АНАЛИЗ ФАЗОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ РЕАКЦИЙ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Шмидт А.Ф., Курохтина А.А., Ларина Е.В., Ярош Е.В.

Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, К. Маркса 1,
e-mail: aschmidt@chem.isu.ru

Установление фундаментальных закономерностей функционирования каталитических систем сложных реакций является нетривиальной исследовательской задачей в силу одновременного протекания в реакционных системах такого типа множества сопряженных последовательно-параллельных процессов. Исследования кинетических закономерностей протекания реакций являются одним из наиболее эффективных инструментов для изучения их механизмов. Нами предложен и апробирован подход, базирующийся на анализе закономерностей дифференциальной селективности каталитической реакции в условиях конкуренции нескольких (как минимум двух) однотипных субстратов с помощью так называемых фазовых траекторий конкурентных реакций, представляющих собой зависимости выходов продуктов конкурирующих реакций друг от друга[1]. Анализ закономерностей изменения фазовых траекторий при варьировании различных параметров проведения процесса, таких как природа и концентрация используемых субстратов и компонентов каталитических систем позволяет решать множество вопросов, возникающих при установлении механизмов каталитических реакций (природа интермедиатов, участвующих в элементарных стадиях каталитических циклов, степень обратимости стадий, механизм их сопряжения между собой, различение гомогенного и гетерогенного механизмов катализа). Основным преимуществом данного подхода перед традиционными кинетическими исследованиями скоростей реакций является независимость его результатов от существенно меняющихся в ходе процесса концентраций каталитически активных соединений, корректное определение которых обычно невозможно. В докладе обсуждаются результаты применения предлагаемого подхода к ряду реакций кросс-сочетания с арилбромидами и малореакционноспособными арилхлоридами, протекание которых осложнено интенсивно протекающими процессами дезактивации катализатора.

Литература
1. Schmidt A.F., Kurokhtina A.A., Larina E.V. Catal. Sci. Technol., 2014, 4, 3439.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 19-13-00051.