

Неизотермическая и изотермическая кинетика разложения энергетических соединений – модификация метода линеаризации данных и определение кинетических констант

© Попок Владимир Николаевич

Кафедра материаловедения. 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, неизотермические и изотермические условия, аппроксимация, уравнение регрессии, кинетические константы, энергия активации, предэкспоненциальный множитель, критическая температура, сходимость.

Аннотация

Представлены результаты анализа сложных первичных экспериментальных кинетических данных многостадийного термического разложения в неизотермических и изотермических условиях энергетических соединений пентаэритриттетранитрата и циклического нитрамина ВСНМХ на предмет непосредственного (без привлечения модельных уравнений реакции) извлечения из них необходимых кинетических констант и зависимостей. Используются результаты, полученные в изотермических и неизотермических условиях методами термогравиметрии (ТГА), дифференциальной термогравиметрии (ДТГ), дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), дифференциального термического анализа (ДТА). Представлены также данные, полученные с использованием ИК-спектроскопии и в условиях теста на вакуумную стабильность (ТВС) – в изотермических условиях.

Подтверждено, что применение двухпараметрических линейной или линеаризуемых экспоненциальной и степенной функций для аппроксимации неизотермических и изотермических 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 (асимптотическая эквивалентность) и в виде компенсационной зависимости (асимптотическая пропорциональность), используемой в качестве одного из критериев сходимости данных. С использованием рассмотренного ранее метода определены значения энергии активации, предэкспоненциального множителя и критической (изокинетической) температуры термического разложения рассматриваемых соединений.

Показано хорошее соответствие полученных результатов для кинетических констант имеющимся литературным данным – по разным критериям сходимости. Модифицирован алгоритм двухэтапного метода линеаризации кинетических кривых и определения кинетических констант из неизотермических данных, в том числе для разных независимых переменных – температуры и времени. В целом подтверждена эффективность предлагаемого подхода к анализу кинетических кривых, полученных в неизотермических и изотермических условиях испытаний, 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. Неизотермическая и изотермическая кинетика разложения энергетических соединений – модификация метода линеаризации данных и определение кинетических констант. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.80. №11. С.54-72. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-11-54

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Попок В.Н. Неизотермическая и изотермическая кинетика разложения энергетических соединений – модификация метода линеаризации данных и определение кинетических констант. *Бутлеровские сообщения В*. 2024. Т.9. №4. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-11-54/ROI-jbc-RB/24-9-4-2

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

Vladimir N. Popok. Non-isothermal and isothermal kinetics of decomposition of energetic compounds – modification of the method of data linearization and determination of kinetic constants. *Butlerov Communications B*. 2024. Vol.9. No.4. Id.2. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-11-54/ROI-jbc-B/24-9-4-2