

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ В ВОЗДУХЕ

А. А. Крупнов¹, М. Ю. Погосбекян²

Аннотация: Рассмотрены начальные стадии самовоспламенения триэтилалюминия (ТЭА) $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ на основе кинетического механизма, предложенного в работах Кузнецова и др. (2019). Проведен квантово-механический расчет структур и энергетических характеристик всех участвующих в процессах молекулярных комплексов. Получены теплоты реакций и найдены энергии связей внутри комплексов, определяющие основные этапы протекания реакций. На основе анализа энергетических характеристик уточнен механизм распада триэтилалюминия при внедрении в него молекулы кислорода. Показано, что приоритетным каналом распада комплекса триэтилалюминий–кислород является разрыв связи между атомами кислорода. При этом суммарный процесс внедрения и распада является экзотермическим и идет с выделением 64,27 кДж/моль, что и объясняет процесс самовоспламенения.

Ключевые слова: триэтилалюминий; самовоспламенение; реакции внедрения и распада; энергия связи; теплота реакции; квантовая механика

DOI: 10.30826/CE21140409

Литература

1. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А. Расчет стандартной энтальпии образования и теплоты полного сгорания триэтилалюминия в водяном паре и в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 2. С. 10–13.
2. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А. Кинетическая модель окисления и самовоспламенения триэтилалюминия в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 3. С. 91–97.
3. Кузнецов Н. М., Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М., Стороженко П. А. Кинетическая модель и расчет самовоспламенения микрокапель триэтилалюминия в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 4. С. 104–110.
4. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al. Gaussian 09. — Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc., 2009.
5. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev., 1964. Vol. 136. No. 3B. P. B864–B871.
6. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev., 1965. Vol. 140. No. 4A. P. A1133–A1138.
7. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle–Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B, 1988. Vol. 37. No. 2. P. 785–789.
8. Kendall R. A., Dunning T. H., Harrison R. J. Electron affinities of the first-row atoms revisited. Systematic basis sets and wave functions // J. Chem. Phys., 1992. Vol. 96. No. 9. P. 6796–6806.
9. Johnson R. D., III. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database. NIST Standard Reference Database No. 101. Release 18, 2016. <http://cccbdb.nist.gov/>.
10. Kroupnov A. A., Pogosbekian M. J. Detailed mechanism of exchange reactions $\text{CO} + \text{N}$, $\text{CN} + \text{O}$ and $\text{NO} + \text{C}$ on the $4A''$ potential energy surface at high temperature // Chem. Phys., 2019. Vol. 523. P. 172–178.
11. Kovalev V. L., Krupnov A. A., Pogosbekyan M. Yu., Sukhanov L. P. Analysis of heterogeneous recombination of oxygen atoms on aluminum oxide by methods of quantum mechanics and classical dynamics // Acta Astronaut., 2011. Vol. 68. No. 7–8. P. 686–690.

Поступила в редакцию 15.11.2021

¹НИИ механики Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, kroupnov@imec.msu.ru

²НИИ механики Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, pogosbekian@imec.msu.ru