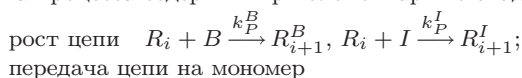


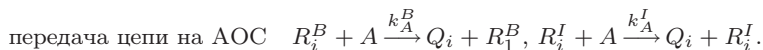
**Э. Р. Гиззатова, С. И. Спивак** (Уфа, БашГУ). **Постановка прямой кинетической задачи для процесса сополимеризации диенов на катализаторе Циглера—Натта.**

Успешное решение технологических задач получения сополимеров с заданными свойствами требует данные о механизме процессов, кинетических параметрах и количестве типов активных центров. Применение математического моделирования позволяет создавать модели процессов в различных условиях, зачастую недоступных в реальном эксперименте, а проведение вычислительных экспериментов дает возможность с минимальными затратами определять требуемые экспериментаторам параметры и прогнозировать качество продукта.

В работе, представленной данным докладом, рассматривается процесс сополимеризации диенов на ионно-координационной каталитической системе. Кинетическая схема процесса содержит три элементарные стадии:



$$\begin{aligned} R_i^B + B &\xrightarrow{k_M^{BB}} Q_i + R_1^B, \quad R_i^B + I \xrightarrow{k_M^{BI}} Q_i + R_i^I, \\ R_i^I + B &\xrightarrow{k_M^{IB}} Q_i + R_1^B, \quad R_i^I + I \xrightarrow{k_M^{II}} Q_i + R_i^I; \end{aligned} \quad (1)$$



Здесь  $R_i^B$  и  $R_i^I$  — активные цепи длиной  $i$  с концевыми звеньями бутадиена и изопрена соответственно,  $R_i$  — активная цепь длины  $i$  с произвольным концевым звеном,  $Q_i$  — неактивная сополимерная цепь длины  $i$  с произвольным концевым звеном,  $B$  и  $I$  — мономеры бутадиена и изопрена соответственно,  $A$  — алюминийорганическое соединение (АОС).

Процесс (1) математически описывается в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, каждое из которых характеризует скорость изменения концентрации отдельного реагента смеси.

На основании вышеизложенного можно поставить прямую кинетическую задачу: решить полученную систему дифференциальных уравнений с известными значениями констант скоростей элементарных стадий процесса (1), т. е. рассчитать значения всех функций, описывающих концентрации участвующих в процессе веществ, тем самым построить молекулярно-массовое распределение сополимерного продукта и вычислить значения молекулярных характеристик.

Таким образом, в работе поставлена прямая кинетическая задача построения молекулярно-массового распределения сополимера и определения средних молекулярных масс.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновации России» на 2009–2013 гг. ГК № 02.740.11.0648 от 29.03.2010.