ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДИССОЦИАЦИИ H-ПРОПАНОЛА ЗА ОТРАЖЕННЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

В. Н. Смирнов1, П. А. Власов2, А. А. Захаров3, Г. А. Шубин4, В. С. Арутюнов5

Аннотация: Впервые проведено экспериментальное и расчетное исследование термического распада h-пропанола при температурах, типичных для горения и воспламенения спиртов. Эксперименты проводили за отраженными ударными волнами в области температур 1120–1550 K и давлений ~ 1.0–1.5 атм. Информацию о процессе распада получали путем регистрации поглощения света продуктами: пропиленом (λ = 197 ± 1.0 нм) и метильными радикалами (λ = 216.6 ± 0.2 нм). Интерпретация экспериментальных данных осуществлялась в рамках модели Коннова, модифицированной в настоящей работе с учетом новых данных. В результате моделирования и его сопоставления с экспериментальными результатами получено уравнение Аррениуса для константы скорости элимирования молекулы воды из молекул h-пропанола: \( k_1(T) = (8.3 ± 2.6) \cdot 10^{15} \text{exp} - (64 \text{ [ккал/моль]/(RT)}) \) с⁻¹. Оценка верхней границы энергии отрыва метильной группы от молекулы спирта дает величину 82.9 ккал/моль. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными.

Ключевые слова: распад h-пропанола; реакции элимирования и разрыва С–С связей; образование пропиlena и метильных радикалов; ударные волны; спектрофотометрия; кинетическое моделирование

DOI: 10.30826/CE24170102

Литература


22. Смирнов В. Н. Анализ двухканального распада Si\textsubscript{2}H\textsubscript{6} в рамках теории РРКМ // Кинетика и катализ, 1997. Т. 38. С. 339–352.

Поступила в редакцию 19.12.2023