

На правах рукописи



**Багавеев Ильдар Маратович**

**КИНЕТИКА ГОМОГЕННО-КАТАЛИТИЧЕСКОГО ЭПОКСИДИРОВАНИЯ  
ПРОПИЛЕНА ГИДРОПЕРОКСИДОМ КУМОЛА**

1.4.14. Кинетика и катализ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата химических наук

Казань-2026

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ»).

**Научный руководитель:**

доктор химических наук, профессор  
**Улитин Николай Викторович**

**Официальные оппоненты:**

**Курганова Екатерина Анатольевна**

доктор химических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ярославский государственный технический университет», кафедра «Биотехнология и фармацевтический инжиниринг», профессор

**Ласкин Артем Игоревич**

кандидат химических наук, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Химический институт им. А.М. Бутлерова, НИЛ Материалы для водородной энергетики и традиционной энергетики с низким углеродным следом / сектор аккумуляирования водорода в жидком носителе, младший научный сотрудник

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, г. Москва

Защита диссертации состоится 26 июня 2026 года в 10<sup>00</sup> на заседании диссертационного совета 24.2.312.03, созданного на базе ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, корп. А, ауд. 330).

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах с подписями, заверенными печатью, просим направлять по адресу: 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, ученый совет. В отзыве указываются фамилия, имя, отчество, ученая степень (с указанием шифра и наименования научной специальности), ученое звание, должность с указанием структурного подразделения, телефон и адрес электронной почты (при наличии), наименование организации, почтовый адрес (п. 28 Положения о присуждении ученых степеней).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» и на сайте <https://www.kstu.ru/servlet/contentblob?id=586359>

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2026 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета 24.2.312.03,  
кандидат химических наук, доцент



Н.М. Нуруллина

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность и степень разработанности темы исследования

Оксид пропилена является ключевым сырьем для производства полиэфирполиолов, полиуретанов, пропиленгликоля, эфиров гликолей и поверхностно-активных веществ, в связи с чем объемы его мирового выпуска неуклонно растут. Среди промышленных способов получения оксида пропилена – хлоргидринного, гидропероксидных (с использованием гидропероксидов *трет*-бутила, этилбензола или кумола) и пероксидного (с использованием пероксида водорода) – наиболее перспективным с экологической и экономической точек зрения признан метод эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола. Его преимущества заключаются в отсутствии крупнотоннажных побочных продуктов, возможности регенерации кумола гидрогенолизом диметилфенилкарбинола и интеграции с действующими производствами фенола и ацетона. Известно, что использование изопропилового спирта как растворителя позволяет повысить конверсию гидропероксида кумола и селективность по оксиду пропилена, а также решить проблему избыточного ацетона на производстве фенола и ацетона. В промышленности для процесса эпексидирования пропилена гидропероксидами продолжают использовать гомогенные молибденсодержащие катализаторы, получаемые растворением металлического молибдена в смесях гидропероксида и спирта, благодаря простоте синтеза и доступности реагентов.

Анализ работ по кинетическому моделированию эпексидирования олефинов показал, что ни одна из существующих кинетических моделей не рассматривает процесс эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола, что, по-видимому, связано со сложностью проведения кинетических экспериментов по этому процессу в лаборатории. Также необходимо отметить, что в основу кинетических моделей процессов эпексидирования различных олефинов гидропероксидом кумола заложены предельно общие кинетические схемы, не учитывающие радикально-цепной характер процессов. Кроме того, отсутствуют исследования кинетики процесса в промышленных условиях. В связи со всем вышесказанным **актуальна** задача выявления кинетических закономерностей эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола на уровнях элементарных химических реакций и промышленного процесса, что стало **целью настоящей диссертации**.

Для достижения поставленной цели в диссертации решали следующие **задачи**:

- 1) получение свода надежных экспериментальных кинетических данных по процессу эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии гомогенного молибденового катализатора в широком диапазоне температур, концентраций реагентов и катализатора;
- 2) построение и редуционный анализ с помощью кинетического моделирования радикально-цепной схемы элементарных реакций процесса;
- 3) анализ закономерностей процесса в промышленных условиях с помощью кинетического моделирования на основе формально-кинетической схемы реакций процесса.

Диссертационное исследование выполнено при финансовой поддержке гранта, предоставленного Академией наук Республики Татарстан образовательным организациям высшего образования, научным и иным организациям на поддержку планов развития кадрового потенциала в

части стимулирования их научных и научно-педагогических работников к защите докторских диссертаций и выполнению научно-исследовательских работ (Соглашение №10/2025-ПД-КНИТУ от 22.12.2025).

### **Научная новизна работы**

Построена и параметризована по экспериментальным данным кинетическая модель эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта. На основе результатов анализа чувствительности модели к изменению ее параметров (предэкспоненциальных множителей и энергий активации в температурных аррениусовских зависимостях констант скоростей реакций) установлена редуцированная кинетическая схема процесса, более простая по сравнению с изначально используемой при построении модели радикально-цепной кинетической схемой элементарных реакций процесса и включающая каталитические реакции зарождения цепи из гидропероксида кумола, каталитические реакции продолжения цепи из кумилокисильного и кумилпероксильного радикалов, некаталитические и каталитические реакции продолжения цепи из гидропероксильного радикала, некаталитические реакции обрыва цепи и отдельные некаталитические и каталитические молекулярные реакции.

Предложена формально-кинетическая схема процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта, включающая реакции образования оксида пропилена, распада гидропероксида кумола и пероксида дикумила и получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола. На основе этой схемы построена и параметризована по экспериментальным данным кинетическая модель, анализ чувствительности которой к изменению ее параметров доказал правомочность предложенной схемы. Предложенная формально-кинетическая схема процесса позволила адекватно описать закономерности процесса на промышленном уровне.

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Установленная кинетическая схема эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии гомогенного молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта, включающая радикально-цепные стадии зарождения, продолжения и обрыва цепи, а также молекулярные превращения, может быть распространена на процессы эпексидирования других олефинов органическими гидропероксидами, катализируемые соединениями молибдена. Выявленные закономерности влияния изопропилового спирта как компонента реакционной среды на показатели процесса могут быть использованы при разработке и оптимизации других каталитических систем, включающих добавки спиртов.

Кинетические модели гомогенно-каталитического эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола: а) могут служить отправными точками для разработки кинетических моделей процессов эпексидирования других олефинов (например, октена-1, стирола) гидропероксидами различного строения в присутствии молибденсодержащих катализаторов; б) могут использоваться в качестве научного базиса для проектирования и оптимизации промышленного производства оксида пропилена.

## **Методология и методы исследования**

Результаты работы получены по итогам решения обратных и прямых кинетических задач. Уравнения кинетической модели записывались по закону действующих масс и решались численно неявным методом BDF 5-го порядка. Обратные кинетические задачи решались путем минимизации методом прямого поиска нулевого порядка функционала расхождения между данными, рассчитанными с использованием кинетических моделей, и соответствующими экспериментальными данными. В качестве экспериментальных данных использовали данные по концентрациям компонентов реакционной смеси, полученные методом газовой хроматографии (хроматограф с пламенно-ионизационным детектором и капиллярной колонкой с полярной неподвижной фазой) и иодометрического титрования (определение гидропероксида кумола). Концентрацию молибдена в катализаторном растворе определяли методом ванадатометрии. Реализация численного решения обратных и прямых кинетических задач осуществлялась в системе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica. Моделирование процесса в промышленных условиях проводилось в универсальной моделирующей программе Aspen HYSYS.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Результаты кинетического моделирования на основе радикально-цепной схемы элементарных реакций процесса эпоксирирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта.

2. Результаты кинетического моделирования на основе формально-кинетической схемы элементарных реакций процесса эпоксирирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта.

3. Результаты моделирования процесса на промышленном уровне.

**Достоверность результатов работы и обоснованность положений, выносимых на защиту**, обусловлена получением результатов работы с помощью общепринятых надежных методов кинетического моделирования и согласованием результатов расчетов с экспериментальными данными.

**Личный вклад автора** заключается в сборе и анализе литературных данных, реализации решения задач исследования, анализе результатов, формулировании заключения и участии в написании и подготовке публикаций. Работа выполнена на кафедре общей химической технологии ФГБОУ ВО «КНИТУ».

### **Соответствие специальности**

Диссертация соответствует следующим пунктам паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ: п. 1. в части «Скорости элементарных и сложных химических превращений в гомогенных, микрогетерогенных и гетерогенных системах. Экспериментальные исследования и теория скоростей химических превращений»; п. 2. в части «Установление механизма действия катализаторов. Изучение элементарных стадий и кинетических закономерностей протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений».

### **Апробация результатов работы**

Результаты обсуждались на VII Всероссийской молодежной конференции «Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений» (Уфа, 2023), IX Всероссийской (заочной) научной конференции «Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров» (Уфа, 2024), Всероссийской молодежной научной конференции «Актуальные проблемы биологии, экологии и химии» (Ярославль, 2024), II Международной научной студенческой конференции, посвященной 220-летию КФУ «Актуальные вопросы химии 21 века» (Казань, 2024), IV Всероссийской научной конференции (с международным участием) преподавателей и студентов вузов «Актуальные проблемы науки о полимерах» (Казань, 2024), X Всероссийской молодежной конференции «Достижения молодых ученых: химические науки» (Уфа, 2025).

### **Публикации**

Результаты работы представлены в 3 статьях в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для размещения материалов диссертаций, и в 6 публикациях в сборниках материалов конференций.

### **Структура и объем работы**

Диссертация изложена на 103 страницах, содержит 22 рисунка и 14 таблиц, состоит из введения, трех глав, заключения и списка источников, насчитывающего 124 наименования.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**В главе 1** рассмотрены промышленные способы получения оксида пропилена, проведен анализ катализаторов процессов эпоксицирования олефинов гидропероксидами и механизмов эпоксицирования олефинов гидропероксидами в присутствии соединений молибдена. Проанализировано влияние растворителей на процесс эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола. Представлен анализ литературных источников по кинетическому моделированию процессов эпоксицирования олефинов пероксосоединениями. Установлено, что в основу рассмотренных кинетических моделей процессов эпоксицирования различных олефинов гидропероксидом кумола заложены предельно общие кинетические схемы, не учитывающие радикально-цепной характер процессов. Рассмотрены подходы к моделированию химических процессов в промышленных условиях. Выявлено, что отсутствуют исследования кинетики процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола в промышленных условиях.

**В главе 2** приведены характеристики исходных веществ, изложена методика синтеза молибденового катализатора, а также методика исследования кинетики процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта..

**В главе 3** представлены результаты экспериментального исследования и кинетического моделирования процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии гомогенного молибденового катализатора. Экспериментально определены оптимальные условия синтеза катализатора (растворение металлического молибдена в смеси промышленного оксидата

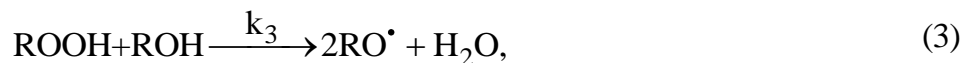
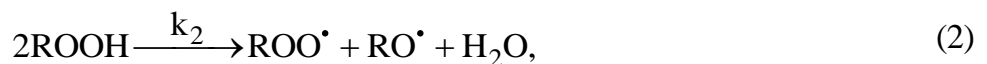
кумола и изопропилового спирта при 343 К) и проведения процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола (эквимолярное соотношение изопропиловый спирт : гидропероксид кумола, молярное соотношение пропилен : гидропероксид кумола 6 : 1, температура 388 К, начальная концентрация катализатора в реакционной смеси  $[Mo]_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  г-ат/моль на 1 моль гидропероксида кумола), обеспечивающие конверсию гидропероксида кумола  $\sim 94\%$ , селективность по оксиду пропилену  $\sim 84\%$  и выход целевого продукта  $\sim 77-80\%$ .

Кинетические исследования некаталитического и каталитического эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола проведены в температурном диапазоне 323-363 К при начальной концентрации гидропероксида кумола  $\sim 1$  моль/л; проведение экспериментов при более высоких температурах невозможно вследствие резкого скачка температуры в начальный момент реакции. Кинетическую схему процесса эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола составили на основе литературных данных и качественного анализа реакционной смеси методом газовой хромато-масс-спектрометрии. Кинетическая схема некаталитического эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола включает в себя реакции радикального распада гидропероксида кумола ((1)-(3), (5)-(13)), молекулярную реакцию распада гидропероксида кумола на фенол и ацетон (14), реакцию распада пероксида дикумила на радикалы (4) и реакцию получения оксида пропилену (15).

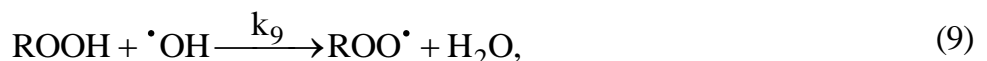
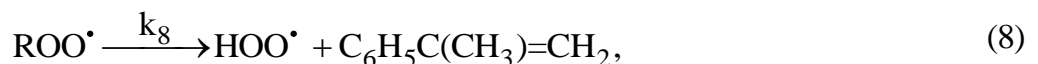
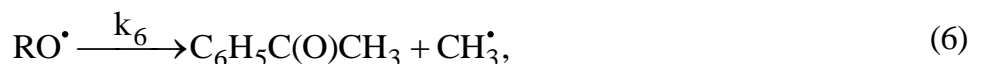
В реакционной смеси процесса эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола хроматографически также обнаружили 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенол и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензол. На основе этого кинетическую схему процесса эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола дополнили реакциями получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (16) и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола (17).

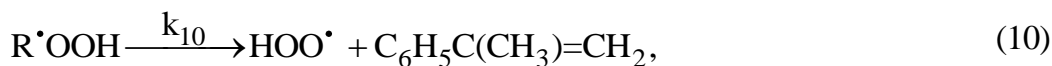
Кинетическая схема некаталитического процесса  
эпоксицирования пропилену гидропероксидом кумола

Зарождение цепи:



Продолжение цепи:

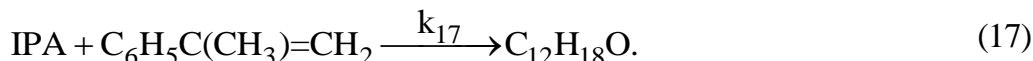
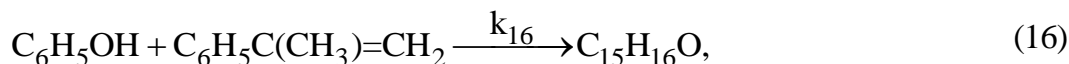
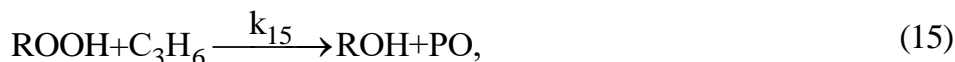




Обрыв цепи:



Молекулярные реакции:



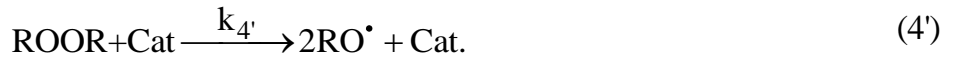
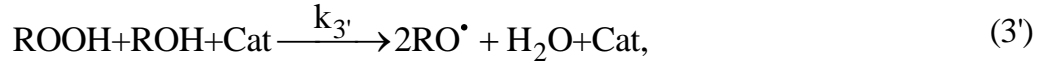
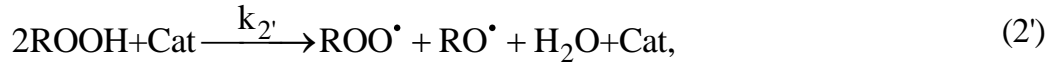
Здесь ROOH – гидропероксид кумола, RO<sup>•</sup> – кумилокисильный радикал, <sup>•</sup>OH – гидроксильный радикал, ROO<sup>•</sup> – кумилпероксильный радикал, H<sub>2</sub>O – вода, ROH – диметилфенилкарбинол, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>C(O)CH<sub>3</sub> – ацетофенон, CH<sub>3</sub><sup>•</sup> – метильный радикал, R<sup>•</sup>OOH – гидропероксидный кумильный радикал, HOO<sup>•</sup> – гидропероксильный радикал, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>C(CH<sub>3</sub>)=CH<sub>2</sub> – α-метилстирол, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> – пероксид водорода, ROOR – пероксид дикумила, O<sub>2</sub> – кислород, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH – фенол, CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub> – ацетон, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> – пропилен, PO – оксид пропилена, C<sub>15</sub>H<sub>16</sub>O – 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенол, IPA – изопропиловый спирт, C<sub>12</sub>H<sub>18</sub>O – (1-изопропокси-1-метилэтил)бензол.

При построении кинетической схемы каталитического процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола полагали, что катализатор участвует на каждой стадии, поэтому каждая некаталитическая реакция может быть продублирована аналогичной каталитической реакцией.

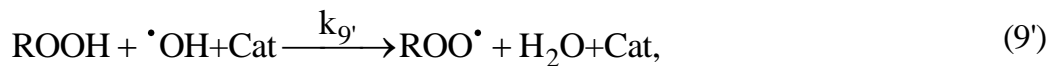
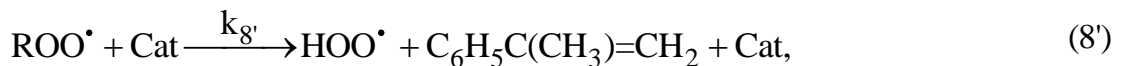
В итоге получили кинетическую схему, состоящую из 17 некаталитических реакций и 51 реакции, в которых присутствует катализатор. Кинетическую модель записали по закону действующих масс на основе полученной кинетической схемы в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих скорости изменения концентраций всех веществ реакционной смеси. Константы скоростей реакций в модели задали в виде функций от температуры по уравнению Аррениуса  $k = Ae^{-E/(RT)}$ . Здесь A – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации, Дж/моль; R = 8.31 Дж/(моль·К); T – температура, К. Для решения обратной кинетической задачи по поиску параметров уравнения Аррениуса для каждой константы скорости реакции использовали метод прямого поиска нулевого порядка (метод Хука-Дживса). Реализацию решения обратной кинетической задачи осуществили в программе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica. Для численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений использовали неявный BDF метод 5-го порядка. Обратную кинетическую задачу для такой кинетической схемы решить не удалось, поэтому каждый каталитический цикл записали упрощенно в виде одной каталитической реакции, оставив в левой части вход катализатора в каталитический

цикл, а в правой части – выход катализатора из цикла. Это позволило уменьшить размерность обратной кинетической задачи в 2 раза. В итоге получили следующую кинетическую схему.

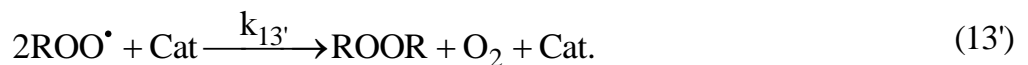
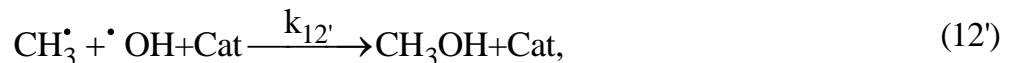
Зарождение цепи:



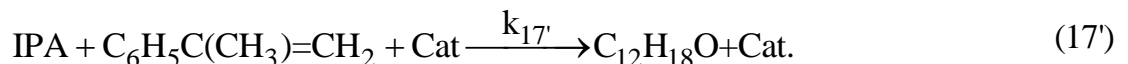
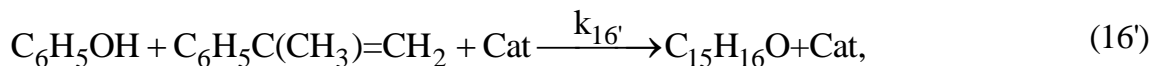
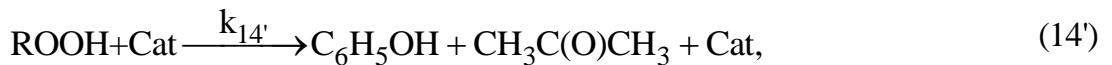
Продолжение цепи:



Обрыв цепи:



Молекулярные реакции:



Поскольку истинная концентрация катализатора была неизвестна, в результате решения обратной кинетической задачи определяли произведение констант скоростей реакций на концентрацию катализатора  $k_{0j}$ , а не истинные значения констант скоростей реакций:  $k_{0j} = k_j \cdot [\text{Cat}]$ , где  $j$  – порядковый номер реакции,  $k_j$  – истинное значение константы скорости соответствующей каталитической реакции,  $[\text{Cat}]$  – концентрация катализатора.

Кинетическую модель записали по закону действующих масс на основе полученной кинетической схемы в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих

скорости изменения концентраций всех веществ реакционной смеси. Оценку чувствительности модели к изменению параметров А и Е провели с использованием интервалов неопределенности. Найденные в результате решения обратной кинетической задачи значения параметров А и Е и результаты оценки чувствительности модели к изменению параметров А и Е представлены в табл. 1. Сопоставление результатов расчета по модели с найденными параметрами А и Е и результатов экспериментов представлено на рис. 1 и 2.

Таблица 1

Значения параметров А и Е (результаты решения обратной кинетической задачи)					
k	$A_{\text{некат}}$	$E_{\text{некат}}$ , Дж/моль	$E_{\text{кат}}$ , Дж/моль	$A_{\text{кат}}$	k
Зарождение цепи					
<b>k<sub>1</sub></b>	<b>2.26·10<sup>7</sup></b>	<b>90000-7200</b>	82000 <sup>+22200</sup> <sub>-2500</sub>	1.04 <sup>+1.78</sup> <sub>-0.46</sub> · 10 <sup>7</sup>	<b>k<sub>01</sub></b>
<b>k<sub>2</sub></b>	<b>4.05·10<sup>5</sup></b>	<b>8360-13400</b>	73000 <sup>+6600</sup> <sub>-2900</sub>	4.97 <sup>+11.18</sup> <sub>-2.24</sub> · 10 <sup>5</sup>	<b>k<sub>02</sub></b>
<b>k<sub>3</sub></b>	<b>7.55·10<sup>9</sup></b>	<b>110000-12100</b>	<b>74000-8900</b>	<b>1.41·10<sup>5</sup></b>	<b>k<sub>03</sub></b>
<b>k<sub>4</sub></b>	<b>9.01·10<sup>4</sup></b>	<b>109000</b>	<b>85900-4200</b>	<b>4.19<sup>+15.10</sup>·10<sup>7</sup></b>	<b>k<sub>04</sub></b>
Продолжение цепи					
<b>k<sub>5</sub></b>	<b>1.75·10<sup>10</sup></b>	<b>101900-9200</b>	<b>74500-11200</b>	<b>9.68·10<sup>5</sup></b>	<b>k<sub>05</sub></b>
<b>k<sub>6</sub></b>	<b>2.37<sup>+8.53</sup>·10<sup>6</sup></b>	<b>85200-4300</b>	106800 <sup>+9600</sup> <sub>-4300</sub>	1.18 <sup>+1.06</sup> <sub>-0.32</sub> · 10 <sup>10</sup>	<b>k<sub>06</sub></b>
<b>k<sub>7</sub></b>	<b>8.12<sup>+11.69</sup>·10<sup>9</sup></b>	<b>101800-7100</b>	<b>65600-3300</b>	<b>2.88<sup>+0.78</sup>·10<sup>5</sup></b>	<b>k<sub>07</sub></b>
<b>k<sub>8</sub></b>	<b>3.52<sup>+4.44</sup>·10<sup>9</sup></b>	<b>102100-4100</b>	82400 <sup>+29700</sup> <sub>-4100</sub>	6.52 <sup>+7.63</sup> <sub>-1.30</sub> · 10 <sup>6</sup>	<b>k<sub>08</sub></b>
<b>k<sub>9</sub></b>	<b>1.51·10<sup>9</sup></b>	<b>101800-21400</b>	<b>75800-13600</b>	<b>4.23·10<sup>6</sup></b>	<b>k<sub>09</sub></b>
<b>k<sub>10</sub></b>	<b>2.20<sup>+9.70</sup>·10<sup>9</sup></b>	<b>101800-9200</b>	<b>76500-5400</b>	<b>2.03<sup>+2.38</sup>·10<sup>6</sup></b>	<b>k<sub>010</sub></b>
<b>k<sub>11</sub></b>	<b>5.92·10<sup>5</sup></b>	<b>87100</b>	<b>78600</b>	<b>1.52·10<sup>5</sup></b>	<b>k<sub>011</sub></b>
Обрыв цепи					
<b>k<sub>12</sub></b>	3.70 <sup>+4.54</sup> <sub>-3.40</sub> · 10 <sup>9</sup>	104000 <sup>+7600</sup> <sub>-5300</sub>	<b>104000</b>	<b>5.06·10<sup>9</sup></b>	<b>k<sub>012</sub></b>
<b>k<sub>13</sub></b>	9.81 <sup>+18.94</sup> <sub>-3.37</sub> · 10 <sup>12</sup>	114000 <sup>+10300</sup> <sub>-9100</sub>	<b>107900-10800</b>	<b>6.07·10<sup>11</sup></b>	<b>k<sub>013</sub></b>
Молекулярные реакции					
<b>k<sub>14</sub></b>	5.26 <sup>+18.94</sup> <sub>-3.37</sub> · 10 <sup>10</sup>	103200 <sup>+18600</sup> <sub>-4100</sub>	<b>85800-18000</b>	<b>1.59·10<sup>6</sup></b>	<b>k<sub>014</sub></b>
<b>k<sub>15</sub></b>	<b>9.14·10<sup>20</sup></b>	<b>198600-15900</b>	85200 <sup>+600</sup> <sub>-900</sub>	4.12 <sup>+0.37</sup> <sub>-0.78</sub> · 10 <sup>7</sup>	<b>k<sub>015</sub></b>
<b>k<sub>16</sub></b>	1.62 <sup>+1.75</sup> <sub>-0.31</sub> · 10 <sup>16</sup>	143500 <sup>+13000</sup> <sub>-13000</sub>	<b>97500-34100</b>	<b>1.71·10<sup>7</sup></b>	<b>k<sub>016</sub></b>
<b>k<sub>17</sub></b>	<b>5.15·10<sup>13</sup></b>	<b>138000-12400</b>	155500 <sup>+14000</sup> <sub>-18700</sub>	2.59 <sup>+0.52</sup> <sub>-1.55</sub> · 10 <sup>16</sup>	<b>k<sub>017</sub></b>

Размерность А для мономолекулярных реакций – 1/с, для бимолекулярных реакций – л/(моль·с).

Отсутствие нижней границы интервала неопределенности параметра означает, что значение нижней границы равно 0 (это говорит о том, что слагаемые уравнений, содержащие данный параметр, могут быть исключены из модели без превышения средней относительной погрешности F выше допустимого значения 0.20; полужирным шрифтом выделены константы скоростей для реакций, которые могут быть исключены из кинетической схемы).

Отсутствие верхней границы интервала неопределенности параметра означает, что значение верхней границы, как минимум, в десять раз больше значения самого параметра.

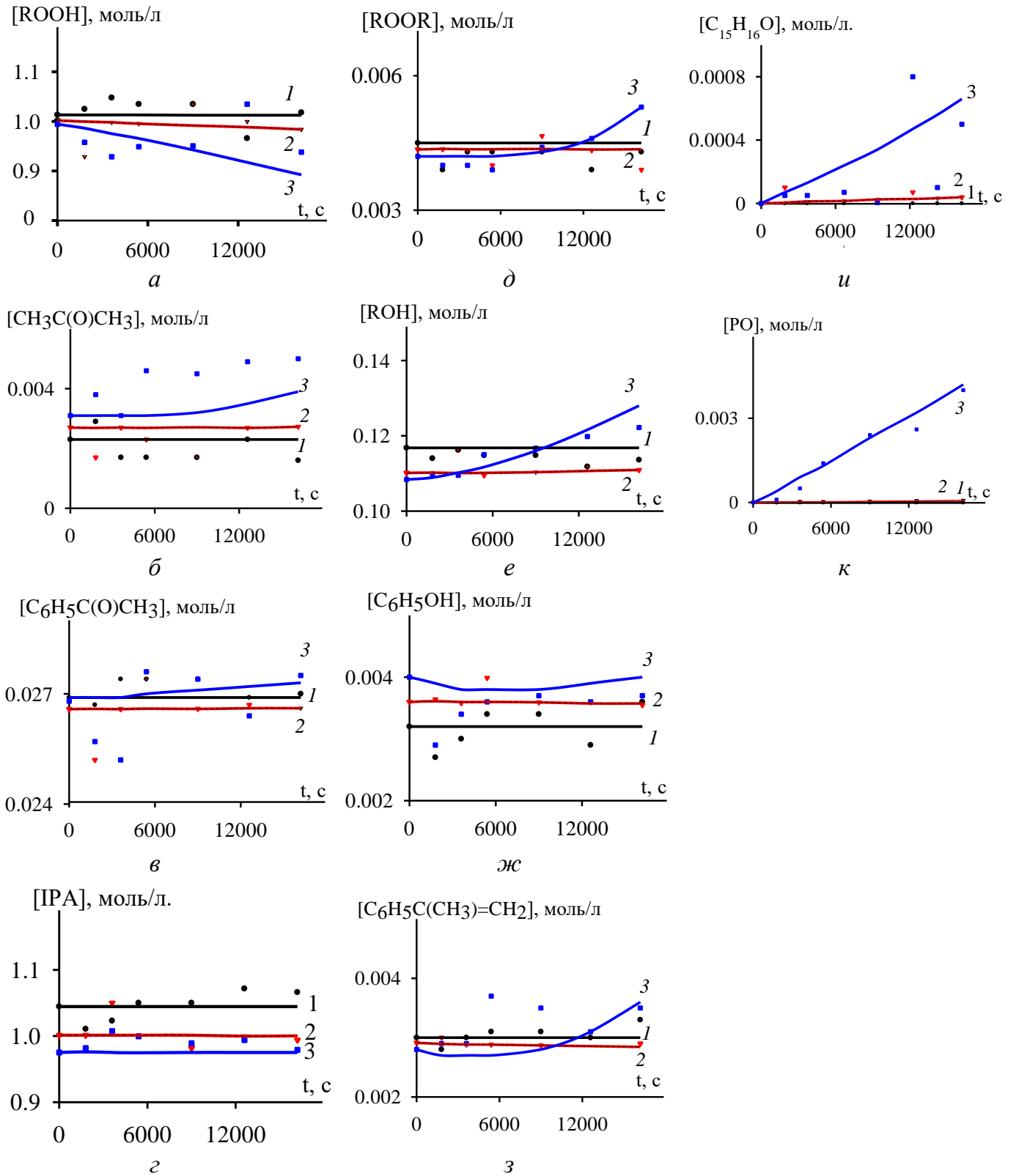


Рис. 1. Временные зависимости концентраций гидропероксида кумола (а), ацетона (б), ацетофенона (в), изопропилового спирта (г), пероксида дикумила (д), диметилфенилкарбинола (е), фенола (ж),  $\alpha$ -метилстирола (з), 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (и), оксида пропилена (к) в некаталитическом эпоксицировании пропилена гидропероксидом кумола; условия:  $T = 323$  (1, ●),  $343$  (2, ▼),  $363$  (3, ■) К;  $P = 25$  атм; точки – эксперимент, линии – расчет

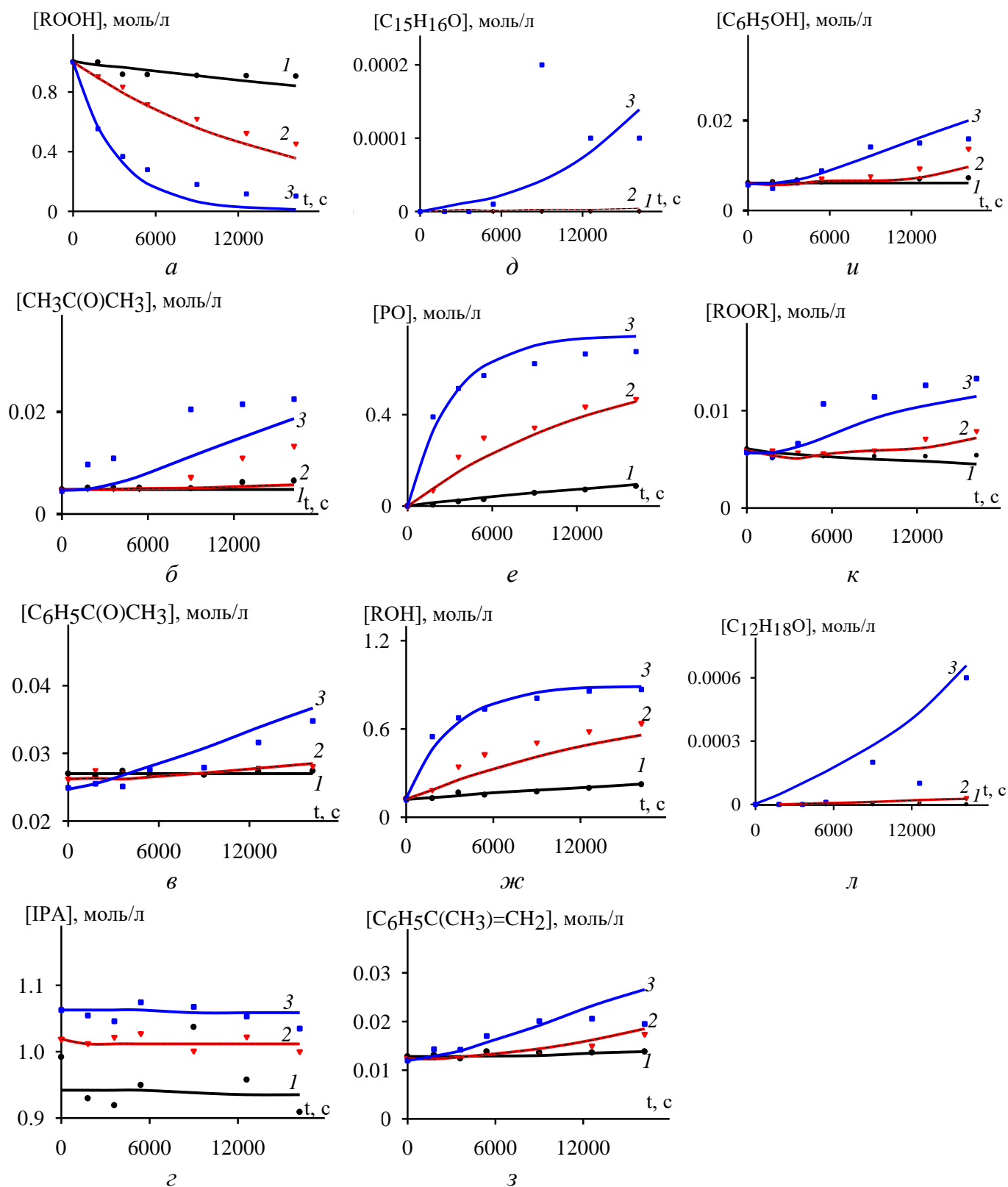
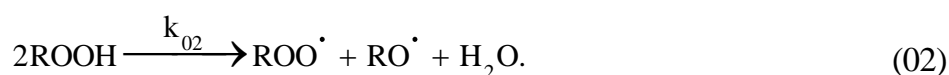


Рис. 2. Временные зависимости концентраций гидропероксида кумола (а), ацетона (б), ацетофенона (в), изопропилового спирта (г), 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (д), оксида пропилена (е), диметилфенилкарбинола (ж),  $\alpha$ -метилстирола (з), фенола (и), пероксида дикумила (к), (1-изопрокси-1-метилэтил)бензола (л) в каталитическом эпексидировании пропилена гидропероксидом кумола; условия:  $T = 323$  (1, ●),  $343$  (2, ▼),  $363$  (3, ■) К; начальная концентрация катализатора  $[Mo]_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  г-ат/моль на 1 моль гидропероксида кумола;  $P = 25$  атм; точки – эксперимент, линии – расчет

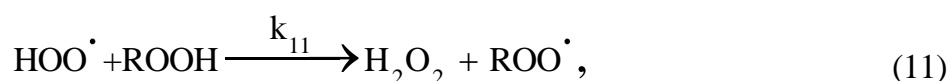
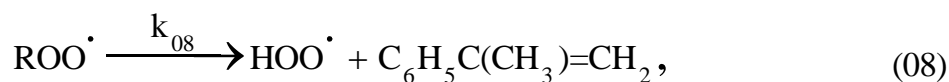
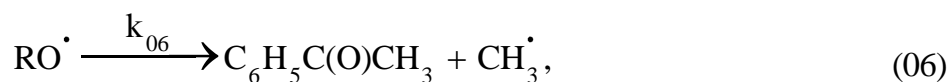
Модель удовлетворительно описала экспериментальные данные по некаталитическому (начальная концентрация гидропероксида кумола  $[\text{ROOH}]_0 = 1$  моль/л, температура  $T = 323\text{-}363$  К, давление  $P = 25$  атм, рис. 1) и каталитическому (начальная концентрация гидропероксида кумола  $[\text{ROOH}]_0 = 1$  моль/л, начальная концентрация катализатора  $[\text{Mo}]_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  г-ат/моль на 1 моль гидропероксида кумола, температура  $T = 323\text{-}363$  К, давление  $P = 25$  атм, рис. 2) процессам эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола.

Нижняя граница интервалов неопределенности  $A_l$  с  $l = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 17, 03, 04, 05, 07, 09, 010, 011, 012, 013, 014, 016$  равна 0. Это означает, что зануление данных  $A_l$  (и, следовательно, зануление соответствующих  $k_l$ ) не приведет к увеличению средней относительной погрешности  $F$  выше допустимого значения 0.20. То есть из кинетической схемы могут быть исключены реакции с соответствующими номерами. Окончательная кинетическая схема процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола имеет следующий вид.

Зарождение цепи:



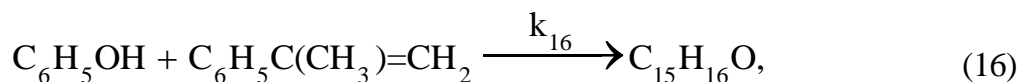
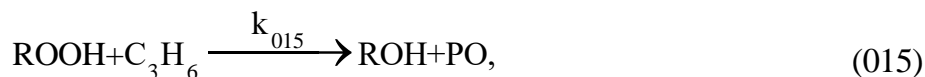
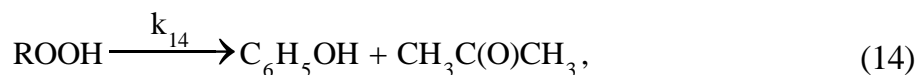
Продолжение цепи:

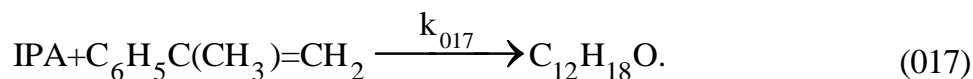


Обрыв цепи:



Молекулярные реакции:





Несмотря на то, что реакции (11) и (011) оказались кинетически незначимыми, они должны присутствовать в схеме, поскольку эти реакции являются единственными, в которых расходуется гидропероксильный радикал.

Таким образом, предложена радикально-цепная схема элементарных реакций процесса, включающая некаталитические реакции зарождения, продолжения и обрыва цепи и молекулярные реакции, и аналогичные им каталитические реакции. В кинетической модели на основе этой схемы участие катализатора учтено в неявном виде через запись констант скоростей реакций. Анализ этой схемы с помощью кинетического моделирования позволил редуцировать ее к схеме, включающей каталитические реакции зарождения цепи из гидропероксида кумола, каталитические реакции продолжения цепи из кумилоксильного и кумилпероксильного радикалов, некаталитические и каталитические реакции продолжения цепи из гидропероксильного радикала, некаталитические реакции обрыва цепи и отдельные некаталитические и каталитические молекулярные реакции. Построенная на ее основе кинетическая модель адекватно описывает экспериментальные данные по временным изменениям концентраций компонентов реакционной смеси в диапазоне температур 323-363 К. Эта модель может служить для выявления закономерностей процесса, обеспечиваемых протеканием элементарных реакций, но она непригодна для непосредственного использования в универсальных моделирующих программах для анализа закономерностей процесса в промышленных условиях, поскольку такие программы не воспринимают реакции с участием короткоживущих частиц – радикалов, ионов. Данная задача требует создания кинетической модели на основе более компактной формально-кинетической схемы, включающей только брутто-реакции.

Для анализа закономерностей процесса в промышленных условиях использовали универсальную моделирующую программу Aspen HYSYS. Aspen HYSYS не позволяет непосредственно учитывать реакции с участием радикалов, поскольку расчет кинетики в ней базируется на формальных стехиометрических уравнениях с эффективными константами скоростей. Для анализа закономерностей процесса в промышленных условиях используют интегральные характеристики процесса: конверсию гидропероксида, селективность по целевому продукту (оксиду пропилена) и скорости образования целевого и побочных веществ.

Поэтому построили формально-кинетическую схему процесса эпоксидирования пропилена гидропероксидом кумола, состоящую только из молекулярных брутто-реакций и описывающую превращения ключевых компонентов. Брутто-реакции не содержат радикалов. Каждой брутто-реакции соответствует своя эффективная константа скорости, температурная зависимость которой подчиняется уравнению Аррениуса. Кинетическая модель на основе такой формально-кинетической схемы может быть непосредственно встроена в Aspen HYSYS и использована для расчета каскада реакторов смешения.

Формально-кинетическая схема эпоксидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденового катализатора (табл. 2) включает в себя реакции образования оксида

пропилена (1), распада гидропероксида кумола ((2)-(5)) и распада пероксида дикумила (7). Схему дополнили реакциями (8) и (9) получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола. В итоге рассматривали кинетическую схему представленную в табл. 2.

Кинетическую модель записали по закону действующих масс на основе предложенной кинетической схемы в виде системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих скорости изменения концентраций всех веществ реакционной смеси. Константы скоростей реакций в модели задали в виде функций от температуры по уравнению Аррениуса  $k = Ae^{-E/RT}$ .

Для решения обратной задачи по поиску параметров уравнения Аррениуса для каждой константы скорости реакции (табл. 2) использовали метод прямого поиска нулевого порядка, который хорошо себя зарекомендовал при решении подобного рода обратных задач. Реализацию решения обратной задачи осуществили в программе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica. Для численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений использовали неявный BDF метод 5-го порядка.

Сопоставление результатов расчета по модели с найденными коэффициентами и результатов экспериментов продемонстрировано на рис. 3. Оценку чувствительности модели к изменению коэффициентов А и Е провели с использованием интервалов неопределенности каждого коэффициента А и Е. Результаты оценки чувствительности модели к изменению коэффициентов А и Е представлены в табл. 2. Диапазон интервалов неопределенности показан в записи коэффициентов.

Таблица 2

Аррениусовские параметры эффективных констант скоростей реакций процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола ( $k = Ae^{-E/RT}$ )

Формально-кинетическая схема*	A**	E, Дж/моль
$ROOH + C_3H_6 \xrightarrow{k_1} ROH + PO$	$1.97^{+2.13}_{-0.12} \cdot 10^8$	$90600^{+200}_{-1800}$
$ROOH \xrightarrow{k_2} C_6H_5C(O)CH_3 + CH_3OH$	$2.66^{+2.23}_{-2.61} \cdot 10^8$	$99200^{+5000}_{-2000}$
$ROOH \xrightarrow{k_3} C_6H_5C(CH_3)=CH_2 + H_2O + 0.5O_2$	$1.62^{+0.45}_{-0.57} \cdot 10^{10}$	$109500^{+1100}_{-700}$
$2ROOH \xrightarrow{k_4} ROOR + H_2O_2$	$5.2^{+2.50}_{-3.22} \cdot 10^{13}$	$135300^{+2700}_{-1100}$
$ROOH \xrightarrow{k_5} C_6H_5OH + CH_3C(O)CH_3$	$9.99^{+5.79}_{-7.69} \cdot 10^{13}$	$142500^{+4300}_{-1400}$
$ROOH \xrightarrow{k_6} ROH + 0.5O_2$	$8.02^{+7.86}_{-6.74} \cdot 10^{16}$	$163400^{+8200}_{-16300}$
$ROOR \xrightarrow{k_7} C_6H_5OH + CH_3C(O)CH_3 + C_6H_5C(CH_3)=CH_2$	$2.24^{+2.20}_{-1.88} \cdot 10^8$	$126600^{+6300}_{-34200}$
$C_6H_5OH + C_6H_5C(CH_3)=CH_2 \xrightarrow{k_8} C_{15}H_{16}O$	$3.18^{+3.12}_{-2.67} \cdot 10^{16}$	$163000^{+8200}_{-26000}$
$IPA + C_6H_5C(CH_3)=CH_2 \xrightarrow{k_9} C_{12}H_{18}O$	$1.93^{+1.89}_{-1.62} \cdot 10^{10}$	$126600^{+6300}_{-22800}$

\* ROOH – гидропероксид кумола, H<sub>2</sub>O – вода, ROH – диметилфенилкарбинол, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>C(O)CH<sub>3</sub> – ацетофенон, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>C(CH<sub>3</sub>)=CH<sub>2</sub> – α-метилстирол, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> – пероксид водорода, CH<sub>3</sub>OH – метанол, ROOR – пероксид дикумила, O<sub>2</sub> – кислород, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH – фенол, CH<sub>3</sub>C(O)CH<sub>3</sub> – ацетон, C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> – пропилен, PO – окись пропилен, IPA – изопропиловый спирт, C<sub>15</sub>H<sub>16</sub>O – 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенол, C<sub>12</sub>H<sub>18</sub>O – (1-изопропокси-1-метилэтил)бензол.

\*\* Размерность А для мономолекулярных реакций – 1/с, для бимолекулярных реакций – л/(моль·с).

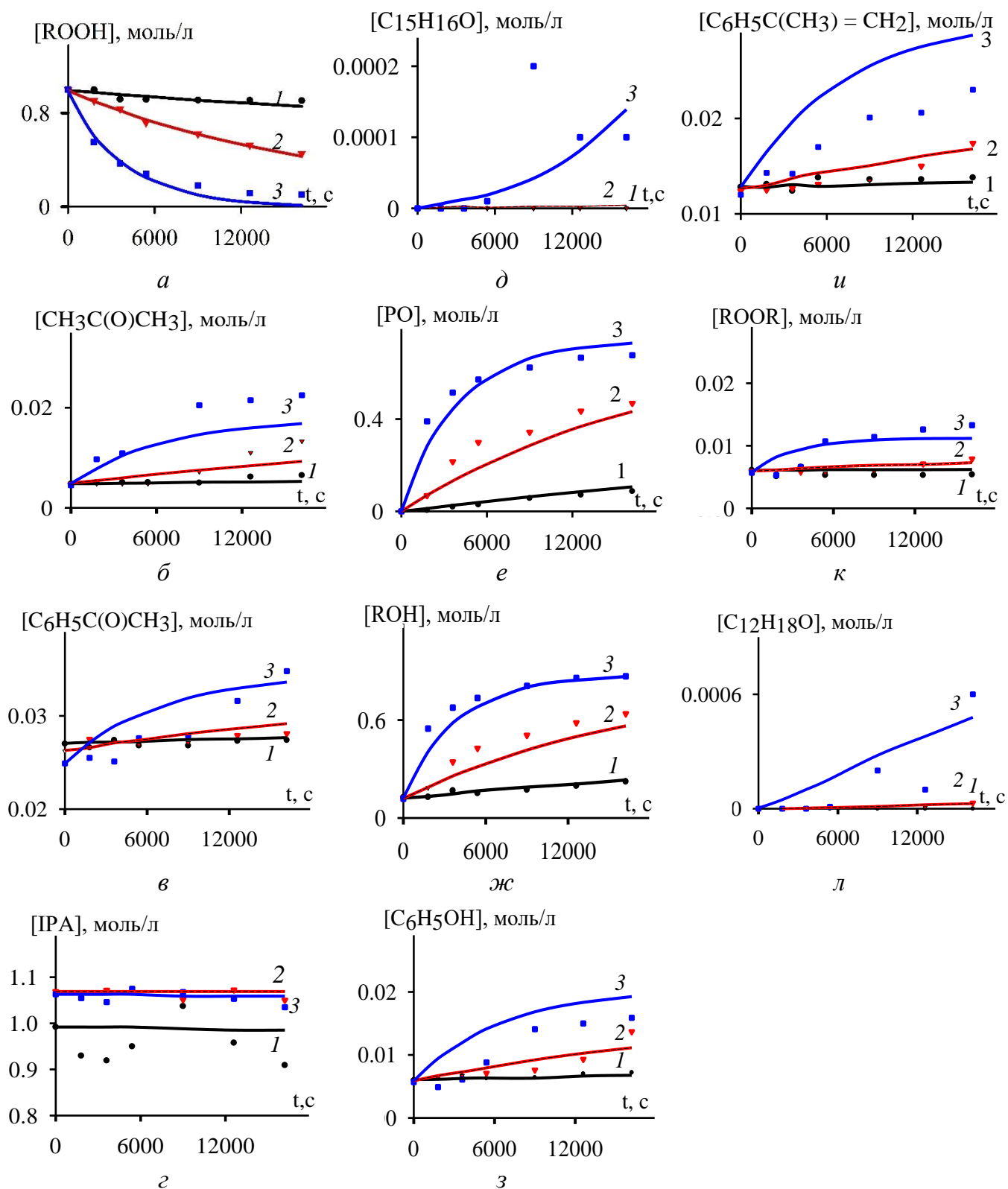


Рис. 3. Временные зависимости концентраций гидропероксида кумола (а), ацетона (б), ацетофенона (в), изопропилового спирта (з), 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (д), оксида пропилена (е), диметилфенилкарбинола (ж), фенола (з),  $\alpha$ -метилстирола (и), пероксида дикумила (к), (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола (л) в каталитическом эпексидировании пропилена гидропероксидом кумола; условия:  $T = 323$  (1, ●), 343 (2, ▼), 363 (3, ■) К;  $P = 25$  атм; начальная концентрация катализатора  $[Mo]_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  г-ат/моль на 1 моль гидропероксида кумола; точки – эксперимент, линии – расчет

Первоначальные экспериментальные кинетические данные были получены при температурах ниже 363 К. Однако наилучшие показатели процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола достигаются при температуре процесса 388 К. Отметим, что начальная концентрация гидропероксида кумола 1 моль/л при данной температуре не позволяет провести эксперимент в изотермическом режиме, поэтому начальная концентрация гидропероксида кумола была снижена ~ в 2 раза. В связи с этим были проведены дополнительные эксперименты при температуре 388 К, но с меньшей начальной концентрацией гидропероксида кумола, поскольку работа при более высокой температуре и исходных концентрациях, соответствующих предыдущим опытам, характеризуется резким скачком температуры внутри реактора, что не позволяет корректно снять кинетические данные. Полученные экспериментальные точки при 388 К были сопоставлены с расчетными значениями, вычисленными с помощью кинетической модели на основе формально-кинетической схемы. Сравнение показало удовлетворительную сходимость, что подтверждает адекватность модели и в более высокотемпературной области, пусть и при измененных начальных условиях (рис. 4).

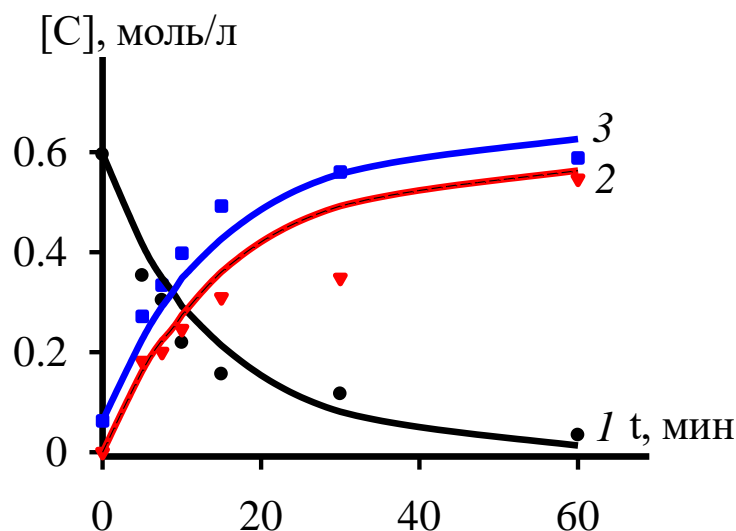


Рис. 4. Временные зависимости концентраций гидропероксида кумола (1), оксида пропилена (2), диметилфенилкарбинола (3) в каталитическом эпоксицировании пропилена гидропероксидом кумола; условия:  $T = 388$  К,  $P = 25$  атм, начальная концентрация катализатора  $[Mo]_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  г-ат/моль на 1 моль гидропероксида кумола; точки – эксперимент, линии – расчет

При масштабировании кинетики эпоксицирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденового катализатора на уровень промышленного процесса за основу приняли технологическую схему процесса эпоксицирования пропилена гидропероксидом этилбензола [1]. Задали следующие начальные условия:

- молярное брутто-соотношение пропилен : гидропероксид кумола 6 : 1;
- молярное соотношение изопропиловый спирт : гидропероксид кумола 1 : 1;
- температура в 1-м реакторе 378 К, во 2-м – 383 К, в 3-м – 388 К;
- давление в каскаде реакторов 30 атм;
- пропускная способность каскада реакторов 600 кг/ч.

Смоделированный в Aspen HYSYS промышленный процесс эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола (рис. 5) работает следующим образом. Оксидат кумола (СНР) со стадии окисления кумола нагнетается насосом (поз. Pump-103) до 1 атм, охлаждается в теплообменнике до 313 К и поступает в смеситель потока (поз. MIX-106). Также в смеситель (поз. MIX-106) поступает катализатор, растворенный в изопропиловом спирте. Поток из смесителя (поз. MIX-106) нагнетается насосом (поз. Pump-105) до 30 атм и подается в смеситель (поз. MIX-107). Свежий пропилен из-за границ установки смешивается с возвратным пропиленом в смесителе (поз. MIX-104), нагнетается насосом (поз. Pump-104) до 30 атм и смешивается в смесителе (поз. MIX-107) с потоком катализатора и оксидата кумола. Далее реакционная смесь подогревается до 378 К в теплообменнике (поз. T-105) и проходит через каскад реакторов (поз. R-104-106). Абгазы с реакторов (поз. R-104-106) смешиваются в смесителе (поз. MIX-108), охлаждаются в теплообменнике (поз. T-106) и поступают в разделительную колонну (поз. K-102). Кубовая жидкость разделительной колонны (поз. K-102) отводится на утилизацию, а пропилен отводится верхом колонны и поступает в холодильник (поз. T-107). Сконденсировавшийся пропилен отделяется от кислорода в сепараторе (поз. V-103) и подается на смешение со свежим пропиленом в смеситель (MIX-104). Пары сепаратора (поз. V-103) направляются на утилизацию.

Для описания фазового равновесия в системе была выбрана модель коэффициентов активности UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical), хорошо зарекомендовавшая себя для воспроизведения поведения полярных и неидеальных жидких смесей. Поскольку в реакционной смеси присутствуют компоненты со сложной функциональной структурой, для которых отсутствовали экспериментальные данные по бинарному взаимодействию, оценка параметров бинарного взаимодействия UNIQUAC для них была выполнена с помощью группового метода UNIFAC (UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients).

В табл. 3 приведены составы потоков:

- НЕРС-2, поступающего в 1-й реактор каскада,
- ЕР-1, поступающего во 2-й реактор,
- ЕР-2, поступающего в 3-й реактор,
- ЕР-3, выходящего из 3-го реактора.

Сопоставление конверсий гидропероксидов кумола и этилбензола в процессе эпексидирования пропилена приведено в табл. 5.

Показано (табл. 4), что конверсия гидропероксида кумола (95%) находится на уровне с конверсией гидропероксида этилбензола, достигаемой в процессе эпексидирования пропилена гидропероксидом этилбензола (99%). Селективность по оксиду пропилена составила 84%.

Таблица 3

Состав основных потоков процесса эпексидирования пропилена\* гидропероксидом кумола, реализованного в промышленных условиях

Компонент	Содержание компонента в потоке без учета пропилена, % масс.			
	НЕРС-2	ЕР-1	ЕР-2	ЕР-3
$\alpha$ -Метилстирол	0.06	0.26	0.3	0.36
Фенол	0.06	0.07	0.08	0.09
Ацетофенон	0.04	0.08	0.1	0.1
Диметилфенилкарбинол	1.85	12.9	14.07	14.93
Гидропероксид кумола	18.67	4.57	3.34	0.96
Пероксид дикумила	0.17	0.37	0.41	0.5
Вода	0	0.06	0.08	0.1
Кислород	0	0.02	0.05	0.06
Метанол	0	0.03	0.04	0.05
Ацетон	0.03	0.08	0.09	0.1
Оксид пропилена	0	3.45	3.81	5.01
Изопропиловый спирт	7.9	7.7	7.5	7.4
Кумол	71.7	70.5	70.3	70.25
2-(1-метил-1-фенилэтил)фенол	0	0.0001	0.0001	0.0002
(1-изопропокси-1-метилэтил)бензол	0	0.001	0.002	0.002

\* Массовое содержание пропилена в потоках не приведено из-за того, что пропилен взят в избытке.

Таблица 4

Сопоставление показателей процессов эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола и эпексидирования пропилена гидропероксидом этилбензола, реализованных в промышленных условиях

Экспликация	Эпексидирование пропилена гидропероксидом кумола	Эпексидирование пропилена гид- ропероксидом этилбензола [2]
	Конверсия гидропероксида кумола, %	Конверсия гидропероксида этилбензола, %
После 1-ого реактора	76	70
После 2-ого реактора	83	90
После 3-его реактора	95	99

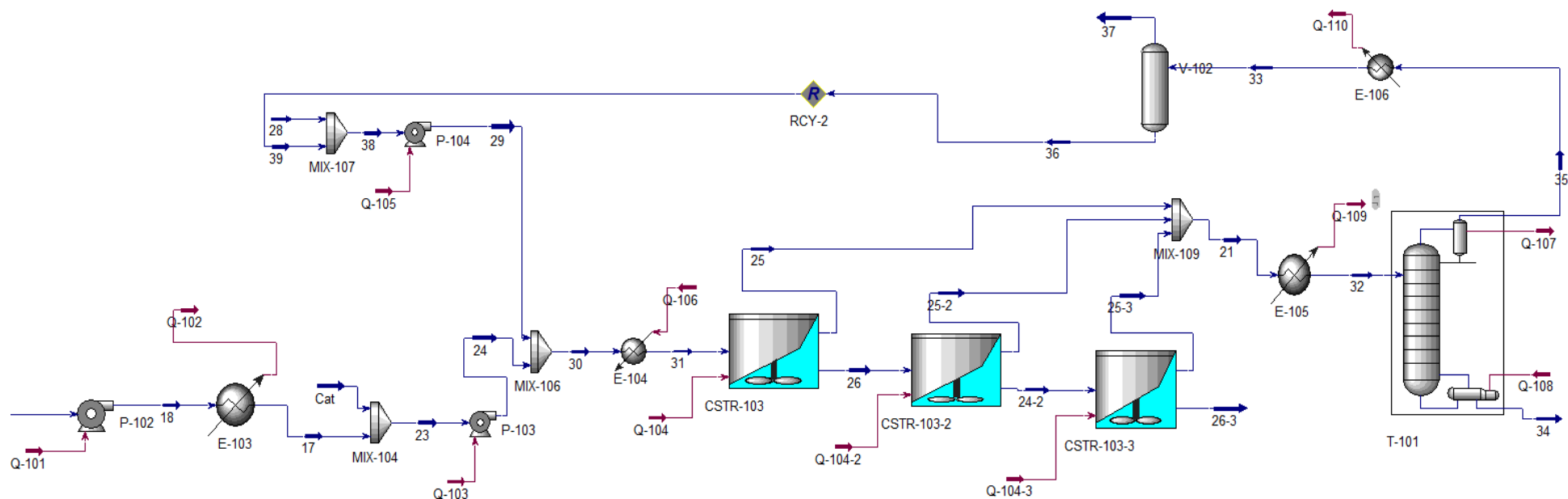


Рис. 5. Построенная в Aspen HYSYS модель реализованного в промышленных условиях процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола, в которую заложена кинетическая модель на основе формально-кинетической схемы реакций процесса и которая включает в себя каскад трех реакторов идеального смешения CSTR 103, 103-2, 103-3 (степень заполнения каждого реактора 70%), P-(102-104) – насосы, E-(103-106) – теплообменники, MIX-(104, 106, 107, 109) – смесители, V-102 – сепаратор, T-101 – разделительная колонна синие линии – материальные потоки, красные линии – энергетические потоки

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам диссертационного исследования можно сделать следующие выводы.

1. Получен массив надежных кинетических данных по процессу эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии гомогенного молибденового катализатора и изопропилового спирта. Экспериментально установлены оптимальные условия синтеза катализатора (растворение металлического молибдена в смеси оксидата кумола и изопропилового спирта при 343 К) и проведения процесса эпексидирования (эквимолярное соотношение спирт : гидропероксид, молярное соотношение пропилен : гидропероксид 6 : 1, температура 388 К, концентрация молибдена  $5.0 \cdot 10^{-4}$  г-ат на моль гидропероксида кумола), обеспечивающие конверсию гидропероксида на уровне  $\sim 94\%$ , селективность по оксиду пропилена  $\sim 84\%$  и выход целевого продукта  $\sim 77\%$ .

2. Предложена радикально-цепная схема элементарных реакций процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии гомогенного молибденового катализатора и изопропилового спирта, включающая некаталитические реакции зарождения, продолжения и обрыва цепи и молекулярные реакции, и аналогичные им каталитические реакции. В кинетической модели на основе этой схемы участие катализатора учтено в неявном виде через запись констант скоростей реакций. Анализ этой схемы с помощью кинетического моделирования позволил редуцировать ее к схеме, включающей каталитические реакции зарождения цепи из гидропероксида кумола, каталитические реакции продолжения цепи из кумилокисильного и кумилпероксильного радикалов, некаталитические и каталитические реакции продолжения цепи из гидропероксильного радикала, некаталитические реакции обрыва цепи и отдельные некаталитические и каталитические молекулярные реакции. Построенная на ее основе кинетическая модель адекватно описывает экспериментальные данные по временным изменениям концентраций компонентов реакционной смеси в диапазоне температур 323-363 К.

3. Предложена формально-кинетическая схема процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденсодержащего катализатора и изопропилового спирта, включающая реакции образования оксида пропилена, распада гидропероксида кумола и пероксида дикумила и получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола. На основе этой схемы построена и параметризована по экспериментальным данным в диапазоне температур 323-388 К кинетическая модель, анализ чувствительности которой к изменению ее параметров доказал правомочность предложенной схемы. Предложенная формально-кинетическая схема процесса позволила адекватно описать закономерности процесса на промышленном уровне: показано, что в режиме повышения температуры от 378 К (первый реактор) до 388 К (третий реактор) в каскаде трех реакторов смешения, давлении 30 атм, молярном соотношении пропилен : гидропероксид кумола 6 : 1 и пропускной способности 600 кг/ч достигается конверсия гидропероксида кумола 95 % при селективности по оксиду пропилена 84 %, что сопоставимо с показателями промышленного процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом этилбензола.

Перспективы развития исследования: на основе разработанных кинетических моделей необходимо развивать вопросы проектирования и оптимизации промышленного производства оксида пропилена, в том числе в составе комплексов совместного получения фенола, ацетона и оксида пропилена.

### Цитируемые работы

1. Кирпичников, П.А. Альбом технологических схем основных производств промышленности синтетического каучука / П.А. Кирпичников, В.В. Береснев, Л.М. Попова. – 2-е изд., перераб. – Москва : Альянс, 2017. – 224 с.

2. Елиманова, Г.Г. Влияние температуры, давления и состава жидкой фазы на растворимость пропилена в этилбензоле и продуктах его окисления / Г.Г. Елиманова, Э.А. Каралин, Д.В. Ксенофонтов, Х.Э. Харлампиди // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т. 17, №2. – С. 207-209.

### Основное содержание диссертации изложено в следующих работах:

#### *Статьи в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России для размещения материалов диссертаций*

1. **Багавеев, И.М.** Кинетика эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола, содержащегося в составе промышленно окисленного кумола / И.М. Багавеев, С.Н. Тунцева, Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, М.А. Бочков, Г.Г. Елиманова, Н.М. Нуруллина, Х.Э. Харлампиди, Р.Я. Дебердеев, О.В. Стоянов // Вестник технологического университета. – 2026. – Т. 29, №3. – С. 21-26.

2. **Багавеев, И.М.** Анализ формально-кинетической схемы эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола / И.М. Багавеев, С.Н. Тунцева, Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, М.А. Бочков, Н.М. Нуруллина, Г.Г. Елиманова, А.В. Вертепа, О.В. Стоянов, Р.Я. Дебердеев, Х.Э. Харлампиди // Вестник технологического университета. – 2026. – Т. 29, №3. – С. 32-36.

#### *Другие публикации*

1. Тунцева, С.Н. Кинетика получения окиси пропилена – мономера для поли(пропиленоксид)ных и полиуретановых эластомеров – в масштабе технологического процесса / С.Н. Тунцева, **И.М. Багавеев**, Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, М.А. Бочков, Г.Г. Елиманова, Н.М. Нуруллина, Э.А. Каралин, И.С. Родионов, Х.Э. Харлампиди, Р.Я. Дебердеев, О.В. Стоянов // Промышленное производство и использование эластомеров. – 2026. – №1. – С. 3-11.

*Материалы конференций*

1. **Багавеев, И.М.** Моделирование кинетики эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола / И.М. Багавеев, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампики, К.А. Терещенко // Достижения молодых ученых: химические науки: X Всероссийская молодежная конференция (Уфа, 22-23 мая 2025 г.): сб. тез. докл. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2025. – С. 48-49.

2. **Багавеев, И.М.** Совершенствование процесса получения окиси пропилена, основного сырья в производстве пенополиуретанов, пропиленгликоля и полиэфирных смол / И.М. Багавеев, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампики, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, С.Н. Тунцева, Т.Л. Пучкова // Актуальные проблемы науки о полимерах: IV Всероссийская научная конференция (с международным участием) преподавателей и студентов вузов (Казань, 23-26 сентября 2024 г.): сб. мат-в. – Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2024. – С. 158-160.

3. **Багавеев, И.М.** Влияние концентрации катализатора на выход окиси пропилена в процессе эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола / И.М. Багавеев, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампики, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, С.Н. Тунцева // Теоретические и экспериментальные исследования процессов синтеза, модификации и переработки полимеров: IX Всероссийская (заочная) научная конференция (Уфа, 3-4 июня 2024 г.): сб. тез. докл. – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2024. – С. 6-7.

4. **Багавеев, И.М.** Получение оксида пропилена эпоксидированием пропилена гидропероксидом изопропилбензола / И.М. Багавеев, Х.Э. Харлампики, Н.В. Улитин, М.А. Бочков, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, С.Н. Тунцева, Т.Л. Пучкова // Актуальные вопросы химии 21 века: II Международная научная студенческая конференция, посвященная 220-летию КФУ (Казань, 25-26 мая 2024 г.): сб. тез. докл. – Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2024. – С. 94.

5. **Багавеев, И.М.** Влияние изопропилового спирта как растворителя на конверсию гидропероксида изопропилбензола в эпоксидировании пропилена / И.М. Багавеев, М.А. Бочков, Я.Л. Люлинская, К.А. Терещенко, Д.А. Шиян, Т.Л. Пучкова, С.Н. Тунцева, Х.Э. Харлампики, Н.В. Улитин // Актуальные проблемы биологии, экологии и химии: конференция (Ярославль, 18 апреля 2024 г.): сб. тез. докл. – Ярославль: Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, 2024. – С. 14.

6. **Багавеев, И.М.** Получение оксида пропилена эпоксидированием пропилена гидропероксидом изопропилбензола / И.М. Багавеев, М.А. Бочков, Х.Э. Харлампики // Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений: VII Всероссийская молодежная конференция (Уфа, 23-24 ноября 2023 г.): сб. тез. докл. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2023. – С. 14-16.