

TƏBİƏT ELMLƏRİ NATURAL SCIENCES

DOI: <https://doi.org/10.36719/2789-6919/55/128-135>

Xuraman Hacıəhmədzaadə

M.F.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-Üzvi Kimya İnstitutu
texnika üzrə fəlsəfə doktoru
<https://orcid.org/0009-0008-2495-6783>
heyat_mm@mail.ru

Qoşqar Əliyev

M.F.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-Üzvi Kimya İnstitutu
texnika üzrə fəlsəfə doktoru
<https://orcid.org/0000-0002-2237-3444>
chemproblem@mail.ru

Gülnarə Quliyeva

M.F.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-Üzvi Kimya İnstitutu
<https://orcid.org/0009-0005-2392-9423>
gulnare.guliyeva.30121962@gmail.com

Lalə İbrahimova

M.F.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-Üzvi Kimya İnstitutu
<https://orcid.org/0009-0000-3371-0197>
ibrahimovalala1969@gmail.com

Təranə Əsgərova

M.F.Nağıyev adına Kataliz və Qeyri-Üzvi Kimya İnstitutu
<https://orcid.org/0009-0000-9743-8380>
askerovaterane4@gmail.com

Poliizobutilenin polyar manomer olan vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının kinetik parametrləri

Xülasə

Məqalədə poliizobutilenin vinilasetat polyar monomeri ilə 20-60°C temperaturda $AlCl_3$ katalizatorunun iştirakı ilə modifikasiya olunaraq sopolimerin alınması prosesinin riyazi modeli və parametrlərinin hesablanması üzrə aparılmış tədqiqatların nəticələri əks etdirilmişdir. Bundan istifadə edərək reaksiya şəraitinin poliizobutilenin vinilasetatla təsirinin tədqiqinin nəticələri verilmiş, həmin reaksiyaların kinetik tənliklərinin çıxarılması hesablanmış, parametrlərin qiymətləri, prosesin riyazi modelləşdirilməsi sahəsindəki araşdırılmaların analizi əks etdirilmişdir. Bu üsul çoxlu təcrübələrin sayının, vəsaitin və vaxtın ixtisarlaşdırılmasına və həmçinin də təcrübi göstəricilər hüdudunda vinilasetatla poliizobutilenin bizi qane edən ixtiyari nisbətini almağa imkan verir. $[VA]$ -in və $[PIB]$ -in sopolimerdəki qatılıqları nisbətinin temperaturdan, reaksiya müddətindən, PIB -in, VA -ın və katalizatorun ($AlCl_3$) ilkin məhluldakı qatılıqlarından asılılığı qanunauyğunluqlarını analiz edərək həmin parametrlər arasındakı funksional asılılıq tərtib edilmişdir. Tərtib edilmiş kinetik model və eksperiment materialları əsasında PIB -nin VA -la modifikasiyası reaksiyasının kinetik parametrləri hesablanmışdır. 2.23% (kütlə) katalizator miqdarına 20,40,60°C temperaturlarına uyğun reaksiyaların sürət sabitləri 0,4400, 0,4661 və 0,5423s⁻¹ alınmışdır. Həmin temperaturalara və katalizatorun 0.76% (kütlə) miqdarına uyğun sürət sabitləri isə 0,2300, 0,2334, 0,2442s⁻¹ alınmışdır. Katalizator miqdarının həmçinin aktivlik enerjisinə təsiri də tədqiq edilmişdir; $E=4190$ C/mol.($AlCl_3=2,23\%$) (kütlə) və $E=5206$ C/mol.($AlCl_3=0,76\%$) reaksiyanın asanlıqını göstərir.

Acar sözlər: poliizobutilen, vinilasetat polyar polimeri, $AlCl_3$ katalizatoru, sopolimer, temperatur

Khuraman Hajiahmadzadeh

M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
PhD in Technical Science
<https://orcid.org/0009-0008-2495-6783>
heyat_mm@mail.ru

Goshgar Aliyev

M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
PhD in Technical Science
<https://orcid.org/0000-0002-2237-3444>
chemproblem@mail.ru

Gulnara Guliyeva

M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
<https://orcid.org/0009-0005-2392-9423>
gulnare.guliyeva.30121962@gmail.com

Lala Ibrahimova

M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
<https://orcid.org/0009-0000-3371-0197>
ibrahimovalala1969@gmail.com

Tarana Askerova

M.F. Nagiyev Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry
<https://orcid.org/0009-0000-9743-8380>
askerovaterane4@gmail.com

Kinetic Parameters of the Modification Reaction of Polyisobutylene with Vinyl acetate, a Polar Monomer

Abstract

The article presents the results of the mathematical model and calculations of the parameters of the process of obtaining a copolymer by modifying polyisobutylene with a polar monomer of vinyl acetate at a temperature of 20-60°C in the presence of an AlCl₃ catalyst. Using this, the results of the study of the effect of reaction conditions on polyisobutylene with vinyl acetate are given, the kinetic equations of these reactions are calculated, the values of the parameters are calculated, and the analysis of studies in the field of mathematical modeling of the process is reflected. This method allows us to reduce the number of experiments, resources and time, and also to obtain an arbitrary ratio of vinyl acetate to polyisobutylene that is satisfactory to us within the limits of experimental indicators. The dependence of the ratio of the concentrations of [VA] and [PIB] in the copolymer on temperature, reaction time, and the concentrations of PIB, VA and the catalyst (AlCl₃) in the initial solution is analyzed, and the functional dependence between these parameters is formulated. Based on the developed kinetic model and experimental materials, the kinetic parameters of the modification reaction of PIB with VA were calculated. The rate constants of the reactions corresponding to the temperatures of 20, 40, 60°C for a catalyst amount of 2.23% (mass) were obtained as 0.4400, 0.4661 and 0.5423h⁻¹. The rate constants corresponding to the same temperatures and a catalyst amount of 0.76% (mass) were obtained as 0.2300, 0.2334, 0.2442 h⁻¹. The effect of the catalyst amount on the activation energy was also studied; E=4190 C/mol.(AlCl₃=2.23%) (mass) and E=5206 C/mol.(AlCl₃=0.76%) indicate the ease of the reaction.

Keywords: polyisobutylene, vinyl acetate polar polymer, AlCl₃ catalyst, copolymer, temperature

Giriş

Polimerin sintezinin yeni texnoloji proseslərinin işlənib hazırlanması və optimallaşdırılması zamanı reaktorun iş rejiminin hesablanması əsasını prosesin kinetik modelinin analizi təşkil edir. Kinetik model isə reaksiyanın sürətini və əmələ gələn polimerin strukturunu zamana və məkana görə təsvir edir. Zamana və məkana görə dəyişmə temperaturun, təzyiqin, reagentlərin qatılığının və başqa amillərin təsiri ilə baş verir.

Bu sahədə ən çətin məqamlardan biri kinetik modelin işlənib hazırlanmasıdır. Model şəraitin geniş intervalında təcrübi göstəricilər adekvat təsvir etməlidir. Son illərə qədər analizin kinetik üsulu reaksiyanın kimyəvi mexanizmini müəyyən etmək üçün laboratoriya üsulu kimi istifadə edilirdi, özü də qoyulan məsələdən asılı olaraq, adətən, reaksiyanın hər hansı bir mərhələsi ayrılırdı. Təcrübənin şəraitinin seçilməsi, həmçinin, qoyulan məsələ tərəfindən müəyyənləşdirilirdi. Adətən, reaksiyanın gedisinin kinetik oblastına sintezin duruldurulmuş məhlullarda periodik rejiminə baxılırdı (Ablonin, 2001; Mirzai, və digərləri, 2008).

Sənaye proseslərinin kinetik metodla analizinə və onların tədqiqinə axırıncı onilliklərdə başlanmışdır. İndiki mərhələdə məhsulun keyfiyyətinin yüksək olması, böyük gücə malik aqreqatların yaranmasına tələbat, hesablama texnikasının inkişafı və məhsulların strukturunun analizi metodlarının inkişafının yüksəlməsi qeyd edilən məsələlərin həllinin stimulu olmuşdur.

Polimerləşmə proseslərinin kinetik sxemlərinin hesablanması obyekt reaksiyanın sürəti, orta molekulyar kütlələri və molekulyar kütlələrinə görə paylanması birinci dövrlərinin nisbəti hesab edilir. Ümumiyyətlə, molekulyar quruluşunun başqa parametrləri də nəzərə alın bilər, məsələn, tərkib, sopolimerlər üçün kompozisiya qeyri-bircinsliliyi və s. (Səlimova, 2009; Ağakışiyeva və Əliyeva, 2007; Naibova, 2014).

Reaksiya sürətinin, monomerlərin konveksiyasının və polimerin strukturunun parametrlərinin qiymətlərinə birgə baxılması reaktorun optimal konfigurasiyası və sintezin optimal rejiminin seçilməsinin həlli məsələsini qoymağa imkan verir. Prosesin gedisini müəyyən edən parametrləri iki qrupa bölmək münasibdir: diskret parametrlər və kəsilməz variasiya edilən parametrlər. Diskret parametrlər reagentlərin faza halını, reaksiyanın mexanizmini (molekulyar kütləsinin tənzimlənməsi üsulu və insiator tipi də daxil olmaqla) müəyyən edirlər. Kəsilməz variasiya edilən parametrlər reagentlərin qatılığını, temperaturu, təzyiqi axının xətti sürətini reaktorun xətti ölçülərini və həcmi müəyyən edirlər (Bilalov, və digərləri, 2002; Əzizov, 2004).

Optimallaşmaya adi yanaşma parametrlərinin qiymətlərinin təyin edilməsi zamanı ondan ibarət olur ki, birinci qrup parametrləri sabit saxlamaqla, ikinci qrup parametrlər seçilir. İkinci qrupun məhdudiyyətləri ümumi halda qatılığın, temperaturun, təzyiqin, əlavə reaksiyaların getməsi imkanı və texniki mülahizələrin limit qiymətləri üçün prosesin termodinamikası ilə təyin edilir. Lakin hətta bu halda da parametrlərin bütün qiymətlərini seçmək və əhatə etmək mümkün olmur (Jantas, 2012; Kakhramanov, və digərləri, 2017).

Tədqiqat

Təcrübi hissə: Poliizobutilenin (PIB) vinilasetat (VA) ilə modifikasiyası aşağıdakı şərtlər altında aparılmışdır: katalizatorun ($AlCl_3$) konsentrasiyası 0,76–2,23% (kütlə), reaksiya müddəti 0,0833÷1,5 saat, temperatur 5÷60°C, ilkin konsentrasiya $[AN]_0$ 3÷32% (kütlə), ilkin konsentrasiya [PIB 8% (məhlul qarışığının kütləsi). Həllədiçi – heksan (Savelyanov, 2007; Hacıəhmədov, 2017).

PIB-nin vinilasetat ilə modifikasiyası reaksiyasının kinetik tədqiqatlarının eksperimental materialı Cədvəl 1 və 2-də təqdim edilmişdir.

Bütün reaksiya variantları üçün katalizator $AlCl_3$ və həllədiçi heksan istifadə edilmişdir, temperatur 20, 40, 60°C olmuşdur.

Təhlil üçün nümunələr prosesin başlanmasından 5 dəqiqə sonra, sonuncular isə 90 dəqiqədən sonra başladı. Bu zaman tarazlıq yaranır.

Bütün 3 temperatur üçün məlumatlar eyni eksperimental şəraitdə, yəni eyni ilkin VA və PIB kəmiyyətləri, reaksiya məhsulunun təhlili vaxtları və katalizator və həllədicinin miqdarları altında istifadə edilmişdir.

Katalizatorun miqdarının kinetik parametrlərə təsirini öyrənmək üçün iki variant üzrə hesablamalar aparılmışdır: 1) 2,23 (cədvəl) və 0,76 (cədvəl 2) qarışığın miqdarından $AlCl_3$ kütləsi. Bütün digər şərtlər bərabərdir.

Cədvəl 1-dən aydın olur ki, onun ilkin miqdarı ilə müqayisədə PIB məhvinin ən böyük faizi 3,77% (mol.) təşkil edir ki, bu da $[VA]_s / [PIB]_0 \times 100\%$ (mol.) nisbətindən hesablanır. Bu dəyər 60°C temperaturda, 1,5 saatdan sonra əldə edilir. Əvvəldən və katalizatorun miqdarı 0,714 q (2,23%) bərabərdir. Bu zaman ilkin miqdarından 1,44% (mol) vinilasetat sərf olunur (Berengarten, və digərləri, 2007; Kondaurov, 2005).

Cədvəl 2-dən aydın olur ki, katalizatorun miqdarının 0,714 q-dan 0,243 q-a (qarışıq kütləsinin 0,76%) azalması ilə PIB yalnız 2,39% (mol) məhv edilir və VA istehlakı ilkin miqdarının 0,92% (mol) təşkil edir.

Cədvəl 1.

PIB-in vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının kinetik göstəriciləri: katalizator – $AlCl_3$ -ün miqdarı 0.714q (qatışıq miqdarının 2.23%-i), həlledici – heksanın miqdarı 23.92q (74.77%); $[VA]_0 = 0.15q/q$; $[PIB]_0 = 0.08 q/q$; reaktorda qatışıq miqdarı 32q.

Sıra №	Temperatur, °C	Zaman, saat	$[VA]_s, q/q$	$k, saat^{-1}$
1	20	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0004281	0.4663
3	– " –	0.1667	0.0008625	0.4105
4	– " –	0.333	0.001744	0.4254
5	– " –	0.5	0.002641	0.4592
6	– " –	1.5	0.003153	0.1772
1	40	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0004687	0.4379
3	– " –	0.1667	0.0009437	0.4397
4	– " –	0.333	0.001909	0.4898
5	– " –	0.5	0.002899	0.4972
6	– " –	1.5	0.003456	0.1962
1	60	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0005156	0.5457
3	– " –	0.1667	0.001041	0.5481
4	– " –	0.333	0.002075	0.5253
5	– " –	0.5	0.003200	0.5502
6	– " –	1.5	0.003894	0.2238

Reaksiyanın bütün variantları üçün katalizator – $AlCl_3$ -dən, həlledici kimi isə heksandan istifadə edilmişdir.

Kinetik parametrlərin hesablanması üçün reaksiyalar 20, 40, 60°C temperaturalarda aparılmışdır. Kinetik parametrlərin ilkin fiksə edilmiş zamanı reaksiyanın başlanmasından 5 dəq. sonra qeydə alınmışdır. Reaksiya gedişinin tarazlıq müddəti 90 dəq. təşkil etmişdir. Hər bir temperatur üçün reaksiya məhsulu olan sopolimer reaksiya başlanğıcından 5, 10, 20, 30 və 90 dəq. sonra analiz edilmişdir (Timofeyev, və digərləri, 2010).

Hər üç temperatur üçün eyni şəraitdə alınmış təcrübə göstəricilərindən istifadə edilmişdir, yəni VA və PIB-in eyni ilkin miqdarı, reaksiya məhsulunun analiz edilmə müddətləri, eyni katalizator miqdarı və həlledici götürülmüşdür. Katalizator miqdarının kinetik parametrlərə təsirini aydınlaşdırmaq məqsədilə hesablamalar iki variantda aparılmışdır: 1) katalizatorun miqdarı ilkin qarışığın 2.23%-i (kütl.) təşkil edir (cədvəl 1); 2) katalizatorun miqdarı ilkin qarışığın 0.76%-i (kütl.) təşkil edir.

Cədvəl 2.

PİB-in vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının kinetik göstəriciləri: katalizator – $AlCl_3$ -ün miqdarı 0.243q (qatışıq miqdarının 0.76%-i), həlledici – heksanın miqdarı 24.397q (76.24%); $[VA]_0 = 0.15q/q$; $[PİB]_0 = 0.08 q/q$; reaktorda qatışıqın miqdarı cəmi 32q.

Sıra №	Temperatur, °C	Zaman, saat	$[VA]_c$, q/q	k , saat ⁻¹
1	20	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0001844	0.2275
3	– " –	0.1667	0.0003375	0.2234
4	– " –	0.333	0.0007437	0.2390
5	– " –	0.5	0.001119	0.2300
6	– " –	1.5	0.001616	0.0927
1	40	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0002156	0.2434
3	– " –	0.1667	0.0004375	0.2438
4	– " –	0.333	0.0008781	0.2163
5	– " –	0.5	0.001325	0.2303
6	– " –	1.5	0.001881	0.1051
1	60	0	–	–
2	– " –	0.0833	0.0002531	0.1934
3	– " –	0.1667	0.0005094	0.2619
4	– " –	0.333	0.001025	0.2690
5	– " –	0.5	0.001550	0.2526
6	– " –	1.5	0.002116	0.1215

Bunlara uyğun olaraq həlledicinin miqdarı müəyyənləşdirilir. Qalan şərtlər dəyişməz qalır.

Cədvəl 1-dən göründüyü kimi, PİB-in ən böyük destruksiya faizi başlanğıc qiymətinə nisbətən 3.77% (mol) təşkil edir (hesablamalar $[VA]_c/[PİB]_0 \cdot 100\%$ (mol) nisbətindən alınmışdır). Bu göstərici temperaturun 60°C, reaksiya zamanının 1.5 saat. Katalizatorun 0.714 q (2.23%) qiymətlərində alınmışdır. Bu halda vinilasetat ilkin miqdarının cəmi 1.44% (mol) qədər sərf olunur (İbragimov, və digərləri, 2005).

Cədvəl 2-dən görünür ki, katalizatorun miqdarının 0.714 q-dan 0.243 q-a qədər azalması ilə PİB cəmi 2.39% (mol)-a qədər destruksiya uğrayır. Bu halda VA-ın sərfi cəmi 0.92% (mol) təşkil edir (digər parametrlər sabit saxlanılır).

PİB-in vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının kinetik modelini tərtib edək. Nəzərə alaq ki, $t=0$ zamanda reaksiya sistemində vinilasetatın qatılığı $[VA]_0$ q/q, poliizobutilenin qatılığı isə $[PİB]_0$ q/q olmuşdur. t zamanında $[VA]_c$ q/q qədər vinilasetat və $[PİB]_c$ q/q miqdarında isə poliizobutilen reaksiyaya girir. Bu halda reaksiyaya girməmiş vinilasetat $[VA]_0 - [VA]_c$ miqdarında və poliizobutilen $[PİB]_0 - [PİB]_c$ miqdarında sistemdə qalır. Onda PİB-in vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının sürətini aşağıdakı tənliklə ifadə etmək olar:

$$\frac{d([VA]_0 - [VA]_c)}{dt} = k([VA]_0 - [VA]_c)([PİB]_0 - [PİB]_c) \quad (1)$$

Bu tənliyi aşağıdakı kimi də yazmaq olar:

$$\frac{d[VA]_c}{dt} = k([VA]_0 - [VA]_c)([PİB]_0 - [PİB]_c) \quad (2)$$

Burada $[VA]_0$, q/q – VA-ın reaksiya qarışığındakı ilkin miqdarı; $[PİB]_0$, q/q – PİB-in ilkin qarışıqdakı miqdarı; k , saat⁻¹ – PİB-in modifikasiyası reaksiyasının sürət sabiti; $[VA]_c$, q/q – VA-ın alınan məhsul –

sopolimerdəki miqdarı; $[PIB]_c$, q/q – PIB-in sopolimerdəki miqdarı (Timofeyev, və digərləri, 2010; Aliyev, və digərləri, 2023).

Başlangıç şərtləri nəzərə almaqla (3.16)-nın inteqralı aşağıdakı inteqralı verir:

$$k = \frac{1}{t} \cdot \frac{1}{[VA]_0 - [PIB]_0} \ln \frac{[PIB]_0 ([VA]_0 - [VA]_c)}{[VA]_0 ([PIB]_0 - [VA]_c)} \quad (3)$$

k -ni hesablamaq üçün göstəricilər 1 və 2 cədvəllərindən götürülmüşdür.

Hər bir fiksə edilmiş reaksiya zamanı və 20, 40, 60°C temperaturları üçün k -ların qiymətləri 1 və 2 cədvəllərində verilmişdir.

20°C temperaturu üçün k -nın orta qiyməti $\bar{k}_{20}=0.44$ saat⁻¹ miqdarında hesablanmışdır. Bu halda reaksiyanın 1.5 saatdan sonrakı tarazlıq halı üçün tapılmış k nəzərə alınmamışdır, ona görə ki, bu müddət ərzində reaksiyanın sürətini əks etdirən k kəskin düşür. 20°C temperaturda sürət sabitlərinin müxtəlif zamanlar üçün alınmış qiymətlərinin onların qiymətindən fərqlənməsi orta hesabla $\pm 4.5\%$ təşkil edir.

40⁰ və 60⁰C temperaturları üçün k -ların orta qiymətləri aşağıdakılardır: $\bar{k}_{40}=0.4661$ saat⁻¹, $\bar{k}_{60}=0.5423$ saat⁻¹. Sürət sabitlərinin orta qiyməti olan $\bar{k}$ -dan kənara çıxmasının orta xətası 40⁰ və 60⁰C temperaturları üçün uyğun olaraq ± 5.5 və $\pm 1.5\%$ təşkil etmişdir.

1. cədvəldən görüldüyü kimi, temperatur artdıqca reaksiyanın sürət sabitinin qiyməti artır, bu isə qanunauyğundur.

2. cədvəlinin göstəricilərindən istifadə edərək katalizatorun 0,76% götürülən halı üçün (yəni 1. cədvəldəkindən 3 dəfə az) reaksiyanın sürət sabiti təyin edilmişdir. Burada PIB-in VA-la modifikasiyası reaksiyasının sürət sabitinin orta qiyməti 20, 40, 60°C temperaturlarına uyğun olaraq $\bar{k}_{20}=0.2149$; $\bar{k}_{40}=0.2263$; $\bar{k}_{60}=0.2761$ saat⁻¹ alınmışdır.

Sürət sabitlərinin müxtəlif zamanlar üçün alınmış qiymətlərinin orta qiymətdən kənara çıxması orta hesabla uyğun olaraq ± 8.0 ; ± 20.2 ; $\pm 8.3\%$ alınmışdır. Bunu biz normal hal kimi qəbul edirik.

Katalizatorun müxtəlif qiymətlərində və digər amillərin sabit saxlandığı halda, alınmış sürət sabitlərinin orta qiymətlərinin müqayisəsi belə nəticəyə gəlməyə əsas verir ki, katalizatorun miqdarı reaksiya sürətinə əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərir. Məsələn, katalizatorun miqdarının qarışığın 0.76%-dən 2.23%-dək artırılması reaksiya sürətinin 20, 40, 60°C temperaturlarında uyğun olaraq 1.91; 2.00; 2.22 dəfə artmasına səbəb olur.

Üç temperatur üçün alınmış $\bar{k}$ -nın göstəricilərindən istifadə edərək və Arrenius tənliyi – $\bar{k} = A \exp[-E/(RT)]$ əsasında aktivlik enerjisi E və eksponensial önü vurğu A -nı təyin edək. Aşkardır ki, $\ln \bar{k} = \ln A - \frac{1}{RT} \cdot E$ olur (Yusubov, 2015; Aynshteyna, 2001).

Reaksiyanın bizim baxdığımız şəraitinə uyğun olaraq Arrenius tənliyi parametrlərinin ölçüləri isə aşağıdakı kimi olur: $\bar{k}$, saat⁻¹; A , saat⁻¹, E , C/mol; R , C·mol⁻¹·K⁻¹; T , K.

1. və 2. cədvəllərindən $\bar{k}$ -nın qiymətlərini və universal qaz sabiti $R= 8.3143$ C·mol⁻¹·K⁻¹ qiymətini Arrenius tənliyində yerinə yazsaq, ən kiçik kvadratlar üsulu ilə hesablamalar apararaq 3. cədvəldəki göstəriciləri almışıq.

Cədvəl 3.

Aktivlik enerjisi və eksponensial önü vurğuların hesablanması nəticələri:

T, K	$\bar{k}$, saat ⁻¹	$\ln \bar{k}$	R, C/mol·K	1/RT, mol/C	A, saat ⁻¹	E, C/mol
AlCl₃ = 2.23%						
293	0.4400	- 0.8210	8.3143	4.105·10 ⁻⁴	2.4168	4190.8
313	0.4661	- 0.7633	8.3143	3.843·10 ⁻⁴	2.4168	4190.8
333	0.5423	- 0.6119	8.3143	3.612·10 ⁻⁴	2.4168	4190.8
AlCl₃ = 0.76%						
293	0.2300	- 1.4775	8.3143	4.105·10 ⁻⁴	1.2162	5206
313	0.2334	- 1.4550	8.3143	3.843·10 ⁻⁴	1.2162	5206
333	0.2442	- 1.4098	8.3143	3.612·10 ⁻⁴	1.2162	5206

3. cədvəldən göründüyü kimi, aktivlik enerjisi böyük qiymət almır. Bu isə onu göstərir ki, PİB-in vinilasetatla modifikasiyası reaksiyası 20-60°C temperatur intervalında və katalitik proses şəraitində yüngül keçir.

Nəticə

20°C temperaturu üçün k -nın orta qiyməti $\bar{k}_{20}=0.44$ saat⁻¹ miqdarında hesablanmışdır. 20°C temperaturda sürət sabitlərinin müxtəlif zamanlar üçün alınmış qiymətlərinin onların qiymətindən fərqlənməsi orta hesabla $\pm 4.5\%$ təşkil edir. 40° və 60°C temperaturları üçün k -ların orta qiymətləri aşağıdakılardır: $\bar{k}_{40}=0.4661$ saat⁻¹, $\bar{k}_{60}=0.5423$ saat⁻¹. Sürət sabitlərinin orta qiyməti olan $\bar{k}$ -dan kənara çıxmasının orta xətası 40° və 60°C temperaturları üçün uyğun olaraq ± 5.5 və $\pm 1.5\%$ təşkil etmişdir.

1. cədvəldən göründüyü kimi, temperatur artdıqca reaksiyanın sürət sabitinin qiyməti artır, bu isə qanunauyğundur.

2. cədvəlinin göstəricilərindən istifadə edərək katalizatorun 0,76% götürülən halı üçün (yəni 1. cədvəldəkindən 3 dəfə az) reaksiyanın sürət sabiti təyin edilmişdir. Burada PİB-in VA-la modifikasiyası reaksiyasının sürət sabitinin orta qiyməti 20, 40, 60°C temperaturlarına uyğun olaraq $\bar{k}_{20}=0.2149$; $\bar{k}_{40}=0.2263$; $\bar{k}_{60}=0.2761$ saat⁻¹ alınmışdır.

1. və 2. cədvəllərindən $\bar{k}$ -nın qiymətlərini və universal qaz sabiti $R=8.3143$ C·mol⁻¹·K⁻¹ qiymətini Arrenius tənliyində yerinə yazsaq, ən kiçik kvadratlar üsulu ilə hesablamalar apararaq 3. cədvəldəki göstəriciləri almışıq.

Beləliklə, tədqiqatlar əsasında belə nəticəyə gəlirik ki, PİB-nin vinilasetatla modifikasiyası reaksiyasının kinetik parametrlərinin qiymətləri prosesin gedişinə uyğundur. Aktivlik enerjisinin qiymətləri – $E=4190.8$ C/mol ($\text{AlCl}_3=2.23\%$ (kütl.)) və $E=5206$ C/mol ($\text{AlCl}_3=0.76\%$ (kütlə)) qənaətbəxşdir.

Ədəbiyyat

1. Aliyev, G. S., Rustamli, Kh. M., Hajiahmedzade, Kh. Sh. (2023). Calculation of Kinetic and Diffusion Coefficients of the Process of Surfactant Adsorption in Oil-Bearing Porous Rocks. *Math. Models Comput. Simul.*, 15, 47.
2. Ablonin, B.Ye. (2001). *Osnovy khimicheskogo proizvodstva*. Khimiya.

3. Aynshyteyna, V.G. (2002). *Obshchiy kurs protsessov i apparatov khimicheskoy tekhnologiy*. Logos.
4. Ağakışiyeva, M.Ə., Əliyeva, S.F. (2007). *Ümumi kimya texnologiyası*. ADNA-nın mətbəəsi.
5. Berengarten, M.G., Bondareva, T.I., Kutepov, A.M. (2007). *Obshaya khimicheskaya tekhnologiya*. Uchebnik dlya vuzov. Akademkniga.
6. Bilalov, Y.M., Hüseynov, F.İ., Abbasova, L.M. (2002). *Modifikasiya edilmiş polimer kompozisiyaları*. Elm.
7. Əzizov, A.Ə., Alosmanov, R.M., Əkbərov, O.H. (2004). *Polimer kompozisiya materialları*. Elm.
8. Hacıəhmədzaadə, X.Ş. (2017). *Poliizobutilenin katalitik destruksiyası, modifikasiyası proseslərinin tədqiqi, riyazi modelləşdirilməsi və parametrlərinin hesablanması*. Dissertasiya.
9. İbragimov, CH.SH., Novruzova, F.A., Gadzhiakhmedzade, KH.SH., Khalafov, F.R. (2005). Raschety kineticheskikh parametrov modifikatsiya poliizobutilena vinilatsetatom. *Azerb.khim. zhur.* 3, 66–69.
10. Kakhramanov, N.T., Kasumova, G.SH., Osipchik, V.S., Gadzhiyeva, R.SH. (2017). Iznosostoykiye polimernyye materialy. Struktura i svoystva. *Plasticheskiye massy*, 11-12, 8–15.
11. Kondaurov, B.P. (2005). *Obshchaya khimicheskaya tekhnologiya: uchebnoye posobiye dlya stud.vyssh.ucheb.zavedeniy*. Akademiya.
12. Mirzai, Dzh.I., İbragimov, CH.SH., Gashimov, F.A., Yusubov, F.V. (2008). Planirovaniye eksperimenta protsessa kataliticheskogo prevrashcheniya etilena na vysokokremnezemnom tseolite. *Voprosy khimii i khimicheskikh tekhnologiy*, 3, 37–39.
13. Naibova, T.M. (2014). Yüksək molekullu birləşmələrin kimyası texnologiyası. Çarşıoğlu.
14. Savelyanov, V.P. (2007). *Obshchaya khimicheskaya tekhnologiya polimerov*. Khimiya.
15. Səlimova, N.Ə., Şahpələngova, B.Ş. (2009). *Yeni ekoloji təhlükəsiz proseslər*. ADNA-nın nəşri.
16. Timofeyev, V.S., Serafimov, L.A., Timoshenko, A.V. (2010). *Printsipy tekhnologii osnovnykh organicheskikh i neftekhimicheskikh sintezov: dlya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Khimicheskaya tekhnologiya*. Vısshaya shkola.
17. Yusubov, F.V. (2015). *Kimya texnologiyası proseslərinin riyazi modelləşdirilməsi və optimallaşdırılması*. Elm.

Daxil oldu: 03.11.2025

Qəbul edildi: 07.02.2026