

УДК 54443

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2024.3.5

## АНАЛИЗ МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА В ПРИСУТСТВИИ 2,5,7,8-ТЕТРАМЕТИЛ-2-[(6,6А,7,9А-ТЕТРАГИДРО-5Н-ЦИКЛОПЕНТА-1,7-ФЕНАНТРОЛИН-6-ИЛ)МЕТИЛ]ХРОМАН-6-ОЛА В КАЧЕСТВЕ АНТИОКСИДАНТА МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

© Э. Ф. Сафаров, К. С. Шараева, Г. М. Шайморданова\*,  
И. В. Сафарова, А. Я. Герчиков

Уфимский университет науки и технологий  
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

\*Email: sharipovagm@uust.ru

*Изучен механизм антиокислительного действия конъюгата тетрагидрохинолина с хромановым фрагментом в процессе иницированного окисления 1,4-диоксана. Получены константы скорости стадии, составляющих механизм сложной последовательной реакции. Показана возможность программного комплекса PTC MathCad для построения математической модели и проведения процедуры моделирования механизмов сложных реакций радикально-цепного окисления органических соединений.*

**Ключевые слова:** тетрагидрохинолин, математическая модель, окисление, антиоксидант, PTC MathCad Prime.

### Введение

Механизм жидкофазного окисления органических соединений кислородом в жидкой фазе изучен достаточно основательно [1–5]. Он протекает как радикально-цепной процесс с вырожденным разветвлением цепи и включает в себя ряд стадий, которые являются ключевыми для большинства органических соединений. В качестве ключевых практически любого жидкофазного окисления выступают стадии зарождения (авто- или иницированного), продолжения, разветвления и обрыва цепи. Отличительной особенностью этого типа реакций является участие в них реагентов – исходных веществ и промежуточных соединений, концентрация и время жизни которых изменяются в широком интервале значений. Так, если концентрации исходных веществ исчисляются в долях, единицах или десятках молей в литре, концентрация промежуточных продуктов (радикалов, лабильных молекулярных частиц) имеет значения интервала  $10^{-10}$ – $10^{-6}$  М. При этом время жизни таких частиц составляет величину  $<10^{-3}$  с.

Экспериментальное исследование механизма реакций этого типа в присутствии ингибиторов окисления (антиоксидантов) как правило проводится на базе модельных реакций окисления субстратов, механизм и значения констант скорости ключевых стадий которых известен, что позволяет использовать эти данные при изучении механизма действия ингибитора [6–8]. Следует также иметь в виду, что введение в окисляемый субстрат молекул антиоксиданта приводит к необходимости введения в механизм модельной реакции новых стадий, смысл и содержание которых являются результатом эксперимента.

Большинство экспериментальных исследований реакций окисления в присутствии ингибитора ограничивается изучением кинетики поведения исходных молекулярных продуктов, в то время как определяющую роль в идентификации механизма реакции имеют кинетика и константы скорости реакции с участием промежуточных продуктов. Однако в силу весьма малых значений их концентраций и времени жизни решить эту задачу либо крайне сложно, либо невозможно. В этом случае единственным способом идентификации механизма и восстановления констант скорости стадий становится метод математического моделирования, широко применяемый в настоящее время для решения подобных задач [9–13].

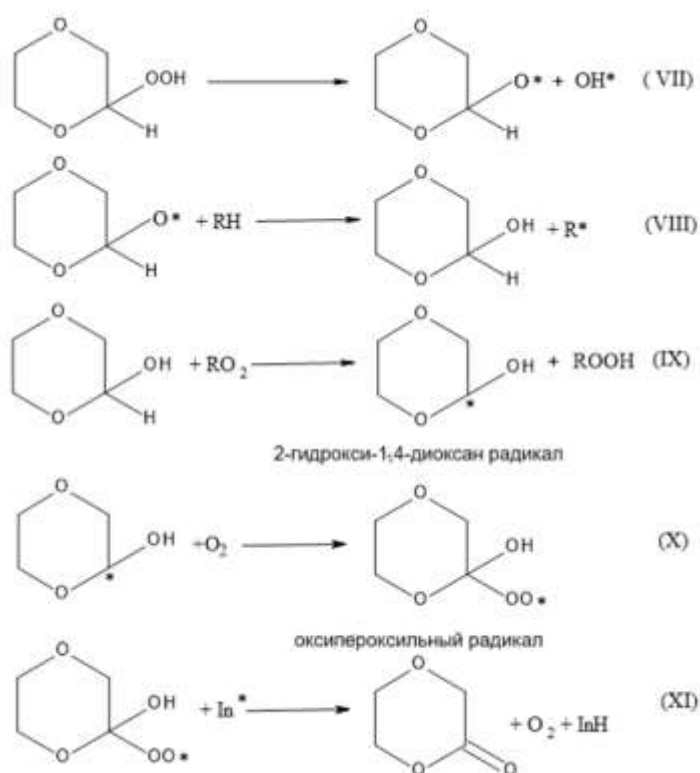
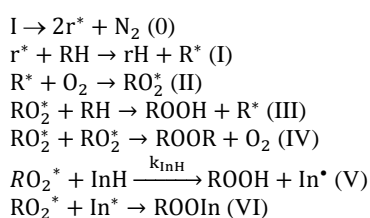
В настоящее время известен достаточно большой набор программных пакетов для процедуры математического моделирования. Однако особенность обсуждаемой реакции с точки зрения процедуры моделирования механизма сталкивается с проблемой жесткости математической модели [14], что ограничивает возможности известных пакетных программ. Для моделирования химических реакции используется программное обеспечение PTC Mathcad Prime, которое ранее не использовалось для моделирования механизма реакций жидкофазного окисления, но продемонстрировало возможность решения подобных вычислительных задач [15], в связи с чем было использовано нами для анализа механизма и получения кинетической картины ранее изученной реакции жидкофазного окисления 1,4-диоксана в присутствии добавок 2,5,7,8-Тетраметил-2-[(6,6а,7,9а-тетрагидро-5Н-циклопента-1,7-фенантролин-6-ил)метил]хроман-6-ола в качестве антиоксиданта (InH) [3].

### Вычислительный эксперимент

Основная задача химической кинетики заключается в определении изменения концентраций реагирующих веществ в многокомпонентной смеси в зависимости от времени. Для этого используется кинетическая модель реакции с известными кинетическими параметрами (константы скоростей реакций) и начальными концентрациями веществ [16–17].

Для численного решения системы дифференциальных уравнений (СДУ) в пакете программного обеспечения PTC Mathcad Prime можно использовать встроенные функции-интеграторы или решатели СДУ. Один из наиболее эффективных методов – использование адаптивной функции Odesolve, которая позволяет численно решать СДУ и адаптировать шаг интегрирования для достижения требуемой точности. Для решения прямой и обратной задачи были опробованы различные комбинации функций решателей, встроенных в программное обеспечение PTC Mathcad Prime. После тестирования ряда решателей прямой и обратной задач химической кинетики в пакете PTC Mathcad Prime было выявлено [15], что для решения прямой задачи наиболее предпочтительно использование решателя Odesolve, благодаря автоматическому анализу вводимых данных, для определения жесткости системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (ОНДУ), составленной на основе изотермической нестационарной модели без изменения объема в замкнутой системе на основе закона действующих масс и выбора функции для ее решения. Обратная задача химической кинетики заключается в определении кинетических параметров, таких как энергия активации, порядок реакции и константы скоростей отдельных реакций, на основе экспериментальных данных. Ранее нами были апробированы различные функции, встроенные в ПО PTC Mathcad Prime, и показано, что при помощи функции Minerr можно эффективно решать обратную задачу химической кинетики, позволяя оценить кинетические параметры на основе разницы экспериментальных и рассчитанных на основе кинетической модели и начальных приближений. Для оптимизации использовалась функция Minerr, использующая алгоритм Левенберга-Марквардта (LM). В случае сбоя алгоритма LM функция автоматически переключается на модуль KNITRO, используемый для решения задач оптимизации в пакетах MATLAB и Mathematica [18].

Схема 1



где I – инициатор, R\* и RO<sub>2</sub>\* – алкильный и пероксильный радикалы субстрата окисления, InH и In\* – ингибитор и его радикал.

Ранее нами была экспериментально изучена антиокислительная активность новых производных тетрагидрохинолина, которые обладают высоким потенциалом биологической активности за счет содержания в своей структуре короткоцепочечных эндогенных метаболитов  $\alpha$ -токоферола – производных 3,4-дигидро-2Н-бензопиран-2-ил-алкановых кислот. Экспериментальные результаты по изучению влияния такого рода соединений на скорость окисления субстрата послужили основой для формулирования возможного механизма реакции, где ключевой стадией стала реакция регенерации исходного ингибитора (*схема 1*) [3]. Механизм регенерации ингибитора при жидкофазном окислении органических соединений достаточно подробно изучен при окислении спиртов [19–22] и объясняется двойственной природой участвующих в реакции оксипероксильных радикалов, которые могут выступать как в роли окислителей, так и восстановителей. Ранее мы обнаружили, что гидроксид-1,4-диоксан, образующийся при окислении 1,4-диоксана может служить источником гидроксипероксильных радикалов. Это соединение как промежуточный продукт окисления 1,4-диоксана ранее было обнаружено авторами работы [23]. С учетом этого этапа классический механизм реакции окисления органических соединений в присутствии ингибитора (0)–(VI) для случая окисления 1,4-диоксана в присутствии изучаемого конъюгата InH был дополнен новыми стадиями (VII)–(XI) и представлен в виде *схемы 1*.

На основе *схемы 1* была составлена СДУ, которая представлена на *рис. 1*.

$$\frac{d}{dt} C_i(t) = \left[ \begin{array}{c} -(k_1 \cdot C_1(t)) \\ -(k_2 \cdot C_2(t) \cdot C_4(t)) + 2 \cdot k_1 \cdot C_1(t) \\ k_1 \cdot C_1(t) \\ -(C_4(t) \cdot (k_4 \cdot C_8(t) + k_2 \cdot C_2(t) + k_9 \cdot C_{24}(t))) \\ k_2 \cdot C_2(t) \cdot C_4(t) \\ k_4 \cdot C_4(t) \cdot C_8(t) + ((k_2 \cdot C_2(t) + k_9 \cdot C_{24}(t)) \cdot C_4(t) - k_3 \cdot C_6(t) \cdot C_7(t)) \\ -(k_3 \cdot C_6(t) \cdot C_7(t)) \\ -(4 \cdot k_5 \cdot C_8(t)^2) - (k_4 \cdot C_4(t) + k_{10} \cdot C_{25}(t) + k_7 \cdot C_{13}(t) + k_6 \cdot C_{12}(t)) \cdot C_8(t) + k_3 \cdot C_6(t) \cdot C_7(t) \\ -(k_8 \cdot C_9(t)) + (k_4 \cdot C_4(t) + k_{10} \cdot C_{25}(t)) \cdot C_8(t) \\ 2 \cdot k_5 \cdot C_8(t)^2 \\ 2 \cdot k_5 \cdot C_8(t)^2 + (k_{12} \cdot C_{13}(t) \cdot C_{27}(t) - k_{11} \cdot C_{11}(t) \cdot C_{26}(t)) \\ -(k_6 \cdot C_{12}(t) \cdot C_8(t)) + k_{12} \cdot C_{13}(t) \cdot C_{27}(t) \\ (-(k_7 \cdot C_{13}(t)) + k_6 \cdot C_{12}(t)) \cdot C_8(t) - k_{12} \cdot C_{13}(t) \cdot C_{27}(t) \\ k_6 \cdot C_{12}(t) \cdot C_8(t) \\ k_7 \cdot C_{13}(t) \cdot C_8(t) \\ k_8 \cdot C_9(t) \\ k_8 \cdot C_9(t) - k_9 \cdot C_{24}(t) \cdot C_4(t) \\ -(k_{10} \cdot C_{25}(t) \cdot C_8(t)) + k_9 \cdot C_{24}(t) \cdot C_4(t) \\ k_{10} \cdot C_{25}(t) \cdot C_8(t) - k_{11} \cdot C_{11}(t) \cdot C_{26}(t) \\ -(k_{12} \cdot C_{13}(t) \cdot C_{27}(t)) + k_{11} \cdot C_{11}(t) \cdot C_{26}(t) \\ k_{12} \cdot C_{13}(t) \cdot C_{27}(t) \end{array} \right]$$

Рис. 1. Кинетическая модель реакции радикально-цепного окисления 1,4-диоксана в присутствии InH.

### Результаты и обсуждение

Для решения данной СДУ и подтверждения предполагаемого механизма мы применили метод математического моделирования с использованием пакета ПО PTC MathCad Prime. Решение прямой задачи производилось с помощью адаптивной функции решателя – Odesolve, решение обратной задачи производилось на основе оптимизации экспериментальных и рассчитанных данных с помощью функции решателя Minerr.

Для проведения математического моделирования использовались экспериментальные данные по поглощению кислорода воздуха в ходе ингибированного окисления 1,4-диоксана в присутствии 2,5,7,8-тетраметил-2-[(6,6а,7,9а-тетрагидро-5Н-циклопента-1,7-фенантролин-6-ил)метил]хроман-6-ола (InH) [3].

Итогом решения обратной задачи на основе построенных систем ОНДУ стали константы скоростей химической реакции, которые приведены в *табл. 1*. При их использовании в решении прямой задачи была получена рассчитанная кинетическая кривая расходования кислорода, представленная на *рис. 2* (линия), которая удовлетворительно совпала с экспериментальными данными (точки).

С помощью используемого программного обеспечения удастся также воспроизвести поведение кинетических кривых для лабильных промежуточных продуктов (*рис. 3*), экспериментальное определение которых недоступно ввиду их короткого времени жизни и низких концентрации.

Рассчитанные значения константы скорости реакции окисления 1,4-диоксана в присутствии InH

№	Литературные значения [24]	Рассчитанные значения	Единицы измерения
k <sub>1</sub>	5.21·10 <sup>-5</sup>	1.79·10 <sup>-5</sup>	с <sup>-1</sup>
k <sub>2</sub>		1.06·10 <sup>4</sup>	
k <sub>3</sub>		1.95·10 <sup>8</sup>	
k <sub>4</sub>	7.9	6.37	
k <sub>5</sub>	6.67·10 <sup>7</sup>	5.78·10 <sup>7</sup>	
k <sub>6</sub>	2.60·10 <sup>5</sup>	1.71·10 <sup>5</sup>	
k <sub>8</sub>		1.69·10 <sup>4</sup>	с <sup>-1</sup>
k <sub>7</sub>		1.52·10 <sup>9</sup>	л моль·с
k <sub>9</sub>		2.72·10 <sup>3</sup>	
k <sub>10</sub>		9.65·10 <sup>4</sup>	
k <sub>11</sub>		4.80·10 <sup>9</sup>	
k <sub>12</sub>		3.51·10 <sup>4</sup>	

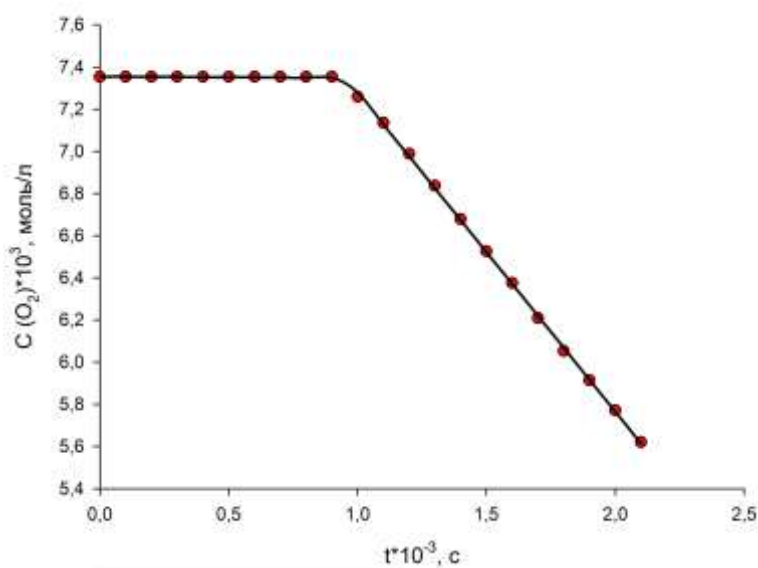


Рис. 2. Экспериментальная (точки) и рассчитанная (линия) кинетические кривые поглощения кислорода в реакции окисления 1,4-диоксана в присутствии InH.

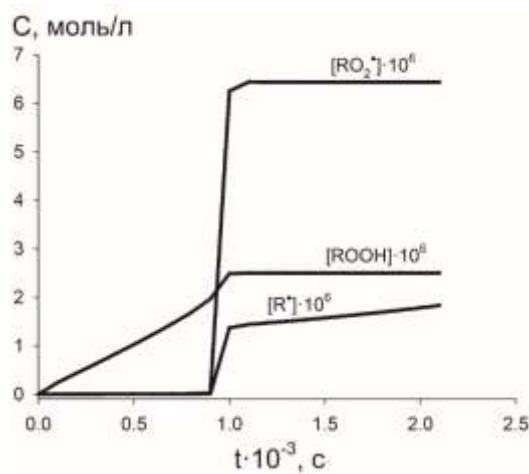


Рис. 3. Рассчитанные с помощью ПО PTC MathCad Prime кинетические кривые поведения лабильных промежуточных продуктов радикально-цепного окисления 1,4- диоксана в присутствии антиоксиданта.

### Заключение

В настоящей работе показано, что ПО РТС MathCad Prime способно успешно решать задачи идентификации механизма сложных реакций радикально-цепного окисления органических соединений в присутствии антиоксиданта. Об этом свидетельствует удовлетворительное совпадение констант скорости стадий реакций 1,4,5,6 с литературными данными, а также нахождение значений ранее неизвестных констант скорости (табл. 1). Кроме этого, существенно то, что удалось восстановить кинетику поведения радикалов, ведущих окислительную цепь ( $R^*$ ,  $RO_2^*$ ). Кинетика изменения их концентраций и порядки их численных значений отвечают предложенному механизму реакции, согласно которому эти промежуточные продукты возникают по истечении наблюдаемому на эксперименте периода индукции. При этом, кинетика их поведения отвечает классическому механизму последовательных реакции. Важно также, что кинетика накопления гидропероксида как первичного продукта окисления (рис. 3) весьма удовлетворительно соответствует кинетике поглощения кислорода (рис. 2), что следует из совпадения величин периодов индукции. Таким образом, РТС MathCad Prime может быть успешно использовано при построении математической модели и проведения процедуры моделирования механизмов сложных реакций радикально-цепного окисления органических соединений.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073 (<https://rscf.ru/project/19-73-20073/>), а также за счет средств Программы стратегического академического лидерства Уфимского университета науки и технологий (ПРИОРИТЕТ-2030).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Denisov E. T., Afanasev I. B. Oxidation and Antioxidants in Chemistry and Biology. London: CRC Press, Boca Raton: Taylor and Francis, 2005. URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2005.08.045>
2. Герчиков А. Я., Ахатова Г. Р., Шарипова Г. М. и др. Исследование механизма ингибированного окисления 1,4-диоксана методом математического моделирования // Кинетика и катализ. 2015. Т. 56. №3. С. 301. [Gerchikov A. Ya., Akhatova G. R., Sharipova G. M. et al. Study of the mechanism of inhibited oxidation of 1,4-dioxane using mathematical modeling // Kinetics and catalysis. 2015. Vol. 56(3). P. 301]. URL: <https://doi.org/10.1134/S0023158415030052>
3. Sharipova G. M., Safarova I. V., Gerchikov A. Ya. et al. Kinetics and mechanism of antioxidant action of polysubstituted tetrahydroquinolines in liquid-phase oxidation reactions of organic compounds by oxygen // International Journal of Chemical Kinetics. 2022. Vol. 54(7). P. 435–443. URL: <https://doi.org/10.1002/kin.21572>
4. Amorati R., Baschieri A., Valgimigli L. Measuring antioxidant activity in bioorganic samples by the differential oxygen uptake apparatus: recent advances // Journal of Chemistry. 2017. 2012:1–12. URL: <https://doi.org/10.1155/2017/6369358>
5. Denisov E. T., Mitskevich N. I., Agabekov V. E. Liquid-phase oxidation of oxygen-containing compounds. New York: Consultants Bureau, 1977. URL: <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-8517-2>
6. Garifullina G. G., Nasretdinova R. N., Gerchikov A. Ya. et al. Antioxidant efficiency of triterpenoids in radical chain oxidation of organic compounds // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2024. Vol. 137. P. 39–51. URL: <https://doi.org/10.1007/s11144-023-02516-7>
7. Gerchikov A. Ya., Safarova I. V., Shaymordanova G. M. et al. The specifics of the antioxidant action mechanism of cyclopentane annealed tetrahydroquinolines // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2023. Vol. 136. P. 1455–1466. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11144-023-02424-w>
8. Denisov E. T., Azatyay V. V. Inhibition of Chain Reactions. London: Gordon & Breach, 2000.
9. Tikhonova M. V., Spivak S. I., Garifullina G. G., Gerchikov A. Ya. The kinetic model of n-decane oxidation in the presence of inhibitory composition // International Journal of Chemical Kinetics. 2014. Vol. 46(4). P. 220–230. URL: <https://doi.org/10.1002/kin.20848>
10. Strongin R. G., Gergel V. P., Gorodetsky S. Yu., Markina M. V. Modern methods of optimal decision making. N. Novgorod: NNGU Publishing House, 2002.
11. Мартынова Ю. З., Хайруллина В. Р., Герчиков А. Я. и др. QSPR-моделирование антиокислительной активности потенциальных и промышленно используемых стабилизаторов из класса замещенных алкилфенолов // Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25(4). С. 723–730 [Martynova Yu. Z., Khairullina V. R., Gerchikov A. Ya. et al. QSRR-modeling of antioxidant activity of potential and industrially used stabilizers from the class of substituted alkylphenols // Bulletin of Bashkir University. 2020. Vol. 25(4). P. 723–730]. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44648797>
12. Zimin Yu. S., Kutlugildina G. G., Sharipova G. M. Mechanism of oxidative destruction of polyvinyl alcohol under the action of ozone-oxygen mixture in aqueous solutions // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis/ 2022. URL: <https://doi.org/10.1007/s11144-022-02302-x>
13. Khairullina V., Safarova I., Sharipova G. et al. QSAR Assessing the Efficiency of Antioxidants in the Termination of Radical-Chain Oxidation Processes of Organic Compounds // Molecules. 2021. Vol. 26(2). P. 421. URL: <https://doi.org/10.3390/molecules26020421>
14. Фасхутдинова Р. И., Фасхутдинов А. Г., Еникеева Л. В. и др. Численный анализ жесткости математического описания процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции // Вестник Башкирского университета, 2021. Т. 26. №1. С. 99–105. [Faskhutdinova R. I., Faskhutdinov A. G., Enikeeva L. V. et al. Numerical analysis of the rigidity of the mathematical description of the process of catalytic isomerization of the pentane-hexane fraction // Bulletin of the Bashkir University, 2021. Vol. 26(1). P. 99–105]. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=4555127>
15. Алекторов Е. А., Шарипова Г. М., Сафарова И. В. Возможности ПТК Mathcad Prime для решения задач химической кинетики // Башкирский химический журнал. 2021. Т. 28(4). С. 76–80. [Alektorov E. A., Sharipova G. M., Safarova I. V. Possibilities of the Mathcad Prime software for solving problems of chemical kinetics // Bashkir Chemical Journal. 2021. Vol. 28(4). P. 76–80]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/vozmozhnosti-ptc-mathcad-prime-dlya-resheniya-zadach-himicheskoy-kinetiki>
16. Брин Э. Ф. Обратные задачи химической кинетики как метод исследования механизмов сложных реакций // Успехи химии. 1987. Т. 56. №3. С. 428–446. [Brin E. F. Inverse problems of chemical kinetics as a method for studying the mechanisms of complex reactions // Uspekhi Khimii. 1987. Vol. 56(3). P. 428–446.]
17. Bock H. G. Numerical Treatment of Inverse Problems in Chemical Reaction Kinetics. In Modelling of Chemical Reaction Systems / Eds. K. Ebert, P. Deuflhard, W. Jager. Springer Series in Chemical Physics. 1981. Vol. 18. P. 102.
18. Коробов В. И., Очков В. Ф. Химическая кинетика: введение с Mathcad/Maple/MCS. М.: Горячая линия – Телеком, 2009. 384 с. [Korobov V. I., Ochkov V. F. Chemical Kinetics: Introduction with Mathcad/Maple/MCS. Moscow: Hotline – Telecom, 2009. 384 p.].
19. Denisov E. T., Kharitonov V. V. Izv. Acad. Sci. USSR, ser. chem. 1963. Vol. 12. 2222. URL: <https://doi.org/10.1007/bf00844015>
20. Vardanyan R. L., Kharitonov V. V., Denisov E. T. Izv. Acad. Sci. USSR, ser. chem. 1970. Vol. 7. 1536. URL: <https://doi.org/10.1007/bf00853833>

21. Шарипова Г. М., Булякова Р. Д., Сафарова И. В., Герчиков А. Я. Исследование кинетики и механизмов реакций ингибированного добавками 5-гидрокси-6-метилурацила окисления изопропилового спирта // Вестник Башкирского университета. 2016. Т. 21. №4. С. 935–939. [Sharipova G. M., Bulyakova R. D., Safarova I. V., Gerchikov A. Ya. Study of the kinetics and reaction mechanisms of isopropyl alcohol oxidation inhibited by 5-hydroxy-6-methyluracil additives // Bulletin of the Bashkir University. 2016 Vol. 21(4). P. 935–939]. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=28152025>
22. Зимин Ю. С., Кутлугильдина Г. Г., Рамазанова З. Ф., Мустафин А. Г. Взаимодействие окисленной фракции поливинилового спирта с производными урацила в водных растворах // Журнал физической химии. 2022. Т. 96. №8. С. 1159–1164. [Zimin Yu. S., Kutlugildina G. G., Ramazanova Z. F., Mustafin A. G. Interaction of the oxidized fraction of polyvinyl alcohol with uracil derivatives in aqueous solutions // Journal of Physical Chemistry. 2022. Vol. 96(8). P. 1159–1164]. URL: <https://doi: 10.31857/S0044453722080313>
23. Абдуллаева А. С., Тимашова Е. А., Букина Е. Ю. и др. // Вестник МИТХТ им. М. В. Ломоносова. 2008. Т. 3(4). С. 63. [Abdullaeva A. S., Timashova E. A., Bukina E. Yu. et al. Lomonosov MITHT Vestnik. 2008. Vol. 3(4). P. 63].
24. Denisov E. T. Handbook of Antioxidants: Bond Dissociation Energies, Rate Constants, Activation Energies, and Enthalpies of Reactions. 1st ed. CRC Press, 1995. URL: <https://doi.org/10.1201/9781351072373>

*Поступила в редакцию 03.07.2024 г.*

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2024.3.5

**ANALYSIS OF THE OXIDATION MECHANISM OF 1,4-DIOXANE IN THE PRESENCE OF 2,5,7,8-TETRAMETHYL-2-[(6,6A,7,9A-TETRAHYDRO-5N-CYCLOPENTA-1,7-PHENANTHROLIN-6-YL)METHYL]CHROMAN-6-OL AS AN ANTIOXIDANT BY MATHEMATICAL MODELING**

© E. F. Safarov, K. S. Sharayeva, G. M. Shaymordanova\*,  
I. V. Safarova, A. Ya. Gerchikov

*Ufa University of Science and Technology  
32 Zaki Validi st., 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

*\*Email: sharipovagm@uust.ru*

The mechanism of antioxidant action of tetrahydroquinoline conjugate with a chromane moiety in the initiated oxidation of 1,4-dioxane has been studied. The rate constants of the stages constituting the mechanism of a complex sequential reaction were obtained. The possibility of the PTC MathCad software package for building a mathematical model and carrying out the procedure of modeling the mechanisms of complex reactions of radical-chain oxidation of organic compounds is shown.

**Keywords:** tetrahydroquinoline, mathematical model, oxidation, antioxidant, PTC MathCad Prime.

*Received 03.07.2024.*