



KİMYA 99



# XIII. ULUSAL KİMYA KONGRESİ



31 Ağustos - 4 Eylül 1999  
SAMSUN



ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ  
FEN - EDEBİYAT FAKÜLTESİ  
KİMYA BÖLÜMÜ

## HOROWITZ-METZGER VE COATS-REDFERN KİNETİK YÖNTEMLERİ YARDIMIYLA PİROLİZ REAKSİYONLARININ KİNETİK ANALİZİNİ YAPAN BASIC PROGRAMI

Hakan ARSLAN<sup>a</sup>, Nilgün ÖZPOZAN<sup>b</sup> ve Talat ÖZPOZAN<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Mersin Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü / Mersin

<sup>b</sup> Erciyes Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü / Kayseri

BASIC programlama dilinde, "TERMAL Ver.1.00" PC programı yazıldı[1]. DOS işletim sistemli bilgisayarlarda kullanılmak üzere hazırlanan program; TG verilerini DTG verilerine çevirerek Horowitz-Metzger ve Coats-Redfern kinetik yöntemleri yardımıyla piroliz reaksiyonlarının kinetik analizini yaparak, piroliz reaksiyonlarının derecesini ( $n$ ), aktivasyon enerjisini ( $E^*$ ), pre-exponansiyel faktörünü ( $A$ ) ve aktivasyon entropisini ( $\Delta S^*$ ) hesaplamaktadır[2-5].

Program, TG analiz sonuçlarından sadece kütle değişiminin yüzde miktarı ve ilgili sıcaklığı veri olarak kullanılmaktadır. "TERMAL Ver. 1.00" programı her iki kinetik yöntem için üç farklı reaksiyon derecesine göre hesaplama yapabilmektedir.

Bunlar;

- Reaksiyon derecesini '1' kabul ederek,
- Deneysel verilerden hesaplanan reaksiyon derecesine göre [3],
- Rastgele seçilen reaksiyon derecesine göre.

"TERMAL Ver. 1.00", TG ve DTG grafiklerini çizebilmekte ve verilerin dökümünü yapabilmektedir. Program, TG ve DTG eğrilerinin daha detaylı incelenebilmesi için MS-EXCEL programı için çalışma dosyası hazırlamakta ve ayrıca daha nitelikli grafik çıktısı alınabilmektedir.

"TERMAL Ver. 1.00" programını başka araştırmacıların da kullanabilmesi için, "Kur.bat" adında toplu işlem dosyası hazırlanarak kurulum disketlerinden DOS işletim sistemli bilgisayarlara kurulabilmesi sağlandı.

Üzerinde önceden çalışma yapılmış olan  $\text{CaCO}_3$ 'ün piroliz reaksiyonu "Termal Ver. 1.00" programı ile incelenerek programın doğruluğu test edildi[2].

### KAYNAKLAR

- [1]. Gottfried, B.S., "Theory and problems of programming with Basic", McGRAW-Hill Book Comp., New York, USA, 1982
- [2]. Coats, A.W. and Redfern, J.P., Nature (London), 1964, 201, 68
- [3]. Horowitz, H.H. and Metzger, G., Anal. Chem., 1963, 35, 1464
- [4]. Arslan, H., Doktora tezi, Niğde Üniv. Fen-Bilimleri Ens., Niğde, 1998
- [5]. Kanturi, M.L., Katsoulos, G.A., Hadjikostas, C.C. and Kokorotsikos, P., J. Thermal Analysis, 1989, Vol.35, 24111-24122