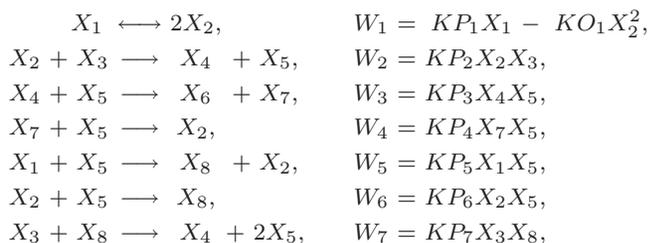


Т. Л. Малько, И. М. Губайдуллин (Уфа, БашГУ и ИНК РАН). **Кинетическая модель частной реакции взаимодействия димерного комплекса $Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2$ с олефинами.**

Дальнейшие химические и вычислительные эксперименты позволили детализировать модель реакции гидроалюминирования олефинов [1]. Последовательность химических превращений и кинетические уравнения частной реакции имеют следующий вид:



где $X_1 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]_2$, $X_2 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]$, $X_3 = CH_2CHR$, $X_4 = Cp_2ZrCl(CH_2CH_2R)$, $X_5 = HAlBu_2$, $X_6 = Bu_2Al(CH_2CH_2R)$, $X_7 = Cp_2ZrHCl$, $X_8 = [Cp_2ZrH_2 \cdot HAlBu_2 \cdot ClAlBu_2]$, $Bu^i = C_4H_9$, $Cp = C_5H_5$, $R = C_5H_4$, KP_i , KO_i — кинетические константы прямой и обратной стадии, соответственно, 1/с.

Для определения констант скоростей и энергии активации использована информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики (ИАС ОЗХК) [2]. В качестве метода обработки ИАС выбрана математическая модель в виде систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ).

Решение находили, перебирая по заданному алгоритму серию прямых задач с минимизацией критерия отклонения расчетных и экспериментальных данных.

В результате математической обработки химических экспериментальных данных были найдены кинетические константы и энергии активации соответствующих стадий:

T	KP_1	KP_2	KP_3	KP_4	KP_5	KP_6	KP_7	KO_1
5	3,23	2,13	25,0	2,48	243,19	50,57	0,0531	6,16
7	3,42	2,25	27,18	2,51	266,39	55,42	0,07	6,67
12	3,73	2,33	28,66	2,74	304,65	63,39	0,09	7,47

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Parfenova L. V., Balaev A. V., Gubaidullin I. M., Pechatkina S. V., Abzalilova L. R., Spivak S. I., Khalilov L. M., Dzhemilev U. M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by $HAlBu_2$ and $AlBu_2$ in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst. — Int. J. Chem. Kinet, 2007, v. 39, № 6, p. 333–339.
2. Губайдуллин И. М., Спивак С. И. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики. — Системы управления и информационные технологии, 2008, № 1.1 (31), с. 150–153.