

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-01/24-78-6-55
Цифровой идентификатор объекта – DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-55
Поступила в редакцию 27 апреля 2024 г. УДК 629.7.

Статистические закономерности кинетики термического разложения некоторых соединений

© 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, степень заполнения, давление.

Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных (кинетических кривых) термического разложения ряда энергетических соединений на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей. В качестве факторов влияния на кинетику разложения выбраны: степень заполнения реакционного объема исследуемым веществом, начальное давление в приборе, равновесное давление паров воды в опытах с нитроглицерином и его предварительное частичное разложение, температура. Кроме этого, рассматриваются первичные кинетические данные с физически разными зависимыми переменными: объем газов, давление продуктов разложения и другие. Подтверждено, что использование степенной зависимости для аппроксимации кинетических кривых позволяет, в большинстве случаев, описать всю кинетическую кривую одним уравнением регрессии – в новых переменных, с сохранением асимптотик в виде точек пересечения пучков прямых. С использованием рассматриваемого метода определены уравнения регрессии, соответствующие кинетическим кривым, для достаточно широкой группы соединений из классов нитроэфиров и *S*-нитросоединений разного строения с широким интервалом изменения области определения кинетических кривых и значений кинетических констант – энергии активации, предэкспоненциального множителя и критической температуры. Наличие асимптотических точек пересечения прямых, соответствующих уравнениям регрессии, позволило свести задачу определения зависимости кинетики термического разложения от разных факторов влияния к линейным или линеаризуемым формам уравнений. Это позволяет упростить задачу построения многопараметрических кинетических зависимостей. Показано хорошее соответствие полученных результатов для соединений разных классов имеющимся литературным данным, в том числе по значениям энергии активации и предэкспоненциального множителя. С использованием асимптотического перехода для некоторых соединений определена критическая температура, соответствующая по способу определения изокинетической температуре. В целом подтверждена эффективность предлагаемого подхода к анализу кинетических кривых без использования модельных уравнений кинетики химических реакций. С учетом ранее опубликованных данных построен достаточно представительный по перечню соединений разных классов каталог результатов кинетического анализа с использованием предлагаемого метода.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Статистические закономерности кинетики термического разложения некоторых соединений. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.78. №6. С.55-64. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-55

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Статистические закономерности кинетики термического разложения некоторых соединений. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.7. №2. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-55/ROI-jbc-RB/24-7-2-11

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

Vladimir N. Popok. Statistical patterns of the kinetics of thermal decomposition of some compounds. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.7. No.2. Id.11. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-78-6-55/ROI-jbc-B/24-7-2-11