

Анализ изотермических кинетических данных твердофазного разложения азиды бария и карбоната кальция

© 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: vnporok@mail.ru

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

Аннотация

Представлены результаты анализа первичных экспериментальных кинетических данных (литературные данные) в переменных «степень разложения-время» термического разложения в изотермических условиях азиды бария (BaN_6) и карбоната кальция (CaCO_3) на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей. Рассматривается влияние температуры на кинетику строго твердофазного термического разложения этих соединений. Отмечается, что для этих соединений литературные данные для энергии активации и предэкспоненциального множителя характеризуются неприемлемо широким интервалом варьирования значений: энергии активации – от ~ 10 ккал/моль до более 1000 ккал/моль – для всей совокупности используемых методов или в несколько раз – при использовании некоторых методов изотермической кинетики; предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса – от $\sim 10^2$ с $^{-1}$ до 10^{70} с $^{-1}$. Кратко рассмотрены факторы и процессы, способствующие реализации указанных разбросов значений кинетических констант. Подтверждено, что использование двухпараметрических линейной или линеаризуемых экспоненциальной и степенной функций для аппроксимации кинетических кривых для BaN_6 и CaCO_3 позволяет, в большинстве случаев, описать всю кинетическую кривую одним уравнением регрессии – в новых переменных. С использованием рассмотренного ранее метода определены значения энергии активации, предэкспоненциального множителя и изокинетической (критической) температуры термического разложения рассматриваемых соединений. Показано хорошее соответствие полученных результатов имеющимся «приемлемым» литературным данным – по значениям энергии активации и предэкспоненциального множителя. С использованием различных методов, в том числе широко описанных в публикациях, показана хорошая сходимость результатов определения кинетических констант и значений изокинетической температуры. Подтверждена работоспособность «правила секущих» и возможность использования двухточечной интерполяции вместо аппроксимации отдельных участков кинетических кривых. В целом подтверждена эффективность предлагаемого метода анализа первичных кинетических кривых без использования модельных уравнений кинетики химических реакций. Расширен каталог результатов кинетического анализа термического разложения соединений с использованием предлагаемого метода.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Попок В.Н. Анализ изотермических кинетических данных твердофазного разложения азиды бария и карбоната кальция. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №9. С.39-47. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-39

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Анализ изотермических кинетических данных твердофазного разложения азиды бария и карбоната кальция. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.8. №3. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-39/ROI-jbc-RB/24-8-3-8

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

Vladimir N. Popok Analysis of isothermal kinetic data of solid-phase decomposition of barium azide and calcium carbonate. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.8. No.3. Id.8. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-39/ROI-jbc-V/24-8-3-8