

А. В. Х и л ь к о, С. И. С п и в а к (Уфа, БашГУ). **Математический анализ начального периода химических реакций.**

Типичным для начального этапа протекания химических реакций является факт существования периода. Это можно сформулировать так: пусть имеется система ДУ, описывающих химическую реакцию $dx_i/dt = f_i(X, K)$, где $X = (x_1, x_2, \dots, x_i)$, $K = (k_1, k_2, \dots, k_j)$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, r$. Здесь n , r — количество веществ и элементарных стадий, x_i — вещества, участвующие в реакции, k_j — кинетические константы реакции.

Согласно свойствам начального периода, для его существования требуется выполнение двух условий: 1) на 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 $\Delta T > 0$.

Для некоторой химической реакции имеются экспериментальные данные концентраций веществ, имеющих индукционный период. Требуется найти кинетические константы, которые обеспечат наличие индукционного периода и близость графиков, полученных по численным расчетам, с экспериментальными графиками. На примере рассматривается реакция гидроалюминирования олефинов алкилаланами [1]. Экспериментально реакция изучалась в лаборатории структурной химии Института нефтехимии и катализа РАН. Система ДУ для этой реакции решена с использованием идеи «разделения времен» [2] и найдены константы, обеспечивающие наличие индукционного периода и близость графиков, полученных по численным расчетам с экспериментальными графиками. Система ДУ решается методом Кутты–Мерсона и строятся графики концентраций веществ, которые совпадают с графиками веществ, полученными при решении системы ДУ с помощью методики [2]. Проводится проверка уравнений балансов, показывающая их сохранение для обоих методов. Для данной реакции были выделены ключевые константы, влияющие на индукционный период. Найдены ограничения на эти константы, обеспечивающие наличие индукционного периода.

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 (18–19 февраля 2006 г.). 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.