности факторов.

Рассматриваются литературные данные и результаты собственных исследований автора для кинетических параметров термического разложения, воспламенения, зажигания и теплового взрыва широкой группы компонентов и полимерных композиций: энергии активации (E) и предэкспоненты (A) в аррениусовской зависимости константы скорости реакции от температуры. При анализе экспериментальных данных используются и другие двухпараметрические функциональные зависимости – степенная и экспоненциальная (для аппроксимации кинетических кривых).

Проанализированы данные по кинетическим «константам» E и A для выборок компонентов из классов соединений: нитроэфиры, нитрамины, аммония перхлорат и нитрат, ароматические нитросоединения и другие. Использовались результаты, полученные разными экспериментальными методами, в различных температурных условиях и разными методами обработки данных.

Проведенный корреляционный и регрессионный анализ большой совокупности данных позволил построить линейные регрессионные соотношения между рассматриваемыми кинетическими характеристиками (E и A), которые являются инвариантными к варьированию химической структуры компонентов (по классам) и состава полимерных композиций, метода и условий испытаний, метода обработки данных. Установлено, что для получения высоких значений коэффициента корреляции данных в линейных инвариантных зависимостях необходимо, в ряде случаев, проводить предварительную группировку компонентов и данных. Для полимерных композиций на основе рассматриваемых групп компонентов подтверждено правило доминирующих компонентов в определении характеристик их термического разложения, зажигания и теплового взрыва.

Показана инвариантность зависимостей между параметрами при использовании для аппроксимации экспериментальных кинетических данных двухпараметрических степенной и экспоненциальной функций.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Инвариантные корреляционные зависимости характеристик термического разложения компонентов и полимерных композиций на их основе. *Бутлеровские сообщения*. 2023. Т.76. №12. С.29-41. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-76-12-29

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Инвариантные корреляционные зависимости характеристик термического разложения компонентов и полимерных композиций на их основе. *Бутлеровские сообщения В*. 2023. Т.6. №4. Id.5. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-76-12-29/ROI-jbc-RB/23-6-4-5