С. И. С п и в а к, А. В. Х и л ь к о (Уфа, БашГУ). **Индукционный период химических реакций.**

Математически существование индукционного периода можно сформулировать так: пусть имеется система дифференциальных уравнений (ДУ), описывающих химическую реакцию $dx_i/dt = f_i(X, K)$, где $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $K = (k_1, k_2, \dots, k_r)$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, r$. Здесь n, r — количество веществ и элементарных стадий, x_i — вещества, участвующие в реакции, k_j — кинетические константы реакции. Согласно свойствам индукционного периода, для его существования требуется выполнение следующих двух условий:

1) на временном интервале $(0; T)$ изменение концентрации некоторого вещества x_i должно быть достаточно малым, т. е. $|x_i(T) - x_i(0)| \leq \varepsilon$ при малых ε ;

2) при выходе из этого интервала должно происходить резкое изменение концентрации этого вещества по сравнению с изменением на начальном интервале, т. е. $|x_i(T) - x_i(0)|/T \ll |x_i(T + \Delta T) - x_i(T)|/\Delta T$, где $\Delta T > 0$.

Имеются экспериментальные данные по некоторой химической реакции, обеспечивающие наличие индукционного периода, а также графики концентраций веществ, имеющих индукционный период. Задача ставится следующим образом: требуется найти кинетические константы, которые обеспечат наличие индукционного периода. При этом найденные кинетические константы должны обеспечить близость графиков, полученных по численным расчетам, с графиками, полученными в ходе эксперимента. На примере рассматривается реакция гидроалюминирования олефинов алкилаланами. Экспериментально реакция изучалась в лаборатории структурной химии Института нефтехимии и катализа РАН [1]. Система ДУ для этой реакции решена с использованием идеи разделения времен [2] и подобраны константы, обеспечивающие наличие индукционного периода и близость графиков, полученных по численным расчетам с экспериментальными графиками.

Далее проводится подсчет энергии активации для каждой кинетической константы и сравнение ее с энергией активации, полученной в результате эксперимента, и это сравнение показывает близость сравниваемых значений. Затем система ДУ решается методом Рунге–Кутты и строятся графики концентраций веществ. Эти графики совпадают с графиками веществ, полученными при решении системы ДУ с помощью методики [2]. Далее проводится проверка уравнений балансов для системы ДУ данной реакции, показывающая их сохранение для обоих методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Парфенова Л. В., Губайдуллин И. М., Балаев А. В., Халилов Л. М., Джемилев У. М. Теоретическое и экспериментальное изучение общего механизма действия Zr катализаторов в реакциях гидро-, карбо- и циклометаллирования олефинов. — В сб. материалов республиканской научно-практической конференции. Уфа: РИО БашГУ, 2006, с. 125–130.
2. Тропин А. В., Масленников С. И., Спивак С. И. Новый подход к решению нелинейных систем дифференциальных уравнений химической кинетики. — Кинетика и катализ, 1995, т. 36, № 5, с. 658–664.