

ЗАВИСИМОСТЬ АНТИРАДИКАЛЬНОГО ДЕЙСТВИЯ 6-АМИНО-2,3-ДИГИДРО-2-ТИОКСО-4(1H)-ПИРИМИДИНОНА ОТ СТРОЕНИЯ ПЕРОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛА

Якупова Р.Л.^а, Сафарова Д.И.^б, Мурзагулова Э.И.^б, Сафиуллин Р.Л.^а

^аУфимский Институт химии - обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук. Российская Федерация. Уфа

^бКафедра технической химии и материаловедения. Инженерный факультет. Башкирский государственный университет. Российская Федерация. Уфа

Условия проведения кинетического эксперимента

Субстрат/растворитель – 1,4-диоксан, метилолеат (RH)

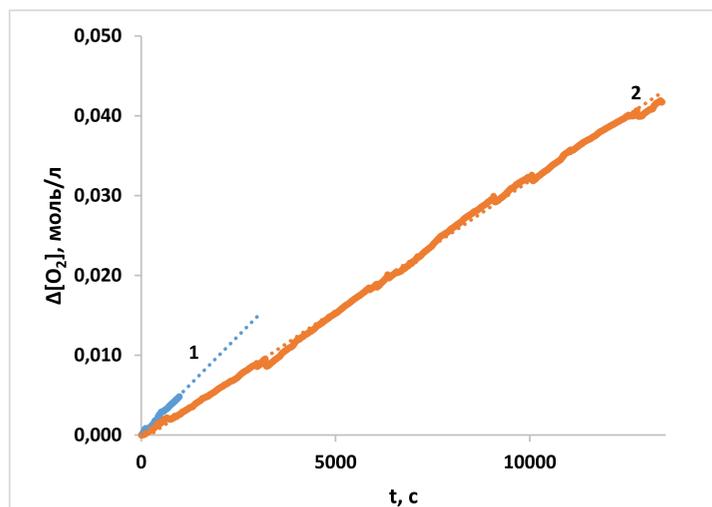
Инициатор – 2,2'-азо-бис-изобутиронитрил,

2,2'-азобис(2-метилпропионамидин) дигидрохлорида, 333 К

Цепная реакция жидкофазного окисления органических соединений (RH), начальный период



Кинетическая кривая поглощения кислорода в процессе окисления метилолеата, ингибированного ТАУ



[RH] = 2.5 моль/л, $w_i = 6.9 \cdot 10^{-8}$ моль·л⁻¹·с⁻¹, [InH] = 0 (1), $3.5 \cdot 10^{-3}$ (2) моль/л, 333 К

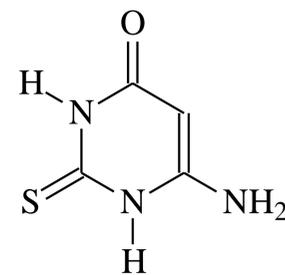
Для расчета эффективной константы скорости реакции fk_7 применяли уравнение

$$w = \frac{k_2 \cdot [\text{RH}] \cdot w_i}{fk_7 [\text{InH}]}$$

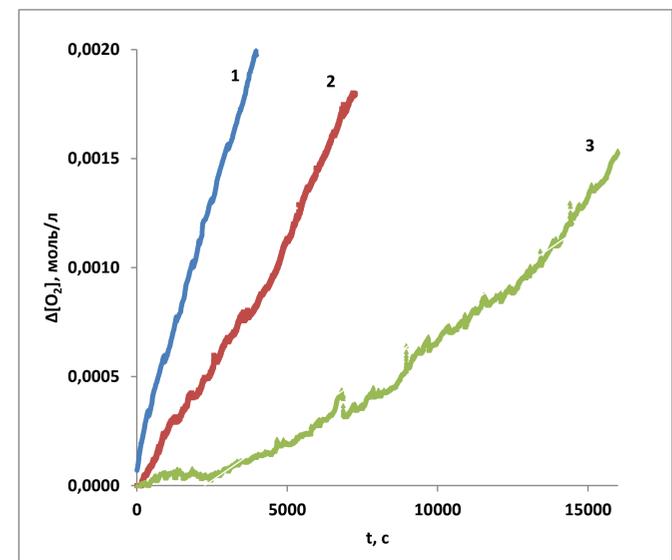
[ТАУ], моль/л	w, моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹	fk_7
$1.6 \cdot 10^{-3}$	$3.3 \cdot 10^{-6}$	171
$2.1 \cdot 10^{-3}$	$3.9 \cdot 10^{-6}$	115
$3.2 \cdot 10^{-3}$	$2.9 \cdot 10^{-6}$	99

$fk_7 = \sim 130$ л·моль⁻¹·с⁻¹
[метилолеат] = 2.5 моль/л, $w_i = 6.9 \cdot 10^{-8}$ моль·л⁻¹·с⁻¹, 333 К

6-амино-2,3-дигидро-2-тиоксо-4(1H)-пиримидинон (ТАУ) - InH

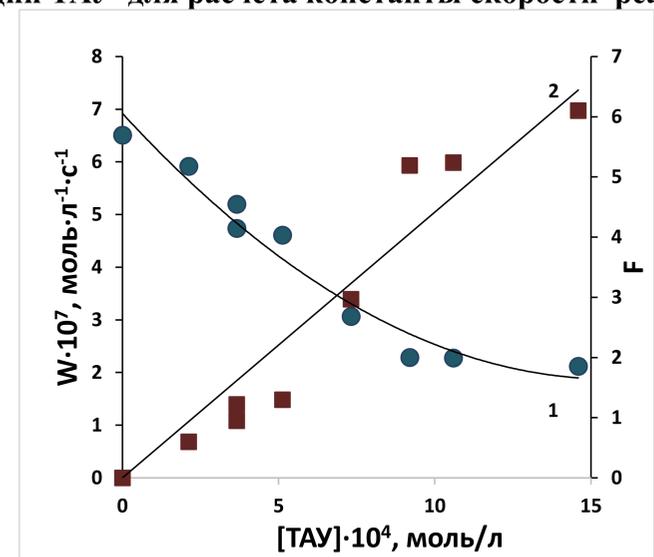


Типичные кинетические кривые поглощения кислорода в процессе окисления 1,4-диоксана, ингибированного ТАУ



[RH] = 6.6 моль/л, $w_i = 1.1 \cdot 10^{-7}$ моль·л⁻¹·с⁻¹, 333 К
[InH] = $5.1 \cdot 10^{-4}$ (1), $7.5 \cdot 10^{-4}$ (2), $14.6 \cdot 10^{-4}$ (3) моль/л,

Обработка зависимости скорости окисления 1,4-диоксана от концентрации ТАУ для расчета константы скорости реакции fk_7



$fk_7 = (4.5 \pm 0.3) \cdot 10^4$ л·моль⁻¹·с⁻¹
[1,4-диоксан] = 6.6 моль/л, $w_i = 1.1 \cdot 10^{-7}$ моль·л⁻¹·с⁻¹, 333 К