

Метод оценки реакционной способности ингибиторов окисления акриловой кислоты

© Денисов Евгений Тимофеевич*[†] и Денисова Таиса Григорьевна

Институт проблем химической физики РАН. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия.

Факс: (496) 522-35-07. E-mail: det@icp.ac.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: акриловая кислота, ароматический амин, водородная связь, ингибитор, константа скорости, метод пересекающихся парабол, мультипликативный метод, окисление, семихинонный радикал, фенол, энергия активации, энтальпия реакции.

Аннотация

Разработан полуэмпирический метод расчета энергий активации (E) и констант скорости (k) реакций пероксильных и алкильных радикалов акриловой кислоты с ингибиторами окисления. Разработанный метод представляет комбинацию двух методов: метода пересекающихся парабол для расчета E и k исследуемой реакции в неполярном растворителе (углеводороде) и мультипликативного метода расчета энтальпии и энергии Гиббса образования водородной связи между O–H или N–H-связями ингибитора и растворителем (акриловой кислотой). Этим методом вычислены E и k для реакций акриловой кислоты с 29 ингибиторами (фенолами и ароматическими аминами) и реакций кислорода с 5 семихинонными радикалами.