

АННОТАЦИЯ
РАБОТ, ВЫПОЛНЕННЫХ ПО ГОСУДАРСТВЕННОМУ КОНТРАКТУ
№ 14.740.11.1180 ОТ «14» ИЮНЯ 2011 Г. В РАМКАХ ФЦП «НАУЧНЫЕ
И НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ КАДРЫ ИННОВАЦИОННОЙ
РОССИИ» НА 2009-2013 ГГ.

Название проекта: "Кинетический подход к различению гомогенного и гетерогенного механизмов катализа в реакциях сочетания арилгалогенидов с арилборными кислотами и низкомолекулярной олигомеризации олефинов".

Основной целью работы являлось различение гомогенного и гетерогенного механизмов катализа на основе анализа закономерностей дифференциальной селективности катализатора.

Основные результаты, полученные в ходе выполнения проекта:

Концепция наноразмерного механизма катализа реакции низкомолекулярной олигомеризации пропилена в присутствии каталитических систем на основе $Ni(acac)_2$ и алюминийорганических соединений, сформулированная на основании зависимостей дифференциальной селективности реакций, а также фазовых траекторий от природы алюминийорганического компонента каталитической системы, концентрации и природы каталитического предшественника и сокатализатора, влияющих на распределение катализатора между его различными формами реакции низкомолекулярной олигомеризации пропилена;

Концепция механизма катализа реакции сочетания арилгалогенидов с арилборными кислотами в присутствии "безлигандных" каталитических

систем, сформулированная на основании зависимостей дифференциальной селективности реакций от контролируемо изменяемых свойств предшественника катализатора, влияющих на распределение катализатора между его различными формами, включающая значимый вклад гетерогенного катализа в реакции Сузуки с арилбромидами, способный влиять на значение дифференциальной селективности реакции. При этом установлено, что истинным катализатором с большой вероятностью являются наноразмерные частицы палладия, находящиеся на поверхности гетерогенного предшественника катализатора;

Закономерности влияния природы алюминийорганического компонента, концентрации и природы каталитического предшественника и сокатализатора каталитических систем реакции низкомолекулярной олигомеризации пропилена на дифференциальную селективность;

Закономерности влияния текстурных свойств носителя в гетерогенном предшественнике катализатора на дифференциальную селективность реакции сочетания арилгалогенидов с арилборными кислотами,

Способ качественной и количественной оценки дифференциальной селективности катализатора, заключающийся в построении и сравнении фазовых траекторий реакции, проводимых в различных условиях;

Метод различения гомогенного, наноразмерного и гетерогенного механизмов катализа путем анализа фазовых траекторий каталитических реакций, заключающийся в сравнении дифференциальных селективностей реакций по образующимся продуктам при варьировании параметров, способных влиять на распределение катализатора между его потенциально активными формами;

Математическая модель, описывающая зависимость селективности реакций сочетания арилгалогенидов с арилборной кислотой и реакции олигомеризации пропилена от параметров реакции.