

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Исследование реакционной способности. Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/18-53-1-102 Подраздел: Органическая химия. Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/18-53-1-102>  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>  
Статья публикуется по материалам 2-го этапа *Мини-Симпозиума “Бутлеровское наследие – 17-18”* (г. Казань). УДК 541.14:547.551.2. Поступила в редакцию 16 января 2018 г.

## Анализ механизма радикально-цепного окисления этилбензола в присутствии добавок *N*-2-этилгексил-*N'*-фенил-*n*-фенилендиамин

© Шарипова<sup>1</sup> Гульназ Маратовна, Сафарова<sup>1</sup> Ирина Владимировна, Герчиков<sup>1\*</sup> Анатолий Яковлевич, Насыров<sup>2</sup> Ильдус Шайхитдинович и Булякова<sup>1</sup> Розалия Даниловна

<sup>1</sup> Кафедра физической химии и химической экологии. Башкирский государственный университет. ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 273-67-27. Факс: (347) 273-67-01. E-mail: \*) [gerchikov@inbox.ru](mailto:gerchikov@inbox.ru), <sup>+</sup> [gulnaz-sharipova@list.ru](mailto:gulnaz-sharipova@list.ru)  
<sup>2</sup> ОАО “Синтез-Каучук”. ул. Техническая, 14. г. Стерлитамак, 453110. Россия.

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** *N*-2-этилгексил-*N'*-фенил-*n*-фенилендиамин, ингибитор, математическая модель, кинетика.

### Аннотация

Одним из основных проблем современного производства в химии, медицине, пищевой промышленности является предотвращение нежелательных окислительных процессов. В настоящее время количественной характеристикой антиокислительной активности потенциального антиоксиданта является значение константы скорости ингибирования, определение которой доступно известными методами химической кинетики. Для выбора эффективного ингибитора окислительных процессов необходимо, кроме этого, определение оптимальных условий его действия и максимального торможения, которое он может обеспечить в конкретном процессе, что становится возможным только после установления механизма его действия. Для объяснения механизма действия антиоксидантов уже недостаточно применения методов физико-химического эксперимента, поскольку процесс ингибированного окисления включает большое число стадий с участием промежуточных частиц – атомов и радикалов, концентрация и время жизни которых чрезвычайно малы. Необходимым компонентом, позволяющим решить эту сложную проблему, является математическое моделирование механизма действия соединения на базе доступных экспериментальных результатов.

В связи с этим, целью настоящей работы стало исследование механизма антиокислительного действия *N*-2-этилгексил-*N'*-фенил-*n*-фенилендиамин (новантокс, 8-ПФДА) в реакции инициированного окисления этилбензола с помощью математического моделирования. Для достижения данной цели использовали программный комплекс «ХимКинОптима» и экспериментальные данные, полученные ранее. С помощью решения обратной задачи химической кинетики восстановлены все, в том числе и ранее неизвестные, константы скорости ключевых элементарных стадий. Путем решения прямой задачи химической кинетики получена полная кинетическая картина всех участников реакции, в том числе лабильных промежуточных соединений. Показано, что наличие примесей спирта в исходном соединении приводит к увеличению его антирадикального действия за счет реакции регенерации ингибитора в акте обрыва цепи с участием пероксильных радикалов спирта.

Достоверность теоретически полученных результатов исследования обеспечивается корректностью используемых методов компьютерного моделирования в соответствии с поставленными задачами и обеспечивается удовлетворительным совпадением расчетных и экспериментальных значений количественных параметров.