

Научная статья
УДК 544.3; 544.4
doi: 10.17223/24135542/38/10

Вероятностный метод определения скорости химической реакции

Виталий Васильевич Гузеев

*Северский технологический институт – филиал Национального
исследовательского ядерного университета «МИФИ», Северск, Россия
vvguzeev@mephi.ru*

Аннотация. Статья посвящена установлению связи скорости химической реакции с изменением термодинамического потенциала реагирующей системы. В процессе химической реакции как неравновесного процесса диссоциация молекулы происходит с поглощением энергии, а образование новых связей сопровождается выделением энергии. Скорость химической реакции определяется количеством активных молекул, у которых кинетическая энергия выше их энергии связи (потенциальной энергии) в структуре. Полученные уравнения химической кинетики применимы для описания гомогенных и гетерогенных реакций независимо от агрегатного и фазового состояния веществ. Выбранная модель позволяет определить применимость, структуру синтезированных веществ, порог начала и окончания химической реакции.

Ключевые слова: химическая кинетика, термодинамика, энергия связи, потенциальная энергия, скорость химической реакции, вероятность

Для цитирования: Гузеев В.В. Вероятностный метод определения скорости химической реакции // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2025. № 38. С. 120–131. doi: 10.17223/24135542/38/10

Original article
doi: 10.17223/24135542/38/10

Probabilistic method for determining the rate of a chemical reaction

Vitaliy V. Guzeev

*Seversk Technological Institute – branch of the National Research
Nuclear University “MEPhI”, Seversk, Russian Federation, vvguzeev@mephi.ru*

Abstract. The article is devoted to establishing the relationship between the rate of a chemical reaction and a change in the thermodynamic potential of the reacting system. In the process of a chemical reaction, as a nonequilibrium process, the dissociation of a molecule occurs with the absorption of energy, and the formation of new bonds is accompanied by the release of energy. The rate of a chemical reaction is determined by the number of active molecules whose kinetic energy is higher than their

binding energy (potential energy) in the structure. The obtained equations of chemical kinetics are applicable to describe homogeneous and heterogeneous reactions, regardless of the aggregate and phase state of substances. The chosen model makes it possible to determine the applicability, the structure of synthesized substances, and the threshold for the start and end of a chemical reaction.

Keywords: chemical kinetics, thermodynamics, binding energy, potential energy, chemical reaction rate, probability

For citation: Guzeev, V.V. Probabilistic method for determining the rate of a chemical reaction. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Chimia – Tomsk State University Journal of Chemistry*, 2025, 38, 120–131. doi: 10.17223/24135542/38/10

Введение

В настоящее время химическая кинетика делится на две отдельные области: гетерогенную и гомогенную кинетику.

Скорость химической реакции определяется уравнением закона действующих масс [1–4]: скорость химической реакции двух реагирующих веществ А и В определяется по одному веществу.



Здесь ΔH – тепловой эффект (энтальпия).

$$dC_A/d\tau = -kC_a^a C_b^b = kC_c^c C_d^d. \quad (2)$$

Считается, что по теории активных столкновений могут быть моно-, би- и тримолекулярные реакции по количеству одновременно сталкивающихся веществ [3, 4]. Практического подтверждения этому не установлено.

Гетерогенная кинетика подразделяется по типу фаз взаимодействующих веществ: твердое–твердое; твердое–жидкое; твердое–газ; жидкое–газ. Уравнения гетерогенной кинетики устанавливают соответствие степени превращения вещества с продолжительностью процесса, т.е. со временем. Наиболее полно уравнения гетерогенной кинетики представлены в монографиях [5, 6]. В большинстве случаев движущей силой процесса считают диффузию. Коэффициент диффузии определяется экспериментально и является малоинформативной величиной для сложных химических процессов.

Термодинамические уравнения устанавливают начало и конец процесса. Изменение термодинамических функций не зависит от времени и пути процесса. В химическом процессе от одного равновесного состояния до другого происходит изменение энергетических параметров, что отображается законом сохранения энергии:

$$\Delta H = \Delta G + \Delta S \Delta T. \quad (3)$$

Энтальпия системы равна сумме кинетических энергий молекул и сумме энергий связи атомов в молекуле:

$$H = \sum K + \sum n E_i. \quad (4)$$

Кинетическая энергия содержит параметр – время – и определяет в сумме затраченное время на n перемещений. Используя изменение энтальпии от одного равновесного состояния до другого по уравнению (3), по уравнению (4)

можно вычислить время, затраченное на n перемещений. Количество перемещений может представлять механизм и путь химической реакции.

Если $\Delta G \leq 0$, а $\Delta S \geq 0$, то химическая реакция протекает самопроизвольно до установления равновесия. Изменение энтальпии системы не зависит от пути и времени процесса и не позволяет определить скорость химической реакции. По определению, энергия Гиббса – это работа, которую совершает система или над системой независимо от пути и времени. Изменение энтропии связано со степенью упорядоченности системы и не зависит от пути и продолжительности процесса. Изменение энтальпии можно считать только энергетическим потенциалом равновесного процесса, оно не связано со скоростью химической реакции. Химическая реакция – это неравновесный процесс. Определение скорости химической реакции зависит от механизма, который зависит от обмена с окружающей средой и является вероятностным процессом.

Сама реакция есть неравновесное состояние, происходящее под воздействием потенциала ΔH . Можно ли определить время, за которое произойдет этот переход одного до другого равновесного состояния? В механике, например, время падения шара с высоты H_1 до высоты H_2 определяется изменением потенциальной энергии и переходом ее в кинетическую:

$$mg(H_2 - H_1) = \frac{mv^2}{2} = \frac{mt^2}{2S^2}, \quad (5)$$

где S – длина пути, t – время движения.

Если предположить, что шар спускается по желобу сложной конфигурации как по высоте, так и по направлению, то суммарное изменение потенциальной энергии от начала до конца останется той же самой, а вот путь движения изменится существенно, и время значительно увеличится.

При движении большого количества атомов и молекул точный путь и время их движения определить невозможно, и потому детерминированный подход невозможен. Невозможно также определить, сколько раз частица диссоциирует и ассоциирует с другими частицами. Ассоциация связана с выделением энергии, а диссоциация – с поглощением. Возможен только вероятностный подход. Неравновесная термодинамика основана на фундаментальном предположении о локальном равновесии [7].

Концепция локального равновесия заключается в том, что равновесные термодинамические соотношения справедливы для термодинамических переменных, определенных в элементарном объеме, т.е. рассматриваемая система может быть мысленно разделена в пространстве на множество элементарных ячеек, достаточно больших, чтобы рассматривать их как макроскопические системы, но в то же время достаточно малых для того, чтобы состояние каждой из них было близко к состоянию равновесия. Любая химическая реакция происходит не во всем объеме одновременно. Гетерогенная реакция начинается с поверхности, гомогенная – с точки инициирования. Поэтому любая химическая реакция – это неравновесный процесс, но изменение потенциала рассчитывается, исходя из равновесных параметров системы.

Модель химической кинетики

Химическая реакция двух и более веществ происходит с разрывом химических связей, на что затрачивается энергия. Образование новых веществ осуществляется за счет образования новых связей. При этом выделяется энергия, и избыточное ее количество фиксируется как тепловой эффект реакции. Если разрушение и образование новых связей происходят по определенному местоположению, то перемещение атомов из одного положения в другое носит хаотический случайный характер. Вероятность их свободного несвязанного движения и возможность вступать в химическую реакцию определяются соотношением величины кинетической энергии атомов и энергии связи: $K \geq Z$. Химическая реакция является взаимодействием двух и более веществ, это вероятное событие с участием частиц, у которых определена вероятность их образования. Вероятность совместного наступления двух независимых событий равна их произведению. Если реакция прошла до конца, то вероятность события равна единице.

Мономолекулярная кинетика

Соотношение $Z \geq K$ означает, что энергия связи больше энергии кинетической, и поэтому атом или молекула находится в связанном состоянии и не может вступать в химическое взаимодействие.

При обратном положении ($K \geq Z$) частица становится свободной от связи, подвижной, появляется вероятность вступать в химическое взаимодействие с другими несвязанными молекулами. В этом случае можно определить количество активных частиц в системе, если принять, что отношение K/Z есть вероятность появления активной частицы, способной вступать в химическую реакцию, если ее кинетическая энергия больше энергии связи:

$$\frac{N_0 K}{Z} = N_i. \quad (6)$$

Выражение $K \geq Z$ определим как вероятность появления активных молекул, умноженную на количество молекул.

Учитывая, что при объединении молекул энергия выделяется, а при разделении она поглощается, будет постоянно изменяться кинетическая энергия атомов, но тогда и (потенциальная) энергия связи за счет количества активных частиц будет изменяться.

Выражение $K \geq Z$ определяет вероятность появления активных молекул. Умноженная на общее число молекул в системе и поделенная на объем, она равна вероятности появления активных частиц, т.е. их концентрации:

$$\frac{K_i}{Z_i} \cdot \frac{N_i}{V_i} = C_i. \quad (7)$$

При таком определении активной частицы скорость химической реакции первого порядка можно записать как

$$\frac{dC}{dt} = \frac{dK}{dt} \frac{N_i}{VZ}. \quad (8)$$

Этот пример подходит для реакции распада молекулы.

Если кинетическая энергия атома или молекулы

$$K = \frac{mv^2}{2} = \frac{m L^2}{2 \tau^2}, \quad (9)$$

то скорость движения атома

$$v = L/\tau, \quad (10)$$

где v – скорость, L – длина пути пробега частиц, τ – время.

Любое перемещение атомов и молекул происходит в течение какого-то времени, определяется величиной кинетической энергии и заканчивается образованием новой связи. У большого количества частиц невозможно определить путь, скорость и время их перемещения. Отношение необходимого пути прохождения свободной частицы к скорости частицы, умноженной на время есть вероятность образования новой связи:

$$L = v \tau, \quad (11)$$

$$W = S/v \tau, \quad (12)$$

где S – необходимый путь до образования связи, v – скорость, L – длина пути пробега частиц, τ – время.

Тогда уравнение (7) зависит от времени, и его можно дифференцировать по времени:

$$\frac{dC}{d\tau} = \frac{dK}{d\tau} \frac{N_0}{VZ} = \frac{N_a}{V_a Z_a} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{m L^2}{2 \tau^2} \right) = - \frac{N_a}{V_a Z_a} \frac{m L^2}{\tau^3} = C_a \frac{m L^2}{Z_a \tau^3}. \quad (13)$$

Дифференцирование концентрации по времени дает скорость химической реакции первого порядка. Энергия связи атомов входит в кинетическое уравнение. Элементы уравнения $\frac{N_0}{VZ}$ не зависят от времени, поэтому при дифференцировании это константы, как в уравнении действующих масс. Уравнение (13) является уравнением скорости химической реакции, которое показывает, что скорость уменьшается со временем как $\frac{1}{Z_a \tau^3}$ и зависит от энергии связи Z_a .

В любом агрегатном состоянии вещества связь атомов определяет энергия связи. В газообразном состоянии она меньше, в жидком – больше, в твердом – еще больше за счет количества связей. Величина энергии связи зависит от расстояния между атомами, которое будет возрастать с амплитудой колебаний и ростом кинетической энергии, т.е. температуры. Учитывая, что при объединении атомов энергия выделяется, а при разделении она поглощается, так же будет постоянно изменяться кинетическая энергия атомов.

Известно, что все твердые вещества кристаллизуются в 14 типах решеток (решетки Бравэ). Две из них, плотнейшие шаровые упаковки (ПШУ), обладают максимальным набором элементов симметрии. Координационное число, определяющее количество связей, равно 12, и в этом случае энергия связи (потенциальная энергия) будет максимальной. С потерей симметричности и уменьшением координационного числа она будет уменьшаться [8]. При увеличении температуры структура вещества будет изменяться (точка бифуркации) с потерей симметричности и увеличением расстояния между атомами (фазовый переход) и, следовательно, с уменьшением потенциальной энергии. В твердом состоянии с увеличением температуры происходят

фазовые переходы [9]. При перестроении кристаллической структуры изменяется потенциальная энергия атомов.

В жидком и газообразном состояниях, где нет кристаллической структуры, в системе потенциальная энергии будет равна энергии связи между атомами. Потенциальная энергия системы будет равна нулю при полном разделении атомов. Несвязанные атомы максимально подвижны и обладают только кинетической энергией.

Таким образом, любая химическая реакция сопровождается изменением структуры. При изменении агрегатного состояния, изменении фазы внутри агрегатного состояния необходимо, чтобы атомы становились подвижными, т.е. осуществлялся переход энергии связи (потенциальной энергии) в кинетическую.

В классической термодинамике подразумевается атомарное строение вещества, но рассматривается только «рабочее тело», совершающее работу при переходе из одного состояния системы в другое, как это представлено в уравнении (3). При этом не рассматриваются строение и структура рабочего тела, а только его параметры: температура, объем и давление, которые не зависят от времени. Если рассматривать отношение $\Delta SAT/\Delta G$, непонятно, как влияет изменение этого отношения на распределение и концентрацию реагирующих веществ, а также скорость их взаимодействия. Можно только предположить, что отношение связанной энергии к свободной есть теоретический коэффициент полезного действия системы при выполнении работы системой или над системой, который не зависит от времени.

Взаимодействие двух веществ

Химическая реакция – это взаимодействие атомов с вероятностью, определяемой соотношением кинетической и потенциальной энергий. Химическая реакция – это сумма вероятных событий, вероятность которой рассчитывается как произведение вероятностей этих событий. Если вероятность реакции веществ больше нуля, вероятность события равна произведению этих вероятностей [10].

Для химической реакции, протекающей согласно уравнению



происходят два события:

- 1 – вещество А взаимодействует с веществом В;
- 2 – в результате химической реакции образуются вещества С и D.

$$\frac{N_0}{V} \cdot \frac{K}{Z} = W_i, \quad (15)$$

$$W_a W_b = W_c W_d = 1, \quad (16)$$

где W_i – вероятность существования активной частицы вступающей в реакцию.

Если реакция происходит от начала до конца, значит вероятность этого события равна единице. Подставляя уравнение (15) в уравнение (16), имеем

$$\left(\frac{K_a N_a}{Z_a V_a} \right) \left(\frac{K_b N_b}{Z_b V_b} \right) = 1. \quad (17)$$

После преобразования получаем значения концентраций веществ А и В, связанные с изменением их потенциальной и кинетической энергии:

$$\left(c_a \frac{K_a}{Z_a}\right) \left(c_b \frac{K_b}{Z_b}\right) = 1. \quad (18)$$

Произведение вероятностей для исходных веществ равно произведению вероятностей образующихся продуктов реакции, что означает сумму событий. Вещества А и В вступают в реакцию с образованием веществ С и D. Преобразуем уравнение (18) относительно концентрации вещества А:

$$C_a = \frac{1}{c_b} \left(\frac{Z_a}{K_a}\right) \left(\frac{Z_b}{K_b}\right). \quad (19)$$

Продифференцируем его и получим уравнение для скорости химической реакции по веществу А:

$$\frac{dC_a}{d\tau} = \frac{1}{c_b} \frac{d}{d\tau} \left[\left(\frac{Z_a}{K_a}\right) \left(\frac{Z_b}{K_b}\right) \right], \quad (20)$$

$$\frac{dC_a}{d\tau} = \frac{1}{c_b} \left[\frac{d}{d\tau} \left(\frac{Z_a}{K_a}\right) \times \left(\frac{Z_b}{K_b}\right) \right] + \left[\left(\frac{Z_a}{K_a}\right) \times \frac{d}{d\tau} \left(\frac{Z_b}{K_b}\right) \right]. \quad (21)$$

Используя уравнение (20), преобразуем уравнение (21) и получим уравнение для скорости химической реакции между веществами А и В:

$$\frac{dC_a}{d\tau} = \frac{1}{c_b} \left[\left(\frac{2Z_a\tau}{m_a L_a^2}\right) \times \left(\frac{Z_b\tau^2}{m_b L_b^2}\right) \right] + \left[\left(\frac{Z_a\tau^2}{m_a L_a^2}\right) \times \left(\frac{2Z_b\tau}{m_b L_b^2}\right) \right]. \quad (22)$$

После преобразования получаем

$$\frac{dC_a}{d\tau} = \nu = \frac{1}{c_b} \left(\frac{4Z_a Z_b \tau^3}{m_a L_a^2 m_b L_b^2}\right). \quad (23)$$

Уравнение (23) для скорости химической реакции двух веществ показывает, что скорость зависит от соотношения энергии связи (потенциальной) и кинетической энергии атомов взаимодействующих веществ.

Чтобы не происходил обратный процесс, необходимо выполнение условия для продуктов реакции В и С: энергия связи атомов продуктов реакции больше их кинетической энергии $Z_{bc} \geq K_{bc}$. Существование прямой и обратной реакции тоже определяется соотношением кинетической и потенциальной энергии.

Константа скорости реакции есть дробь, выражающая отношение потенциальной и кинетической энергий реагирующей системы.

Процесс приходит к окончанию, если количество выделяемой энергии за счет объединения становится недостаточным, чтобы энергии хватило на разъединение атомов и обеспечение способности атомов перейти в активное состояние и переместиться в другое положение или соединиться в другой конфигурации. В этом случае порог активации атомов становится непреодолимым.

Реакции двух бинарных веществ

Уравнение химической реакции двух бинарных веществ имеет вид:



Чтобы реакция произошла самопроизвольно, необходимо, чтобы связи в молекулах АВ и СД были разорваны и образовались связи АД и ВС. Следует предположить, что при разрыве связей энергия затрачивается, а при

образовании выделяется. Самопроизвольные реакции протекают, если выделяемая энергия больше, чем затрачиваемая на разрыв:

$$N_a[(E_{AD} + E_{BC}) - (E_{AB} + E_{CD})] = E_{\text{акт}}, \quad (25)$$

где $E_{\text{акт}}$ – энергия активации

Следует считать, что реакция происходит с выделением тепла. Тепловой эффект составит разность энергий образованных связей и энергии разорванных связей:

$$(E_{AD} + E_{BC}) - (E_{AB} + E_{CD}) = \Delta H. \quad (26)$$

Термодинамический расчет теплового эффекта реакции состоит в определении разности теплоты образования продуктов реакции и исходных веществ.

В качестве примера рассмотрим реакцию образования карбида титана. Реакция происходит с выделением тепла после ее активирования импульсом энергии [11]:



По определению, энтальпия образования простых веществ Ti и C равна нулю [1, 2], а энтальпия образования карбида титана TiC – 230,74 кДж/моль [12]. Откуда высвободилась энергия? Металлический титан имеет кристаллическую решетку типа плотнейшая шаровая упаковка с металлическими связями, сажа – аморфный материал с элементами гексагональных структур, а полученный карбид титана обладает структурой типа NaCl. Все три структуры совершенно разные. Это означает, что все исходные вещества изменили структуру, т.е. прежние связи были разрушены, и образовались новые, непохожие на прежние. Для разрушения связей между атомами титана и углерода затрачена энергия, а при образовании связей в карбиде титана энергия выделилась. При этом выделенной энергии получилось больше, чем затраченной на разрыв связей в титане и углероде. Получается, запасенная энергия связей Ti и C (потенциальная) была затрачена на движение их атомов (кинетическую энергию):

$$E_1 + E_2 = E_3 + \Delta H, \quad (28)$$

где E_1 – энергия связи между атомами титана, E_2 – энергия связи между атомами углерода, E_3 – энергия связи между атомами титана и углерода.

Тогда тепловой эффект реакции есть разность энергии связи титана, углерода и карбида титана:

$$\Delta H = E_1 + E_2 - E_3. \quad (29)$$

С другой стороны, термодинамический подход позволяет использовать формулу, соответствующую закону сохранения энергии. Согласно уравнению (3), изменение энтальпии системы равно

$$\Delta H = \Delta G + \Delta S \Delta T.$$

При этом, по уравнению (4), энтальпия системы равна сумме кинетических энергий молекул и сумме энергий связи атомов в молекуле:

$$H = \sum K + \sum nE.$$

Для соединений со сложной структурой необходимо вводить координационное число, чтобы правильно посчитать количество связей.

Сама химическая реакция – это неравновесный процесс, а анализ изменения термодинамических потенциалов лишь дает возможность связать их с движением атомов и молекул и окончательно определить скорость химической реакции.

Энергия активации процесса

Энергию активации рассчитывают по уравнению Аррениуса исходя из экспериментальных данных. Иногда ее называют «мнимой» энергией активации.

Какой импульс (кинетическая энергия) будет достаточным, чтобы атомы одного сорта вначале разделились (А) и (В), а затем соединились с образованием атомов (С) и (D), и при этом произошло выделение энергии, равное потенциальной энергии образования Z_c и Z_d соединений (С) и (D), при этом ее было бы больше, чем при поглощении?

Такая энергия может выделиться, только если молекулы, появившиеся после сообщения первичного импульса, соединятся, и этот импульс будет больше первичного, что возможно только тогда, когда молекулы будут другого сорта. При соединении тех же молекул, которые диссоциировали, энергии выделится столько же, сколько и поглотилось. Величина этого нового импульса будет зависеть от количества новых молекул (N) способных при объединении выделить такое количество энергии, которое приведет к новой диссоциации и последующей ассоциации разнородных атомов, способных выделять больше, чем поглощать.

Уравнение (25) определяет величину энергии активации процесса, которую можно рассчитать из термодинамических параметров, если учесть соотношение

$$N_a[(E_{AD} + E_{BC}) - (E_{AB} + E_{CD})] = E_{\text{акт.}}$$

В данном уравнении неопределенной величиной является N_a – количество активированных частиц для начала процесса. Ее можно определить, используя уравнение (7) для выбранного объема точки активации реальной реакции:

$$\frac{K_i}{Z_i} \cdot \frac{N_i}{V_i} = C,$$

где V_i – небольшой объем, где происходит инициирование реакции.

Принимая во внимание уравнения (3) и (4), запишем

$$N_a[(E_{AD} + E_{BC}) - (E_{AB} + E_{CD})] = N_a[\sum Z_{\text{продукт}} - \sum Z_{\text{исход}}] = E_{\text{акт.}} \quad (30)$$

Энергию активации можно рассчитать с учетом термодинамических данных:

$$E_{\text{акт}} = N_a[\sum (S_c T + G_c - K_c) + (S_d T + G_d - K_d) - \sum (S_a T + G_a - K_a) + (S_b T + G_b - K_b)]. \quad (31)$$

Если учесть, что кинетическую энергию можно рассчитать по формуле

$$K = E = \frac{3}{2} kT = \sum \frac{1}{2} m v^2, \quad (32)$$

а термодинамические параметры веществ известны, то энергию активации можно оценить по формуле (31).

Заключение

Независимо от типа реакции, агрегатного состояния взаимодействующих веществ, обязательно происходят диссоциация и образование связей, в результате чего изменяется кинетическая энергия атомов и молекул. Постоянно изменяется их соотношение, изменяется количество активных частиц за счет образования продуктов реакции.

Получены уравнения для расчета скорости химических реакций независимо от их агрегатного состояния. Показана возможность расчета констант уравнения.

В результате исследования сделаны следующие **выводы**:

1. Предложена модель химической кинетики, на основе которой возможно написание уравнений для скорости химической реакции независимо от агрегатного состояния двух и более реагирующих веществ

2. Определена связь термодинамических параметров со скоростью химической реакции.

3. Предложен алгоритм расчета энергии активации химической реакции.

4. Константа скорости реакции зависит от массы, энергии связи реагирующих веществ, длины свободного пробега атомов и молекул и, следовательно, от температуры.

5. Окончание химической реакции определяется уменьшением вероятности существования активных частиц ниже критического значения. Выделение энергии должно быть больше энергии поглощения.

6. Структура системы определяется энергией связи атомов и молекул. Поглощение энергии приводит разрыву связей, а выделение энергии происходит при образовании новых связей.

7. Химическая реакция активных атомов и молекул есть сумма произошедших событий, а произведение вероятностей таких событий количественно отражает процесс реакции во времени.

Список источников

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия : учебник для хим. спец. вузов / под ред. А.Г. Стромберга. 4-е изд., испр. М. : Высш. школа, 2001. 527 с.
2. Семиохин И.А. Физическая химия : учебник. М. : Изд-во МГУ, 2001. 272 с.
3. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики : учебник для хим. фак-тов ун-тов. 4-е изд., перераб. и доп. М. : Высш. школа, 1984. 463 с.
4. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций : учебник для хим. спец. вузов. М. : Высш. школа, 1978. 367 с.
5. Хабаши Ф. Основы прикладной металлургии / пер. с англ. Л.Г. Титова, Е.А. Масловой; под ред. Н.В. Гудимы. – Москва : Металлургия, 1975. Т. 1: Теоретические основы. 231 с.
6. Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М. : Химия, 1978. 360 с.
7. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов / пер. с англ. под ред. Н.С. Акулова. 2-е изд. М.–Ижевск : Регулярная и хаотическая динамика, 2001. 160 с.

8. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография : учебник для вузов. 5-е изд., испр. М. : Высш. школа, 1972. 392 с.
9. Борисова Е.А., Бочвар Г.А., Брун М.Я. и др. Металлография титановых сплавов. М. : Metallurgia, 1980. 464 с.
10. Вентцель Е.С. Теория вероятностей : учебник для вузов. 10-е изд. стер. М. : Высш. школа, 2006. 575 с.
11. Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов : учеб. пособие / под науч. ред. В.Н. Анциферова. М. : Машиностроение-1, 2007. 567 с.
12. Самсонов Г.В., Виницкий И.М. Тугоплавкие соединения. М. : Metallurgia, 1976. 559 с.

References

1. Stromberg A.G., Semchenko D.P. *Fizicheskaya ximiya: Ucheb. dlya xim. specz. vuzov* [Physical Chemistry: Textbook for chemical specialized universities] / Pod red. A.G. Stromberga. 4 izd., ispr. M.: Vyssh.shk., 2001. P. 527.
2. Semioxin I.A. *Fizicheskaya ximiya: Uchebnik* [Physical Chemistry: Textbook]. Izd-vo MGU, 2001. P. 272.
3. E`manue`l` N.M., Knorre D.G. *Kurs ximicheskoy kinetiki: Uchebnik dlya xim. fak. un-tov* [Chemical Kinetics Course: Textbook for the Chemistry Departments of Universities]. 4 izd., pererab. i dop. M.: Vyssh. shk., 1984. P. 463.
4. Denisov E.T. *Kinetics of homogeneous chemical reactions: Textbook for chemical specialty universities* [Kinetics of homogeneous chemical reactions: Textbook for chemical specialized universities]. M.: Vyssh.shk.1978. P. 367.
5. Xabashi F. *Teoreticheskie osnovy`*. T. 1 / perevod s anglijskogo L.G. Titova i E.A. Maslovoj; pod redakciej N.V. Gudimyj` [Theoretical Foundations / . Vol. 1: translated from English by L.G. Titov and E.A. Maslova; edited by N.V. Gudima]. 1975. P. 231.
6. Tref`yakov Yu.D. *Tverdogazny`e reakcii* [Solid-state reactions]. M.: Ximiya, 1978. P. 360
7. Prigozhin I. *Vvedenie v termodinamiku neobratimyx processov* / Per. s angl. pod red. N.S. Akulova. [Introduction to the Thermodynamics of Irreversible Processes / Translated from English edited by N. S. Akulov.]. 2 izd. M.; Izhevsk: Reguljarnaya i xaoicheskaya dinamika, 2001. P. 160.
8. Popov G.M., Shafranovskij I.I. *Kristallografiya: Uchebnik dlya vuzov*. 5 izd. ispr. [Crystallography: Textbook for universities. 5th ed. corrected]. M.: Vyssh. shk., 1972. P. 392.
9. Borisova E.A., Bochvar G.A., Brun M.Ya. et al. *Metallografiya titanovy`x splavov* [Metallography of titanium alloys]. M.: Metallurgiya, 1980. P. 464.
10. Veitcel` E.S. *Teoriya veroyatnostej: Ucheb, dlya vuzov* [Probability Theory: Textbook for Universities]. 10 izd. ster. M.: Vyssh. shk., 2006. P. 575.
11. Amosov A.P., Borovinskaya I.P., Merzhanov A.G. *Poroshkovaya texnologiya samorasprostranyayushhegosya vy`sokotemperaturnogo sinteza materialov: Ucheb. posobie* / Pod nauchnoj redakciej V.N. Anciferova [Powder technology of self-propagating high-temperature synthesis of materials: Textbook. / Edited by V.N. Antsiferov]. M.: Mashinostroenie-1, 2007.
12. Samsonov G.V., Viniczkiy I.M. *Tugoplavkie soedineniya* [Refractory compounds]. M.: Metallurgiya, 1976. P. 559

Сведения об авторе:

Гузеев Виталий Васильевич – доктор технических наук, профессор кафедры химии и технологии материалов современной энергетики Северского технологического института – филиала Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (Северск, Россия). E-mail: vvguzeev@mephi.ru

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Information about the author:

Guzeev Vitaliy V. – PhD in Technology, Professor of the Chair of Chemistry and Technology of Materials of Modern Energy, Seversk Technological Institute – branch of the National Research Nuclear University “MEPhI” (Seversk, Russian Federation). E-mail: vvguzeev@mephi.ru

The author declares no conflicts of interests.

Статья поступила в редакцию 15.04.2025; принята к публикации 29.09.2025

The article was submitted 15.04.2025; accepted for publication 29.09.2025