

ВЛИЯНИЕ ВИДА КИНЕТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ НА ЧИСЛО ВНУТРЕННИХ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКЦИИ, ПРОТЕКАЮЩЕЙ ПО ЛИНЕЙНОЙ СТАДИЙНОЙ СХЕМЕ

Б.В. Алексеев, Н.И. Кольцов

Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений, Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Московский пр., 15, Чебоксары, Российская Федерация, 428015
E-mail: a402539@yandex.ru, koltsovni@mail.ru

Основной причиной возникновения критических явлений в химических реакциях является множественность внутренних стационарных состояний (ВСС), в которых концентрации всех участвующих в реакции веществ не равны нулю. В рамках идеального кинетического закона действующих масс множественность ВСС может возникать в реакциях с участием бимолекулярных стадий взаимодействия реагентов. Если стационарных состояний несколько, то они делятся на чередующиеся устойчивые и неустойчивые состояния. Известно, что для реакций, протекающих по типовым нелинейным двух- и трехстадийным схемам, число ВСС не может быть больше пяти. Реакции, протекающие по линейным стадийным схемам, характеризуются единственным стационарным состоянием и для описания множественности в таких реакциях необходимо использовать дополнительные предположения, вносящие нелинейность в их кинетические модели. При изучении некоторых химических реакций обнаружено нарушение закона действующих масс и существование нескольких ВСС, а также различных форм проявления множественности стационарных состояний и критических явлений типа автоколебаний. В связи с этим представляет интерес исследовать, как влияет неидеальная кинетика на число стационарных состояний химических реакций. В качестве неидеальной кинетики нашел применение кинетический закон (функция) Марселина-Де Донде, который позволил описать множественность с тремя и пятью стационарными состояниями в линейной обратимой двухстадийной реакции. В данной статье исследовано число ВСС для реакции, протекающей по линейной стадийной схеме, в связи с видом неидеальной кинетической функции. Установлено, что, если кинетическая функция монотонна, то множественность ВСС невозможна. Выявлен простейший вид неидеальной кинетической функции, допускающей девять ВСС.

Ключевые слова: линейная реакция, множественность и число внутренних стационарных состояний, закон действующих масс, неидеальная кинетика

INFLUENCE OF THE KINETIC FUNCTION TYPE ON THE NUMBER OF INTERNAL STATIONARY STATES OF A REACTION PROCESSING ACCORDING TO A LINEAR STAGE SCHEME

B.V. Alekseev, N.I. Kol'tsov

Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, Chuvash State University named after I.N. Ulyanova, Moskovsky pr., 15, Cheboksary, 428015, Russian Federation
E-mail: a402539@yandex.ru, koltsovni@mail.ru

The main reason for the occurrence of critical phenomena in chemical reactions is the multiplicity of internal stationary states (ISS), in which the concentrations of all substances participating in the reaction are not equal to zero. Within the framework of the ideal kinetic law of mass action, the multiplicity of ISSs can arise in reactions involving bimolecular stages of the interaction of reagents. If there are several stationary states, then they are divided into alternating stable and unstable states. It is known that for reactions proceeding according to typical nonlinear two- and

three-stage schemes, the number of ISSs cannot exceed five. Reactions that proceed according to linear step schemes are characterized by a single stationary state, and to describe the multiplicity in such reactions, it is necessary to use additional assumptions that introduce nonlinearity into their kinetic models. In the study of some chemical reactions, a violation of the law of mass action and the existence of several ISS, as well as various forms of manifestation of the multiplicity of stationary states and critical phenomena such as self-oscillations, were found. In this regard, it is of interest to investigate how nonideal kinetics affects the number of stationary states of chemical reactions. As non-ideal kinetics, the kinetic law (function) of Marcelin-De Donde was used, which made it possible to describe the multiplicity with three and five stationary states in a linear reversible two-stage reaction. In this article, the number of ISSs for a reaction proceeding according to a linear stage scheme is studied in connection with the form of a nonideal kinetic function. It has been established that if the kinetic function is monotonic, then the multiplicity of ISSs is impossible. The simplest form of a non-ideal kinetic function, which admits nine ISSs, is revealed.

Keywords: linear reaction, multiplicity and number of internal stationary states, law of mass action, nonideal kinetics

Для цитирования:

Алексеев Б.В., Кольцов Н.И. Влияние вида кинетической функции на число внутренних стационарных состояний реакции, протекающей по линейной стадийной схеме. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2026. Т. LXX. № 2. С. 84–90. DOI: 10.6060/rcj.2026702.11.

For citation:

Alekseev B.V., Kol'tsov N.I. Influence of the kinetic function type on the number of internal stationary states of a reaction processing according to a linear stage scheme. *Ros. Khim. Zh.* 2026. V. 70. N 2. P. 84–90. DOI: 10.6060/rcj.2026702.11.

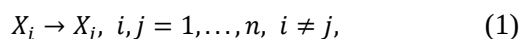
ВВЕДЕНИЕ

При осуществлении реакций в изотермических условиях без искажающего влияния тепло- и массопереноса может происходить резкое изменение скорости (критический эффект типа множественности стационарных состояний (МСС)) при достижении их параметрами определенных значений. Для объяснения этого эффекта были проведены исследования, связывающие особенности протекания реакций со структурой их механизмов [1-6]. В работе [7] проведена классификация СС, согласно которой они делятся на внутренние и граничные. К внутренним относятся СС, координаты которых ненулевые, т.е. в них концентрации всех участвующих в реакции веществ не равны нулю. Граничными являются СС, хотя бы одна из координат которых нулевая, т.е. в этих СС концентрация, по крайней мере, одного вещества равна нулю. Число нулевых концентраций веществ определяет тип СС: любое внутреннее СС (ВСС) имеет нулевой тип (т.к. в этом СС концентрации всех веществ не равны нулю), граничное СС с одной нулевой координатой является СС первого типа, граничное СС с двумя нулевыми координатами - СС второго типа и т.д. В [8] приведены результаты исследования числа ВСС реакций, протекающих по идеальному кинетическому закону действующих масс, в связи

с их механизмами. В частности, установлено, что с помощью линейных стадийных схем нельзя описать МСС без привлечения дополнительных предположений, вносящих нелинейность в их кинетические модели. Показано, что если стационарных состояний несколько, то, по крайней мере, одно из них является неустойчивым. Устойчивые и неустойчивые состояния чередуются. Установлено, что для реакций, протекающих по типовым двух- и трехстадийным схемам, число ВСС не может быть больше пяти. Реакция, протекающая по однородному механизму с молекулярностью стадий не более 3, может обладать неограниченно большим числом ВСС ($n+1$ ВСС при числе промежуточных веществ, равном n). Приведенные выше результаты получены для реакций, протекающих по идеальному кинетическому закону действующих масс (ЗДМ). Однако в реальных условиях реакции протекают с отклонениями от ЗДМ, для описания которых применяется неидеальный кинетический закон (функция) Марселина-Де Донде [9-17], который позволил описать множественность с тремя [18] и пятью [19] стационарными состояниями в линейной двухстадийной реакции, а также автоколебания [20] в линейной трехстадийной реакции. В связи с этим в данной статье изложены результаты определения числа ВСС для реакции с неидеальной кинетикой, протекающей по линейной схеме.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим химическую реакцию, протекающую по линейной схеме



скорости стадий которой имеют вид

$$r_{i,j} = k_{i,j} \varphi(x_i),$$

где φ – непрерывная кинетическая функция от концентрации соответствующего промежуточного вещества $\varphi(p)$, $0 \leq p \leq 1$, удовлетворяющая условиям

$$\varphi(0) = 0; \quad \varphi(p) > 0 \text{ при } p > 0. \quad (2)$$

В частном случае, когда $\varphi(p) \equiv p$, мы имеем «идеальную» кинетику, определяемую ЗДМ. Таким образом, кинетическая функция φ , заданная условиями (2), является примером неидеальной кинетики, обобщая ЗДМ.

Хорошо известно, что при идеальной кинетике ЗДМ линейная схема (1) всегда характеризуется единственностью ВСС. Целью данного исследования является установление вида кинетической функции (2), при которой стадийная схема (1) обладает несколькими ВСС.

Динамическая модель реакции, протекающей по схеме (1), запишется в виде

$$\dot{x}_j = \sum_{i=1}^n k_{i,j} \varphi(x_i) - \sum_{i=1}^n k_{j,i} \varphi(x_j), \quad j = 1, \dots, n \quad (3)$$

и имеет закон сохранения

$$\sum_{i=1}^n x_i = \text{const} = 1. \quad (4)$$

Из (3) следуют уравнения стационарности

$$\sum_{i=1}^n k_{i,j} \varphi(x_i) = \sum_{i=1}^n k_{j,i} \varphi(x_j), \quad j = 1 \dots n \quad (5)$$

Предполагаем, что система (5) линейных относительно $\varphi(x_i)$ уравнений имеет максимально возможный ранг, равный $n - 1$ (ввиду наличия закона сохранения (4) она не может иметь ранг n). В этом случае системе (5) удовлетворяет единственный (с точностью до положительного множителя r) набор величин

$$\varphi(x_i) = k_i r, \quad i = 1 \dots n, \quad (6)$$

где коэффициенты k_i правой части определяются значениями констант скоростей $k_{i,j}$ стадий схемы (1). Множитель r играет роль скорости маршрута, а коэффициенты k_i – маршрутные числа. Таким образом, задача установления ВСС для реакции, протекающей по схеме (1), заключается в определении решения системы уравнений (4), (6).

Поскольку в системе уравнений (6) всего n параметров k_i , а в исходных уравнениях (5) параметров $k_{i,j}$ (констант скоростей стадий) намного больше (в линейной реакции общего вида имеется $n(n - 1)$ необратимых стадий), то, очевидно, некоторые линейные схемы реакций эквивалентны между собой – в том смысле, что исследование их ВСС сводится к нахождению решения одной и той же системы уравнений (4), (6). Среди таких эквивалентных схем одной из простейших является схема



которая содержит $n - 1$ обратимых стадий (т.е. $2(n - 1)$ необратимых стадий) и ее уравнения стационарности сводятся к уравнениям (4), (6), если константы скоростей стадий удовлетворяют соотношениям

$$k_{1,i} k_1 = k_{i,1} k_i, \quad i = 2, \dots, n. \quad (8)$$

Таким образом, исследование стационарного поведения линейной реакции общего вида (1) равносильно исследованию линейной реакции вида (7), т.е. анализу решений уравнений (4), (6). Отметим, что при идеальной кинетике, т.е. когда функции φ описываются ЗДМ, множественность решений уравнений (4) и (6), а, следовательно, и множественность ВСС, невозможна.

Выясним простейший вид неидеальной кинетики, допускающей множественность ВСС. Если функция φ монотонно возрастает, множественность невозможна. Действительно, в этом случае функция φ имеет обратную функцию φ^{-1} , которая тоже монотонно возрастает. Значит, монотонно возрастает и выражение $\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n \varphi^{-1}(k_i r)$, рассматриваемое, как функция от скорости маршрута r , принимая каждое свое значение только один раз. Поэтому, кинетическая функция, допускающая множественность ВСС, должна иметь, как минимум, два интервала монотонности – начальный интервал возрастания, сменяющийся интервалом убывания. Такие функции относят к унимодальным, рис. 1.

Для упрощения дальнейших выкладок, рассмотрим случай, когда параметры k_i соотношения (6) равны между собой

$$k_i = 1, \quad i = 1, \dots, n,$$

что равносильно равенству констант скоростей стадий схемы (7). При этом уравнения стационарности запишутся

$$\varphi(x_i) = r, \quad i = 1, \dots, n, \quad \sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad (9)$$

и при любой кинетической функции φ система уравнений (9) имеет решение $x_i = 1/n$, т.е. схема (7) обладает ВСС, в котором скорость маршрута равна

$\varphi(1/n)$. Определим, при каких условиях существуют, помимо этого ВСС, другие ВСС.

Простейшая унимодальная функция – парабола $\varphi(p) = p(c - p)$, $c > 1, 0 < p < 1$. Условие $c > 1$ вытекает из требования $\varphi(1) > 0$. Однако, как выясняется, парабола также не подходит. Действительно, если подставить ее выражение в уравнения стационарности, получатся равенства

$$x_1(c - x_1) = \dots = x_i(c - x_i) = \dots = x_n(c - x_n) = r,$$

из которых следует

$$(x_i - x_j)(c - x_i - x_j) = 0.$$

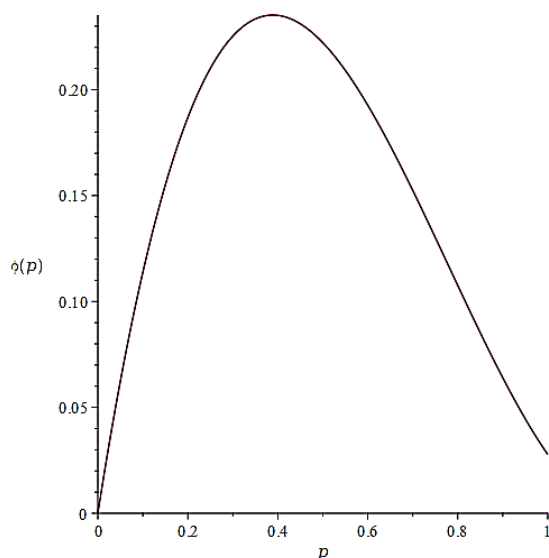


Рис. 1. Пример унимодальной кинетической функции $\varphi(p)$
Fig. 1. An example of an unimodal kinetic function $\varphi(p)$

Поскольку не все величины x_i равны между собой (иначе мы приходим к установленному выше ВСС с координатами $x_i = 1/n$), то хотя бы одна из правых скобок должна быть равна нулю. Однако, если $c = x_i + x_j$ при некоторых i, j , то $c \leq \sum_{i=1}^n x_i = 1$, откуда следует $c \leq 1$, что не допустимо для параметра c . Следовательно, унимодальная функция, если она позволяет реализовать множественность ВСС, должна быть сложнее, чем квадратичная парабола. Отметим, что унимодальная функция принимает каждое свое значение не более двух раз. Поэтому уравнения стационарности (9) при унимодальной кинетической функции допускают только такие решения, в которых среди координат x_i имеются не более двух различных. Предположим, что m , $0 < m < n$ координат равны некоторой величине x , $0 < x < 1$, а остальные координаты равны между собой и все корни в сумме равны единице

$$x_i = x, x_j = \frac{1-mx}{n-m}, 0 < x < \frac{1}{m}. \quad (10)$$

Здесь индекс i обозначает номера тех координат, которые равны x , а индекс j – номера остальных координат, которые дополняют сумму всех координат до единицы. При этом уравнения стационарности (9) упрощаются до одного уравнения с одной неизвестной x и одним целочисленным параметром m

$$\varphi(x) - \varphi\left(\frac{1-mx}{n-m}\right) = 0, \quad 0 < x < \frac{1}{m}, \quad 0 < m < n. \quad (11)$$

Очевидно, что одно ВСС вида (10) существует всегда, при любой функции $\varphi(p)$ и при любом значении m , $0 < m < n$ – это ВСС со значением $x = \frac{1}{n}$.

Отметим, что в силу симметрии соотношения (11) относительно перехода от значения m к значению $n - m$ (величины x и $\frac{1-mx}{n-m}$ меняются при этом местами), достаточно ограничиться значениями параметра m , не превышающими $n/2$.

Выясним, при каких условиях на функцию $\varphi(p)$ будут существовать несколько решений, т.е. помимо $x = \frac{1}{n}$ будет еще одно или несколько решений уравнения (11). Левая часть этого уравнения отрицательна при $x = 0$ и положительна при $x = \frac{1}{m}$. Необходимое и достаточное условие существования множественности ВСС – наличие такого корня $x = x_0$, в котором левая часть уравнения (11) убывает, т.е. существует значение x_0 , при котором выполняются соотношения

$$\varphi'(x_0) + \frac{m}{n-m} \varphi'\left(\frac{1-mx_0}{n-m}\right) < 0, \\ \varphi(x_0) - \varphi\left(\frac{1-mx_0}{n-m}\right) = 0, \quad 0 < x_0 < \frac{1}{m}. \quad (12)$$

Если функция (2) удовлетворяет условию (12), то множественность ВСС указанного вида (когда среди координат ВСС две различные) существует, если не удовлетворяет – не существует. Применим этот критерий к частному виду кинетической функции $\varphi(x)$, а именно к случаю, когда ее логарифмическая производная равна

$$(\ln(\varphi(x)))' = \frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)} = \frac{a}{x} - \frac{b}{c-x}, \\ a > 0, b > 0, c > 1. \quad (13)$$

В этом случае кинетическая функция $\varphi(x)$ с точностью до константы равна

$$\varphi(x) = x^a(c-x)^b, \\ a > 0, b > 0, c > 1 \quad (14)$$

и условие множественности ВСС запишется в виде соотношений

$$\begin{aligned} & \varphi(x_0) \cdot \left(\frac{a}{x_0} - \frac{b}{c-x_0} \right) + \\ & + \varphi\left(\frac{1-mx_0}{n-m}\right) \cdot \left(\frac{a}{1/m-x_0} - \frac{b}{\frac{c-1}{m}+c+x_0} \right) < 0, \\ & \varphi(x_0) = \varphi\left(\frac{1-mx_0}{n-m}\right). \end{aligned}$$

В первом соотношении (неравенстве) множитель при скобках одинаков и положителен, поэтому на него можно сократить. Второе соотношение (равенство) прологарифмируем и получим соотношения

$$\begin{aligned} & \frac{a}{x_0(1-mx_0)} - \frac{b(c-1+2mc)}{(c-x_0)(c-1+m(c+x_0))} < 0, \\ & a \ln(x_0) + b \ln(c-x_0) - a \ln\left(\frac{1-mx_0}{n-m}\right) - \\ & - b \ln\left(c - \frac{1-mx_0}{n-m}\right) = 0, \end{aligned}$$

которые можно переписать в виде

$$\frac{(c-x_0)(c-1+m(c+x_0))}{x_0(1-mx_0)} < \frac{b}{a}(c-1+2mc), \quad (15)$$

$$\frac{b}{a} = \frac{\ln(x_0) - \ln(1-mx_0) + \ln(n-m)}{\ln((n-m)c-1+mx_0) - \ln(c-x_0) - \ln(n-m)}. \quad (16)$$

Следовательно, условие множественности ВСС (12) выполнено для кинетической функции (14), имеющей логарифмическую производную вида (13), если ее параметры a, b, c удовлетворяют соотношениям (15), (16) при значении параметра x_0 , удовлетворяющем неравенствам $0 < x_0 < \frac{1}{m}$.

Наименьшие значения параметров a, b , при которых условия (15), (16) выполнимы, равны $a = 1$, $b = 2$ (либо $a = 2$, $b = 1$). Уравнение стационарности (11) для кинетической функции $\varphi(x)$ при $a = 1$, $b = 2$ и изменении параметра c от 1 до некоторого максимального значения (равного $\frac{n+\sqrt{n(n-3)+3}}{2(n-1)}$) имеет три корня, (рис. 2):

$$\frac{1}{n}, \frac{2c(n^2-3nm+2m^2)+3m-n \pm (n-m)\sqrt{4cn-4c^2m(n-m)-3}}{2(n^2-3nm+3m^2)}, \quad m = 1. \quad (17)$$

На этом рис. 2 мы видим расположение корней x при изменении параметра c и варьировании величины m : прямая соответствует корню $x = 1/4$, окружность – значению $m = 2$, два эллипса – значениям $m = 1$ и $m = 3$, соответственно. Ввиду ограничения $c > 1$ нас интересует только правая часть графика, в которой присутствуют только прямая и два эллипса. Более того, поскольку случаи $m = 1$ и $m = n-1$ ($m = 3$, если $n = 4$) симметричны (если одна координата отлична от других, а они равны между собой, то это одновременно случай, когда все координаты равны между собой, а оставшаяся отлична от них), то, как уже было отмечено выше, достаточно рассматривать лишь один из этих двух вариантов. Для определенности, можно взять $m = 1$.

Параметрические формулы для корней уравнения (11) при $(a, b) = (1, 2)$ и различном числе веществ n представлены в таблице.

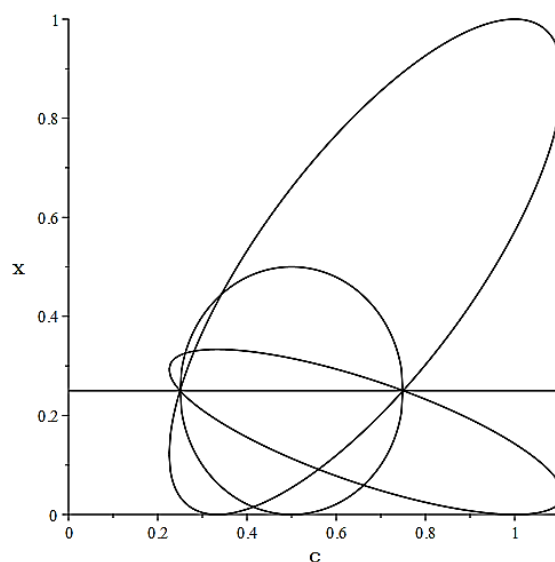


Рис. 2. Корни уравнения стационарности (11) при $(a, b, n) = (1, 2, 4)$

Fig. 2. The roots of the stationarity equation (11) for $(a, b, n) = (1, 2, 4)$

Таблица

Корни уравнения стационарности (11) для кинетической функции $\varphi(x)$ при $a = 1$, $b = 2$
Table. The roots of the stationarity equation (11) for the kinetic function $\varphi(x)$ for $a = 1$, $b = 2$

n	c	Корень 1	Корень 2	Корень 3	Условие
2	$1 + \sqrt{x(1-x)}$	x	$\frac{1}{2}$	$1-x$	$0 < x < \frac{1}{2}$
3	$\frac{1+x}{2} + \sqrt{\frac{x(1-x)}{2}}$	x	$\frac{1}{3}$	$\frac{2-2x+2\sqrt{2}\sqrt{x(1-x)}}{3}$	$0 < x < \frac{1}{3}$
4	$\frac{1+2x}{3} + \sqrt{\frac{x(1-x)}{3}}$	x	$\frac{1}{4}$	$\frac{3+x+4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{7}$	$0 < x < \frac{1}{4}$

Общая параметрическая формула для корней уравнения (11) при произвольном числе веществ имеет вид

$$c = \frac{1 + (n-2)x}{n-1} + \sqrt{\frac{x(1-x)}{n-1}}, x, \frac{1}{n},$$

$$\frac{n-1 + (n^2 - 5n + 5)x + 2(n^2 - 3n + 2)\sqrt{\frac{x(1-x)}{n-1}}}{n^2 - 3n + 3},$$

$$0 < x < \frac{1}{n}.$$

Поскольку в соотношении (10) можно произвольно переставлять между собой местами переменные x_i , а также переставлять местами переменные x_j , то уравнения стационарности, будучи справедливыми при исходном порядке расположения переменных, выполняются и после их перестановки. Поэтому три корня (17) приводят, например, при $n=4$, к девяти различным ВСС (одно с симметричными координатами $1/4, 1/4, 1/4, 1/4$ и по четыре ВСС, получающихся четырьмя возможными перестановками каждого из остальных двух корней). Отметим, однако, что иллюстрация множественности ВСС, которая обычно строится на плоскости двух из координат, например, в координатах x_1, x_2 , позволяет отразить не все ВСС, а только те из них, у которых отличаются эти координаты (хотя бы одна из них). Остальные ВСС при проектировании на плоскость (x_1, x_2) сливаются между собой (неразличимы в проекции на эту плоскость). Например, при $n = 4$ на плоскости (x_1, x_2) будут видны 7 из 9 ВСС, т.к. корни $\left(\frac{1-x}{3}, \frac{1-x}{3}, \frac{1-x}{3}, x\right), \left(\frac{1-x}{3}, \frac{1-x}{3}, x, \frac{1-x}{3}\right)$ при проектировании на плоскость (x_1, x_2) переходят в одну и ту же точку (x, x) . Аналогично, две точки $\left(\frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}, \frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}\right), \left(\frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}, \frac{3+x+4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{7}\right), \left(\frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}, \frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}\right), \left(\frac{3+x+4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{7}, \frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}\right)$ переходят в одну точку с координатами $\left(\frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}, \frac{4-x-4\sqrt{3}\sqrt{x(1-x)}}{21}\right)$.

Унимодальная функция (14) при $n = 4$ позволяет реализовать девять ВСС в пространстве (x_1, x_2, x_3, x_4) , причем семь из них отображаются в проекции на плоскость (x_1, x_2) в треуголь-

нике $0 \leq x_1, x_2, x_1 + x_2 \leq 1$, что проиллюстрировано на рис. 3.

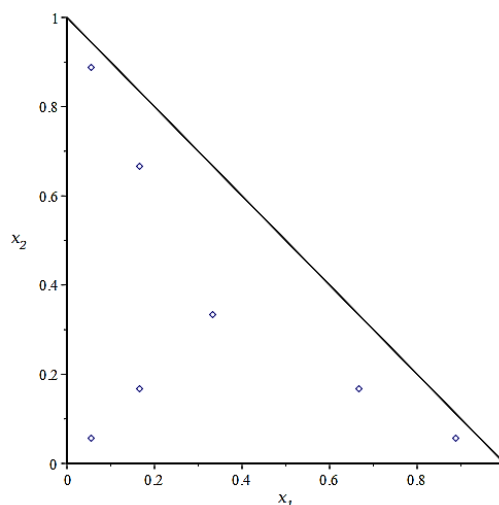


Рис. 3. Расположение проекции девяти ВСС в симплексе (x_1, x_2) для реакции, протекающей по схеме (1) при $n = 4$
Fig. 3. Arrangement of the projection of nine ISS in the simplex (x_1, x_2) for a reaction proceeding according to scheme (1) at $n = 4$

При $n = 2$ число ВСС равно трем, при $n = 3$ – семи, при $n = 4$ – девяти, из которых на рис. 3 видны семь. Анализ показал, что при увеличении размерности (количества веществ) n число ВСС возрастает до $2n + 1$ (при этом число видимых в проекции на плоскость любых двух из координат остается равным семи). Приведенные результаты получены при условии равенства значений констант скоростей стадий, отказ от этого ограничения также может привести к увеличению числа ВСС.

ВЫВОДЫ

Полученные результаты показывают возможность возникновения множественности внутренних стационарных состояний (ВСС) в реакции, протекающей по линейной стадийной схеме, с отличной от закона действующих масс неидеальной кинетикой. Установлен простейший вид неидеальной кинетической функции, допускающей девять ВСС.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence of a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кольцов Н.И. // *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. Вып. 8. С. 6-21. DOI: 10.6060/ivkkt.20236608.6793.
2. Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск: Наука. 1983. 254 с.
3. Быков В.И. Моделирование критических явлений в химической кинетике. М.: URSS. 2014. 328 с.
4. Constales D., Yablonsky G.S., D'hooge D.R., Thybaut J.W., Marin G.B. Advanced data analysis and modelling in chemical engineering. Amsterdam: Netherlands. Elsevier Inc. 2016. 399 p.
5. Bykov V.I., Tsybenova S.B., Yablonsky G.S. Chemical complexity via simple models. Berlin, New York: De Gruyter. 2018. 364 c. DOI: 10.1515/9783110464948.
6. Marin G.B., Yablonsky G.S., Constales D. Kinetics of Chemical Reactions: decoding complexity. Weinheim, Germany: Wiley-VCH. 2019. 464 p. DOI: 10.1002/9783527808397.
7. Кольцов Н.И., Федотов В.Х., Алексеев Б.В. // *Журн. физ. химии*. 1988. Т. 62. № 7. С. 1973-1975.
8. Кольцов Н.И., Алексеев Б.В., Кожевников И.В. Моделирование критических явлений в каталитических реакциях. Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та. 1998. 185 с.
9. Marcelin R. // *Ann. Phys.* 1915. V. 3. N 9. P. 120-231. DOI: 10.1051/anphys/191509030120.
10. Van Rysselberghe P. // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 29. P. 640-647. DOI: 10.1063/1.1744552.
11. Horn F, Jackson R. // *Arch. Rat. Mech. Anal.* 1972. V. 47. P. 81-116. DOI: 10.1007/BF00251225.
12. Де Донде Т., Ван Риссельберг П. Термодинамическая теория сродства. М.: Металлургия. 1984. 134 с.
13. Быков В.И., Иванова А.Н. // *Кинетика и катализ*. 1986. Т. 27. № 1. С. 73-79.
14. Кольцов Н.И. // *Журн. прикл. химии*. 2021. Т. 94. №. 4. С. 535-539. DOI: 10.31857/S0044461821040137.
15. Кольцов Н.И. // *Кинетика и катализ*. 2021. Т. 62. № 4. С. 404-409. DOI: 10.31857/S0453881121040055.
16. Кольцов Н.И. // *Хим. физика*. 2022. Т. 41. № 1. С. 3-8. DOI: 10.31857/S0207401X22010083.
17. Кольцов Н.И. // *Рос. хим. жс. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2022. Т. 66. № 1. С. 10-16. DOI: 10.6060/rcj.2022661.2.
18. Кольцов Н.И. // *Рос. хим. жс. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2022. Т. 66. № 2. С.3-7. DOI: 10.6060/rcj.2022662.1.
19. Кольцов Н.И. // *Кинетика и катализ*. 2022. Т. 63. № 6. С. 724-726. DOI: 10.31857/S0453881122060065.
20. Кольцов Н.И. *Рос. хим. жс. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. 67. № 2. С. 21-27. DOI: 10.6060/rcj.2023672.2.

REFERENCES

1. Kol'tsov N.I. // *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 8. P. 6-21. DOI: 10.6060/ivkkt.20236608.6793.
2. Yablonsky G.S., Bykov V.I., Gorban A.N. Kinetic models of catalytic reactions. Novosibirsk: Nauka. 1983. 254 p.
3. Bykov V.I. Modeling of critical phenomena in chemical kinetics. Moscow: URSS, 2014. 328 p.
4. Constales D., Yablonsky G.S., D'hooge D.R., Thybaut J.W., Marin G.B. Advanced data analysis and modelling in chemical engineering. Amsterdam: Netherlands. Elsevier Inc. 2016. 399 p.
5. Bykov V.I., Tsybenova S.B., Yablonsky G.S. Chemical complexity via simple models. Berlin, New York: De Gruyter. 2018. 364 c. DOI: 10.1515/9783110464948.
6. Marin G.B., Yablonsky G.S., Constales D. Kinetics of Chemical Reactions: decoding complexity. Weinheim, Germany: Wiley-VCH. 2019. 464 p. DOI: 10.1002/9783527808397.
7. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh., Alekseev B.V. // *Zhurn. Fiz. Khimii*. 1988. V. 62. N. 7. P. 1973-1975.
8. Kol'tsov N.I., Alekseev B.V., Kozhevnikov I.V. Modeling of critical phenomena in catalytic reactions. Cheboksary: Chuvash Publishing House University. 1998. 185 p.
9. Marcelin R. // *Ann. Phys.* 1915. V. 3. N 9. P. 120-231. DOI: 10.1051/anphys/191509030120.
10. Van Rysselberghe P. // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 29. P. 640-647. DOI: 10.1063/1.1744552.
11. Horn F, Jackson R. // *Arch. Rat. Mech. Anal.* 1972. V. 47. P. 81-116. DOI: 10.1007/BF00251225.
12. De Donde T., Van Risselberg P. Thermodynamic theory of affinity. Moscow: Metallurgy. 1984. 134 p.
13. Bykov V.I., Ivanova A.N. // *Kinetika i Kataliz*. 1986. V. 27. N. 1. P. 73-79.
14. Kol'tsov N.I. // *Russ. J. Appl. Chem.* 2021. V. 94. N. 4. P. 528-532. DOI: 10.1134/S1070427221040133.
15. Kol'tsov N.I. // *Kinetics and Catalysis*. 2021. V. 62. N. 4. P. 446-450. DOI: 10.1134/S0023158421040042.
16. Kol'tsov N.I. // *Russ. J. Phys. Chem. B*. 2022. V. 16. N. 1. P. 18-23. DOI: 10.1134/S1990793122010080.
17. Kol'tsov N.I. // *Ros. Khim. Zh.* 2022. V. 66. N. 1. P. 10-16. DOI: 10.6060/rcj.2022661.2.
18. Kol'tsov N.I. // *Russ. J. Gen. Chem.* 2022. V. 92. N. 12. P. 1-4. DOI: 10.1134/S1070363222120544.
19. Kol'tsov N.I. // *Kinetika i Kataliz*. 2022. V. 63. N. 6. P. 724-726. DOI: 10.31857/S0453881122060065.
20. Kol'tsov N.I. // *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N. 2. P. 21-27. DOI: 10.6060/rcj.2023672.2.

Поступила в редакцию 12.01.2026

Принята к опубликованию 27.04.2026

Received 12.01.2026

Accepted 27.04.2026