

**Ю. С. Лаврентьева, И. М. Губайдуллин, Р. Н. Кадикова, И. Р. Рамазанов** (Уфа, ИНК РАН). **Построение кинетической модели реакции циклоалюминирования олефинов.**

В Институте нефтехимии и катализа РАН (ИНК РАН) ведутся исследования сложных реакций, катализируемых металлокомплексными катализаторами, путем параллельного проведения натурального и вычислительного эксперимента [1]. Вычислительный эксперимент проводится с использованием информационно-аналитической системы (ИАС) [2], которая включает математические модели прямой и обратной кинетических задач, методы и алгоритмы их решения, а также систему управления базой данных кинетических исследований. Прямая кинетическая задача — это задача расчета состава реагирующей смеси по заданной кинетической модели, обратная кинетическая задача — задача восстановления по экспериментальному материалу вида кинетической модели и ее параметров.

В лаборатории каталитического синтеза ИНК РАН, в группе под руководством к. х. н. доцента И. Р. Рамазанова ведутся исследования по определению реакционной способности олефиновых и ацетиленовых соединений в реакции циклоалюминирования. Реакция включает 9 стадий (из которых первая обратимая) с 13 веществами.

Были найдены значения кинетических констант при всех рассматриваемых температурах  $0^\circ$ ,  $18^\circ$ ,  $25^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $40^\circ$ ,  $50^\circ$  С для различных олефинов (октен-1, аллилнафталин, стирол, аллилбензол, норборнен, триметилвинилсилан) и ацетиленов (октин-1, фенилацетилен, октин-4).

На основании полученных результатов была построена кинетическая модель реакции и сделаны следующие физико-химические выводы.

1. Слабая тенденция роста  $k_7$  в случае октин-4 с увеличением температуры может быть связана с большими стерическими (пространственными) затруднениями, возникающими на стадии переметаллирования.

2. Реакционная способность октин-1 выше, чем у октин-4, что может быть вызвано большей поляризацией связей в октин-1.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Царева З. М., Орлова Е. А. Теоретические основы химтехнологии. Киев: ВШ, 1986, 271 с.
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.