

**И. М. Багавеев, С. Н. Тунцева, Н. В. Улитин,  
К. А. Терещенко, М. А. Бочков, Г. Г. Елиманова,  
Н. М. Нуруллина, Х. Э. Харлампида, Р. Я. Дебердеев, О. В. Стоянов**

**КИНЕТИКА ЭПОКСИДИРОВАНИЯ ПРОПИЛЕНА ГИДРОПЕРОКСИДОМ КУМОЛА,  
СОДЕРЖАЩЕГОСЯ В СОСТАВЕ ПРОМЫШЛЕННО ОКИСЛЕННОГО КУМОЛА**

*Ключевые слова:* анализ чувствительности, гидропероксид кумола, кинетическая модель, молибденовый катализатор, обратная кинетическая задача, эпексидирование пропилена.

*Статья посвящена разработке и анализу чувствительности кинетической модели эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденового катализатора к изменению ее параметров. Актуальность исследования обусловлена перспективами создания в России совместного производства окиси пропилена, фенола и ацетона на базе действующих предприятий, что требует глубокого понимания кинетических закономерностей для последующего создания цифрового двойника процесса. Экспериментальные кинетические исследования выполнены в широком диапазоне температур (323-393 К) с использованием промышленно окисленного кумола, содержащего гидропероксид кумола, а также металлического молибдена в качестве катализатора. Состав реакционной смеси анализировали методами иодометрического титрования и газовой хроматографии. На основе литературных данных и хромато-масс-спектрометрического анализа реакционной смеси составлена подробная кинетическая схема из 17 некаталитических реакций, включающих реакции зарождения, продолжения и обрыва цепи и молекулярные реакции, и поставленных им в соответствие 17 каталитических реакций. 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. Параметры уравнения Аррениуса (предэкспоненциальные множители и энергии активации) для всех реакций определены путем решения обратной кинетической задачи с использованием метода прямого поиска нулевого порядка. Выполнен анализ чувствительности кинетической модели, основанный на оценке интервалов неопределенности ее параметров. Анализ чувствительности кинетической модели эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденового катализатора к изменению ее параметров показал, что на кинетику процесса влияют каталитические реакции зарождения цепи из гидропероксида кумола, каталитические реакции продолжения цепи из кумилокисильного и кумилпероксильного радикалов, некаталитические реакции обрыва цепи и отдельные некаталитические и каталитические молекулярные реакции. Некаталитические и каталитические реакции продолжения цепи из гидропероксильного радикала включены в схему как единственные реакции, по которым расходуется этот радикал.*

**M. N. Bagaveev, S. N. Tuntseva, N. V. Ulitin,  
K. A. Tereshchenko, M. A. Bochkov, G. G. Elimanov,  
N. M. Nurullina, Kh. E. Kharlampidi, R. Ya. Deberdeev, O. V. Stoyanov**

**KINETICS OF PROPYLENE EPOXIDATION WITH CUMENE HYDROPEROXIDE CONTAINED  
IN INDUSTRIALLY OXIDIZED CUMENE**

*Keywords:* sensitivity analysis, cumene hydroperoxide, kinetic model, molybdenum catalyst, inverse kinetic problem, epoxidation of propylene.

*The article is devoted to the development and sensitivity analysis of a kinetic model for the epoxidation of propylene with cumene hydroperoxide in the presence of a molybdenum catalyst with respect to variations in its parameters. The relevance of this research is due to the prospects for creating a joint production facility for propylene oxide, phenol, and acetone in Russia based on existing enterprises, which requires a deep understanding of the kinetic regularities for the subsequent development of a digital twin of the process. Experimental kinetic studies were carried out in a wide temperature range (323-393 K) using commercially oxidized cumene containing cumene hydroperoxide, as well as metallic molybdenum as a catalyst. The composition of the reaction mixture was analyzed using iodometric titration and gas chromatography methods. Based on literature data and chromatographic-mass spectrometric analysis of the reaction mixture, a detailed kinetic scheme comprising 17 non-catalytic reactions (including initiation, chain propagation, and chain termination reactions, as well as molecular reactions) was compiled, and 17 catalytic reactions were matched to them. The kinetic model was written according to the law of mass action based on the obtained kinetic scheme in the form of a system of nonlinear differential equations describing the rates of change in the concentrations of all substances in the reaction mixture. The reaction rate constants in the model were defined as functions of temperature according to the Arrhenius equation. The parameters of the Arrhenius equation (pre-exponential factors and activation energies) for all reactions were determined by solving the inverse kinetic problem using the zero-order direct search method. A sensitivity analysis of the kinetic model was performed, based on estimating the uncertainty intervals of its parameters. The sensitivity analysis of the kinetic model for the epoxidation of propylene with cumene hydroperoxide in the presence of a molybdenum catalyst to changes in its parameters showed that the reaction kinetics are influenced by the catalytic chain initiation reactions from cumene hydroperoxide, the catalytic chain propagation reactions from cumyloxyl and cumylperoxyl radicals, non-catalytic chain termination reactions, and certain non-catalytic and catalytic molecular reactions. The non-catalytic and catalytic chain propagation reactions from the hydroperoxyl radical are included in the scheme as the sole reactions by which this radical is consumed.*

## Введение

Мировой спрос на рынке окиси пропилена в 2019 году составил 11.9 млн т/год и, как ожидается, будет расти в среднем на 5.63% ежегодно до 2032 года [1]. Основной движущей силой мирового рынка окиси пропилена является увеличение спроса на окись, используемую в качестве сырья для производства полиэфирполиолов, которые в дальнейшем используются для синтеза полиуретанов [1, 2]. Существует пять основных промышленных процессов производства окиси пропилена [1, 2]:

- хлоргидринный процесс (37% производимой окиси пропилена);

- гидропероксидные процессы, в которых в качестве источника кислорода применяют гидропероксиды этилбензола (27% производимой окиси пропилена), *трет*-бутила (16% производимой окиси пропилена) и кумола (6% производимой окиси пропилена);

- процесс, в котором в качестве источника кислорода применяют пероксид водорода (14% производимой окиси пропилена).

Производство окиси пропилена с использованием гидропероксида кумола интересно тем, что его можно совместить с существующим производством фенола и ацетона [2-4]. Поскольку в РФ такое производство до сих пор не реализовано, для его создания необходимо, в первую очередь, проанализировать механизм процесса эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола, содержащегося в составе промышленно окисленного кумола, на уровне схемы реакций, описывающей экспериментальные кинетические закономерности. Этому посвящена настоящая работа.

## Экспериментальная часть

В экспериментах использовали следующие вещества:

1) окисленный кумол производства ПАО «Казаньоргсинтез» (состав, в % масс.: кумол – 73.72, гидропероксид кумола – 23.76, диметилфенилкарбинол – 1.89, ацетофенон – 0.38, пероксид дикумила – 0.14,  $\alpha$ -метилстирол – 0.04, фенол – 0.03, ацетон – 0.01);

2) сжиженный пропилен производства ПАО «Нижнекамскнефтехим» (массовая доля основного вещества не менее 99 % масс.);

3) металлический молибден в виде порошка (ТУ 48-19-316-92);

4) изопропиловый спирт марки ч.д.а. производства АО «ЭКОС-1».

Синтез катализатора осуществляли путем растворения металлического молибдена в смеси окисленного кумола с изопропиловым спиртом, взятых в соотношении 1:1 по объему. Растворение проводили в трехгорлой колбе, снабженной холодильником, мешалкой и термометром при температуре  $343 \pm 0.5$  К в течение 4 часов. Нерастворившийся металлический молибден после приготовления катализаторного раствора отфильтровывали. Содержание растворенного молибдена в готовом катализаторе составляло до 0.6 % масс. Содержание растворенного молибдена определяли ванадатометрически [4].

Эпексидирование пропилена проводили в стальном реакторе объемом 1 л при температурах 323-393 К (температуру реакционной смеси контролировали с точностью  $\pm 0.5$  К) и давлении 25 атм.

Содержание гидропероксида кумола в пробе определяли методом иодометрического титрования [5], а побочных продуктов – методом газовой хроматографии (хроматограф Chromatec Crystal 5000, производитель – ЗАО СКБ «Хроматэк», г. Йошкар-Ола; капиллярная колонка Sol Gel Wax с полярной фазой).

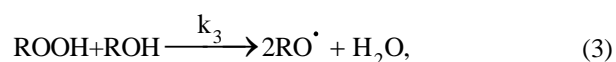
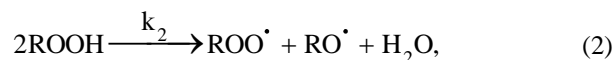
## Результаты и их обсуждение

В процессах эпексидирования олефинов органическими гидропероксидами гидропероксид расходуется по двум направлениям: собственно само эпексидирование олефина и разложение гидропероксида [6].

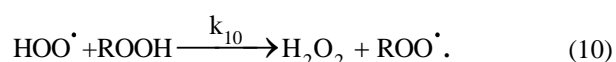
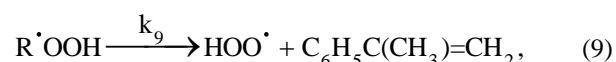
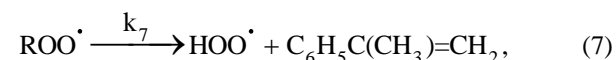
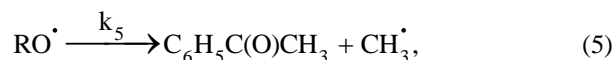
Кинетическую схему некаталитического эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола (см. ниже) составили на основе литературных данных [7-12] и данных хромато-масс-спектрометрического анализа реакционной смеси. В нее вошли реакции радикального распада гидропероксида кумола (1)-(3), реакции образования побочных продуктов (4)-(14), реакция получения окиси пропилена (15), реакция получения 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (16) и (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола (17).

Кинетическая схема

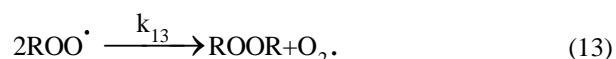
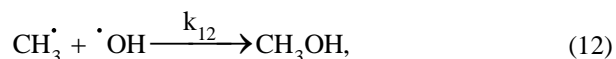
Зарождение цепи



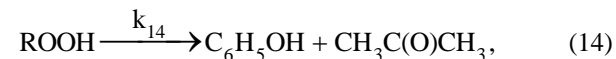
Продолжение цепи

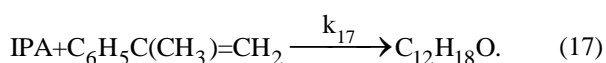
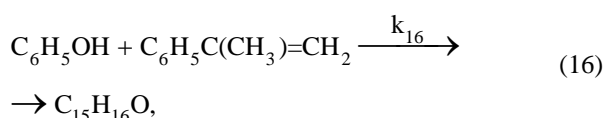


Обрыв цепи



Молекулярные реакции





где ROOH – гидропероксид кумола, RO\* – кумилокисильный радикал, \*OH – гидроксильный радикал, ROO\* – 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>\* – метильный радикал, R\*OOH – гидропероксильный кумильный радикал, HOO\* – 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 – окись 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-изопрокси-1-метилэтил)бензол.

Для учета влияния катализатора каждую некаталитическую реакцию продублировали аналогичной реакцией, полагая ее каталитической. Нумерацию каталитических реакций сделали такой же, как у некаталитических, с добавлением цифры 0 перед соответствующим номером реакции: например, некаталитическая реакция (1), каталитическая реакция (01). 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  $k = A e^{-E/(RT)}$  [13]. Здесь A – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации, Дж/моль; R = 8.31 Дж/(моль·К); T – температура, К.

Для решения обратной задачи по поиску параметров уравнения Аррениуса для каждой константы скорости реакции (табл. 1) использовали метод прямого поиска нулевого порядка [14]. Реализацию решения обратной

Таблица 1 – Значения A и E с учетом интервалов неопределенности

Table 1 – Values of A and E taking into account uncertainty intervals

k	A <sub>некат</sub>	E <sub>некат</sub> , Дж/моль	E <sub>кат</sub> , Дж/моль	A <sub>кат</sub>	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>11</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>011</sub></b>
Продолжение цепи					
<b>k<sub>4</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>04</sub></b>
<b>k<sub>5</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>05</sub></b>
<b>k<sub>6</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>06</sub></b>
<b>k<sub>7</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>07</sub></b>
<b>k<sub>8</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>08</sub></b>
<b>k<sub>9</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>09</sub></b>
<b>k<sub>10</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>010</sub></b>
Обрыв цепи					
k <sub>12</sub>	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>
k <sub>13</sub>	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					
k <sub>14</sub>	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>
k <sub>16</sub>	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>

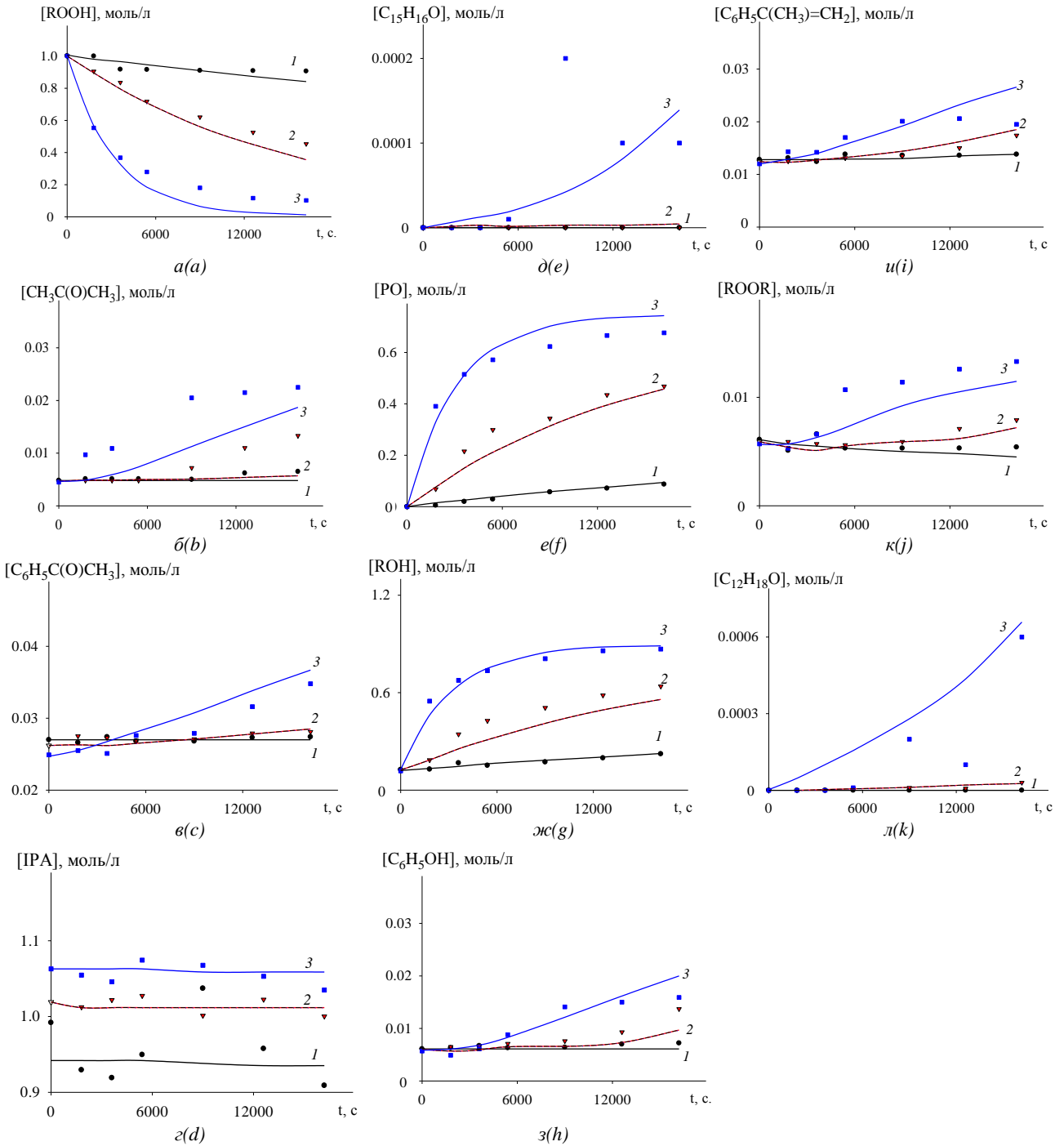
Размерность A для мономолекулярных реакций – 1/с, для бимолекулярных реакций – л/(моль·с).

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.

задачи осуществили в программе компьютерной алгебры Wolfram Mathematica. Для численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений использовали неявный BDF метод 5-го порядка [15].

Сопоставление результатов расчета по модели с найденными параметрами и результатов экспериментов продемонстрировано на рис. 1.



**Рис. 1 –** Временные зависимости концентраций гидропероксида кумола (а), ацетона (б), ацетофенона (в), изопрпилового спирта (з), 2-(1-метил-1-фенилэтил)фенола (д), окиси пропилена (е), диметилфенилкарбинола (ж), фенола (з),  $\alpha$ -метилстирола (и), пероксида дикумила (к), (1-изопропокси-1-метилэтил)бензола (л) в каталитическом эпоксирировании пропилена гидропероксидом кумола; условия:  $T = 323$  (1), 343 (2), 363 (3) К,  $P=25$  атм, начальная концентрация катализатора  $[Mo]_0 = 5$  ммоль/л; точки – эксперимент, линии – расчет

**Fig. 1 –** Time dependences of the concentrations of cumene hydroperoxide (a), acetone (b), acetophenone (c), isopropyl alcohol (d), 2-(1-methyl-1-phenylethyl)phenol (e), propylene oxide (f), dimethylphenylcarbinol (g), phenol (h),  $\alpha$ -methylstyrene (i), dicumyl peroxide (j), (1-isopropoxy-1-methylethyl)benzene (k) in the catalytic epoxidation of propylene with isopropylbenzene hydroperoxide;  $T = 323$  (1), 343 (2), 363 (3) K,  $P=25$  atm, initial concentration of the catalyst  $[Mo]_0 = 5$  mmol/l; dots are experiment data, lines are the calculation

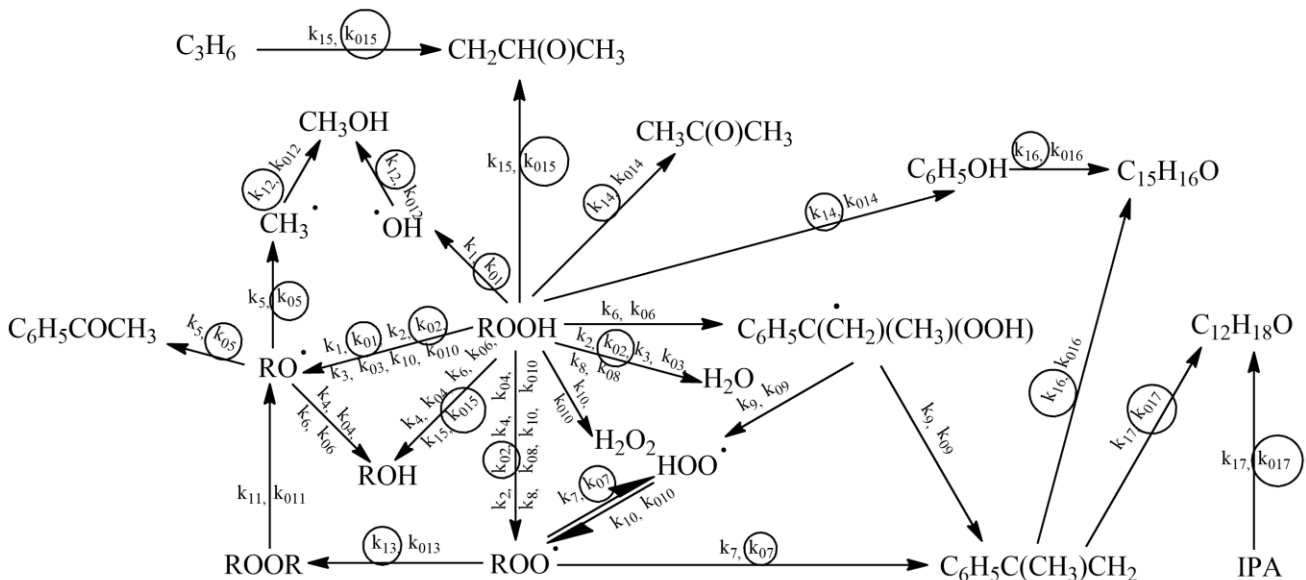


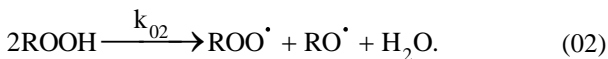
Рис. 2 – Кинетическая схема эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола (обведены константы, предэкспоненциальные множители которых имеют верхний и нижний интервалы неопределенности)

Fig. 2 – Kinetic scheme of propylene epoxidation with cumene hydroperoxide (the constants whose pre-exponential factors have upper and lower uncertainty intervals are circled)

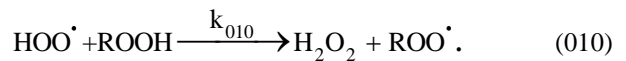
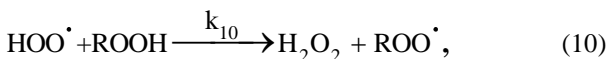
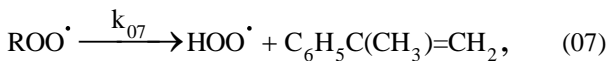
Оценку чувствительности модели к изменению параметров А и Е провели с использованием интервалов неопределенности. Интервалы неопределенности – это интервалы значений параметров модели, в границах которых модель описывает экспериментальные данные в пределах их средней относительной погрешности. Предельное значение средней относительной погрешности  $F = 0.20$  рассчитали на основе серии параллельных экспериментов. Результаты оценки чувствительности модели к изменению параметров А и Е представлены в табл. 1.

Нижняя граница интервалов неопределенности  $A_l$  с  $l = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 15, 17, 03, 04, 06, 08, 09, 010, 011, 012, 013, 014, 016$  равна 0. Это означает, что зануление данных  $A_l$  (и, следовательно, зануление соответствующих  $k_j$ ) 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:

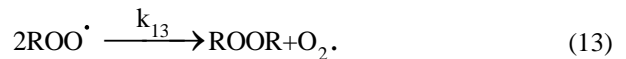
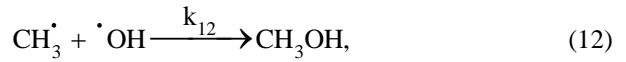
Зарождение цепи



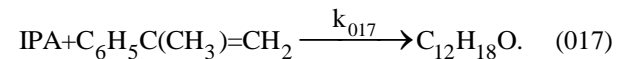
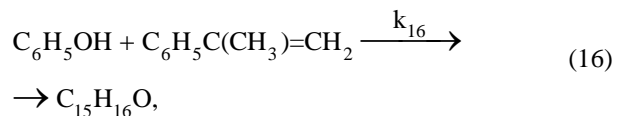
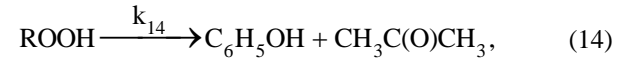
Продолжение цепи



Обрыв цепи



Молекулярные реакции



Несмотря на то, что реакции (10) и (010) оказались кинетически незначимыми, они должны присутствовать в схеме, поскольку эти реакции являются единственными, в которых расходуется гидропероксильный радикал.

### Выводы

Таким образом, анализ чувствительности кинетической модели эпексидирования пропилена гидропероксидом кумола в присутствии молибденового катализатора к изменению ее параметров показал, что на кинетику процесса влияют каталитические реакции зарождения цепи из гидропероксида кумола, каталитические реакции продолжения цепи из кумилокисильного и кумилпероксильного радикалов, неката-

литические реакции обрыва цепи и отдельные некаталитические и каталитические молекулярные реакции. Некаталитические и каталитические реакции продолжения цепи из гидропероксильного радикала включены в схему как единственные реакции, по которым расходуется этот радикал.

*Работа выполнена за счет 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).*

### Литература

1. T. Kawabata, J. Yamamoto, H. Koike, S. Yoshida, Sumitomo Kagaku (Engl. Ed.), Report 1, 1 (2019).
2. J. Tsuji, J. Yamamoto, M. Ishino, N. Oku, Sumitomo Kagaku, V. 2006-I, 1 (2006).
3. С.М. Данов, А.В. Сулимов, А.А. Овчаров, Усп. хим. хим. технол., 23, 6 (99), 45 (2009).
4. L.G. Pinaeva, A.S. Noskov, Catal. Ind., 12, 3, 176 (2020).
5. А.И. Бусев, Аналитическая химия молибдена. АН СССР, Москва, 1962. 302 с.
6. J.-L. Burgot, Ionic Equilibria in Analytical Chemistry. Springer, New York, 2012. 770 p.
7. В.Н. Леонов, Б.Н. Бобылев, Г.И. Стожкова, Нефтехимия, 23, 1, 106 (1983).
8. S. Das, A. Gupta, D. Singh, S. Mahajani, Ind. Eng. Chem. Res., 58, 18, 7448 (2019).
9. I. Di Somma, R. Marotta, R. Andreozzi, V. Caprio, Ind. Eng. Chem. Res., 51, 22, 7493 (2012).
10. Y. Lu, D. Ng, L. Miao, M.S. Mannan, Thermochim. Acta, 501, 1-2, 65 (2010).
11. K.-T. Li, P.-H. Lin, S.-W. Lin, Appl. Catal. A, 301, 1, 59 (2006).
12. B. Chaudhuri, M.M. Sharma, Ind. Eng. Chem. Res., 30, 1, 227 (1991).

© **И. М. Багавеев** – ассистент, каф. Общей химической технологии (ОХТ), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, BagaveevIM@corp.knrtu.ru; **С. Н. Тунцева** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, TuntsevaSN@corp.knrtu.ru; **Н. В. Улитин** – зав. каф., каф. ОХТ, КНИТУ, UlitinNV@corp.knrtu.ru; **К. А. Терещенко** – профессор, каф. ОХТ, КНИТУ, TereshchenkoKA@corp.knrtu.ru; **М. А. Бочков** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, BochkovMA@corp.knrtu.ru; **Г. Г. Елиманова** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, ElimanovaGG@corp.knrtu.ru; **Н. М. Нуруллина** – доцент, каф. ОХТ, КНИТУ, NurullinaNM@corp.knrtu.ru; **Х. Э. Харлампи** – профессор, каф. ОХТ, КНИТУ, KharlampidiKhE@corp.knrtu.ru; **Р. Я. Дебердеев** – профессор, каф. ОХТ, КНИТУ, DeberdeevRYa@corp.knrtu.ru; **О. В. Стоянов** – и.о. зав. каф., каф. Технологии пластических масс, КНИТУ, StoyanovOV@corp.knrtu.ru.

© **I. M. Bagaveev** - Assistant, Department of General Chemical Technology (GCT), Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, BagaveevIM@corp.knrtu.ru; **S. N. Tuntseva** - Associate professor, the GCT department, KNRTU, TuntsevaSN@corp.knrtu.ru; **N. V. Ulitin** - Head of the GCT department, KNRTU, UlitinNV@corp.knrtu.ru; **K. A. Tereshchenko** - Professor, the GCT department, KNRTU, TereshchenkoKA@corp.knrtu.ru; **M. A. Bochkov** - Associate professor, the GCT department, KNRTU, BochkovMA@corp.knrtu.ru; **G. G. Elimanova** - Associate professor, the GCT department, KNRTU, ElimanovaGG@corp.knrtu.ru; **N. M. Nurullina** - Associate professor, the GCT department, KNRTU, NurullinaNM@corp.knrtu.ru; **Kh. E. Kharlampidi** - Professor, the GCT department, KNRTU, KharlampidiKhE@corp.knrtu.ru; **R. Ya. Deberdeev** - Professor, the GCT department, KNRTU, DeberdeevRYa@corp.knrtu.ru; **O. V. Stoyanov** - Acting Head of the Department of Plastics Technology, KNRTU, StoyanovOV@corp.knrtu.ru.

Дата поступления рукописи в редакцию – 01.02.26.  
Дата принятия рукописи в печать – 15.03.26.

13. J.M. Rodríguez-Díaz, M.T. Santos-Martín, Chemom. Intell. Lab. Syst., 95, 2, 199 (2009).
14. E.D. Dolan, R.M. Lewis, V. Torczon, SIAM J. Optim., 14, 2, 567 (2003).
15. U.M. Ascher, L.R. Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. SIAM, Philadelphia, 1998.

### References

1. T. Kawabata, J. Yamamoto, H. Koike, S. Yoshida, Sumitomo Kagaku (Engl. Ed.), Report 1, 1 (2019).
2. J. Tsuji, J. Yamamoto, M. Ishino, N. Oku, Sumitomo Kagaku, V. 2006-I, 1 (2006).
3. According to S. B. B. M. Danov, A. N. In. B. Sulimov, A. N. And. B. Ovcharov, USP. chem. chem. tekhnol., 23, 6 (99), 45 (2009).
4. L. G. Pinaeva, A. S. Noskov, Catal. Ind., 12, 3, 176 (2020).
5. A. N. Winner of the award named after Busev, Analytical chemistry of molybdenum. USSR Academy of Sciences, Moscow, 1962. p. 302.
6. J.-L. Burgot, Ionic Equilibrium in Analytical Chemistry. Springer, New York, 2012. 770 p.
7. V. N.N. Leonov, B. N.N. Bobilev, G. N. Prize winner. Stozhkova, Petrochemistry, 23, 1, 106 (1983).
8. S. Das, A. Gupta, D. Singh, S. Mahajani, Ind. Eng. Chem. Res., 58, 18, 7448 (2019).
9. I. Di Somma, R. Marotta, R. Andreozzi, V. Caprio, Ind. Eng. Chem. Res., 51, 22, 7493 (2012).
10. Y. Lu, D. Ng, L. Miao, M.S. Mannan, Thermochim. Acta, 501, 1-2, 65 (2010).
11. K.-T. Li, P.-H. Lin, S.-W. Lin, Appl. Catal. A, 301, 1, 59 (2006).
12. B. Chaudhuri, M.M. Sharma, Ind. Eng. Chem. Res., 30, 1, 227 (1991).
13. J.M. Rodríguez-Díaz, M.T. Santos-Martín, Chemom. Intell. Lab. Syst., 95, 2, 199 (2009).
14. E.D. Dolan, R.M. Lewis, V. Torczon, SIAM J. Optim., 14, 2, 567 (2003).
15. U.M. Ascher, L.R. Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. SIAM, Philadelphia, 1998.