Введение Синтез алкилфенолов алкилированием фенола высшими олефинами можно осуществить в присутствии различных катализаторов, которыми обычно служат минеральные или органические кислоты, галогениды металлов, катионообменные смолы, алюмосиликаты и другие соединения кислотного характера [1]. В связи с отсутствием в литературе сведений о кинетике реакции алкилирования фенола высшими линейными α -олефинами в присутствии модифицированных бентонитовых глин, перед нами была поставлена задача исследовать кинетические закономерности реакции и восполнить пробел в данном вопросе. Экспериментальная часть В работе [2] приведены результаты исследования реакции алкилирования фенола деценом-1 с участием катализаторов, приготовленных модифицированием природного бентонита. Катализаторы готовили на основе природного бентонита месторождения республики Татарстан. Бентонит модифицировали раствором серной кислоты, солями аммония, алюминия и гидроксикатиона алюминия [3]. Реакцию алкилирования фенола деценом-1 проводили в жидкой фазе, в термостатированной трехгорлой колбе, снабженной термометром, обратным холодильником и мешалкой. В связи с получением максимального выхода моноалкилфенола (82,1%) в реакции алкилирования фенола деценом-1 в присутствии бентонита, модифицированного раствором гидроксикатиона алюминия [4] следующим этапом работы являлось изучение кинетических закономерностей реакции в присутствии вышеуказанного катализатора. Реакция алкилирования в данных условиях ($t=140^{\circ}\text{C} - 160^{\circ}\text{C}$, фенол:деценом=2:1(моль), фенол:Б-ОН=1:1(мас.) протекает по следующей схеме: Поскольку в реакции образуются только моноалкилфенолы и ее можно считать необратимой, то вкладом побочных реакций можно пренебречь. Кинетические исследования реакции алкилирования фенола деценом-1 проводили в температурном интервале $140^{\circ}\text{C} - 160^{\circ}\text{C}$, анализ исходных реагентов (фенола и децена) и продуктов реакции проводили методами газожидкостной хроматографии и хромато-масс-спектрографии. Для этой цели применяли хроматограф "Хроматек-Кристалл" с пламенно-ионизационным детектором и программированным нагревом колонки: капиллярная колонка 30 м, фаза - неполярная; газ-носитель - гелий; $V= 20^{\circ}\text{C}/\text{мин.}$; величина пробы 0,1 мкл; температура детектора 290°C , испарителя 280°C . В качестве жидкой фазы использовали 100% диметилполилоксан. Хромато-масс-спектрометрическое исследование проводилось на приборе DFS Thermo Electron Corporation (Германия). Метод ионизации: электронный удар. Энергия ионизирующих электронов составляла 70 эВ, температура источника ионов 290°C . Использовалась капиллярная колонка ID-BPX5, длина -60 м, диаметр-0.32 мм. Газ-носитель - гелий. Результаты и их обсуждение На основании полученных данных хроматографии в результате реакции алкилирования фенола деценом-1 в присутствии катализатора, модифицированного гидроксикатионом алюминия (Б-ОН) образуется смесь орто-

и пара-моноалкилфенолов. Экспериментально установлено, что скорость образования моноалкилфенола выражается кинетическим уравнением бимолекулярной реакции: $W = k [C_6H_5OH] [C_{10}H_2O]$ Соответствующие кинетические кривые представлены на рис. 1. Константа скорости вычислялась в предположении общего второго порядка реакции и включает концентрацию катализатора, поверхность и другие диффузионные параметры (табл. 1). Константу скорости второго порядка при условии неравенства начальных концентраций исходных реагентов вычисляли [5] по полулогарифмическим анаморфозам кинетических кривых (рис.2) из уравнения: $\ln \frac{[C_{10}H_2O]_0 - [C_6H_5OH]}{[C_6H_5OH]_0 + [C_6H_5OH] [C_6H_5OH]} \ln \frac{[C_{10}H_2O]_0}{[C_6H_5OH]_0} + k \cdot \tau \cdot ([C_{10}H_2O]_0 - [C_6H_5OH]_0) [C_6H_5OH]$ где $[C_6H_5OH]_0$ и $[C_6H_5OH]$ – исходные и текущая и исходные концентрации фенола в реакционной смеси, моль/л; $[C_{10}H_2O]_0$ – исходная концентрация децена-1, моль/л; τ – время, мин. Рис. 1 – Кинетические кривые расходования фенола ($[C_6H_5OH]_0 = 4,619$ моль/л) Таблица 1 – Вычисленные константы скоростей в зависимости от температуры $T, \text{ } ^\circ\text{C} \cdot 10^4$, л/моль $\cdot$ с

$T, \text{ } ^\circ\text{C} \cdot 10^4$	Константа скорости, л/моль $\cdot$ с
0,67	150
1,2	160
2,2	2,2

Как видим, экспериментальные точки с высокими коэффициентами корреляции ложатся на прямую, что подтверждает общий второй порядок реакции (рис.2). Энергию активации процесса определяли по температурному ходу константы скорости в координатах $\ln k - 1000/T$ (рис.3). Рис. 2 - Полулогарифмическая анаморфоза кинетической кривой расходования фенола при температуре 140 $^\circ\text{C}$ Рис. 3 - Графическое определение энергии активации Из тангенса угла наклона прямой и отсекаемого по оси ординат отрезка получено выражение для температурной зависимости константы [5]: $k = (8,12 \pm 2) \cdot 10^6 \exp((-87,6 \pm 4) \cdot 10^3/RT)$, л/моль $\cdot$ сек Полученная эффективная константа может быть использована для определения математической модели реактора и расчета объема реактора при различной степени превращения.