

Тематический раздел: Физико-математические исследования. Полная исследовательская публикация
Утверждённая научная специальность ВАК: 1.4.3. Органическая химия; 1.4.4. Физическая химия;
1.4.14. Кинетика и катализ

Дополнительная научная специальность ВАК: 1.1.4. Теория вероятностей и математическая статистика;
1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/24-78-6-43

Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-43

Поступила в редакцию 13 мая 2024 г. УДК 629.7.

Сложные кинетические зависимости термического разложения энергоёмких соединений – линейаризация и определение кинетических констант

© 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, кинетические кривые, аппроксимация, уравнение регрессии, коэффициенты уравнения регрессии, кинетические константы, энергия активации, предэкспоненциальный множитель, критическая температура, температура.

Аннотация

Представлены результаты анализа сложных первичных экспериментальных кинетических данных (литературные данные) многостадийного термического разложения ряда энергетических соединений на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей. Рассматривается влияние температуры на кинетику термического разложения перхлората аммония – в твердом состоянии, тринитрофенола и гексанитродифенила – в расплаве, этиленгликольдинитрита – в парах. Рассматриваются первичные кинетические данные с физически разными зависимыми переменными: удельный объем газов и скорость его изменения, относительное к начальному давлению продуктов разложения и скорость его изменения, максимальная скорость разложения при разной температуре. Подтверждено, что использование двухпараметрических линейной или линейризуемых экспоненциальной и степенной функций для аппроксимации кинетических кривых, позволяет, в большинстве случаев, описать всю кинетическую кривую одним уравнением регрессии – в новых переменных. Асимптотическое поведение кинетических кривых реализуется при этом в виде точек пересечения пучков прямых или в виде компенсационной зависимости. С использованием рассмотренного ранее метода определены значения энергии активации, предэкспоненциального множителя и критической (изокинетической) температуры термического разложения рассматриваемых соединений. Показано хорошее соответствие полученных результатов имеющимся литературным данным – по значениям энергии активации и предэкспоненциального множителя. Установлено значимое влияние структуры соединений на основе тринитробензольного кольца (тринитрофенола, тринитрорезозина, гексанитродифенила, гексанитродифенилсульфида и др.) на критическую температуру их термического разложения. На примере этиленгликольдинитрита рассмотрен метод модификации и совмещения первичных кинетических данных и стандартной дифференциальной формы представления кинетической зависимости с использованием операции масштабирования независимых переменных. В целом подтверждена эффективность предлагаемого подхода к анализу кинетических кривых без использования модельных уравнений кинетики химических реакций. Расширен каталог результатов кинетического анализа термического разложения энергоёмких соединений с использованием предлагаемого метода.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Сложные кинетические зависимости термического разложения энергоёмких соединений – линейаризация и определение кинетических констант. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.78. №6. С.43-54. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-43

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Сложные кинетические зависимости термического разложения энергоёмких соединений – линейаризация и определение кинетических констант. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.7. №2. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-43/ROI-jbc-RB/24-7-2-10

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

Vladimir N. Popok Complex kinetic dependences of thermal decomposition of energy-intensive compounds – linearization and determination of kinetic constants. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.7. No.2. Id.10. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-43/ROI-jbc-B/24-7-2-10