

сусной кислот при температуре 30 °С (схема 1):

Однако, данная методика обладает следующими недостатками: продукт реакции нестабилен и, как следствие, выход продукта составляет менее 30%.

Мы предлагаем новые методы синтеза 1,3,2-бенздиоксолов с использованием эко-

логически безопасного Oxhone® (схема 2):

Полученные соединения были охарактеризованы современными физико-химическими методами.

В дальнейшем планируется оптимизация методик окисления этих бензолов и изучение их реакционной способности.

Список литературы

1. Lucchetti N. et al. // *Adv. Synth. & Catal.*, 2016.– 358.– 1.– 2093–2099.
2. Wolf W., Chalekson E., Kobata D. // *J. Org. Chem.*, 1967.– 32.– 10.– 3239–3241.
3. Maity A., Hyun S.M., Powers D.C. // *Nature chem.*, 2018.– 10.– 2.– 200.
4. Zagulyaeva A.A., Yusubov M.S., Zhdankin V.V. // *J. Org. Chem.*, 2010.– 75.– 6.– 2119–2122.

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСИ АЦЕТОН-ТОЛУОЛ-БУТАНОЛ-БУТИЛАЦЕТАТ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

И.С. Касьян

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.К. Фролкова

Московский технологический университет

Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова

Россия, г. Москва, пр. Вернадского 86, frolova@gmail.com

При регенерации растворителей в технологиях основного органического и нефтехимического синтеза, фармацевтических препаратов часто сталкиваются с необходимостью разделения азеотропных смесей. Целью настоящего исследования является разработка принципиальных схем ректификационного разделения четырехкомпонентной смеси, образующейся при производстве лакокрасочных материалов.

Для описания фазового равновесия и расчета ректификации использовали программный комплекс AspenPlus® и модель локальных составов – двухпараметрическое уравнение Вильсона. Подобранный набор параметров позволяет описывать парожидкостное равновесие системы в диапазоне давлений 6,7–101,3 кПа с относительной ошибкой, не превышающей 4–5% (табл. 1).

Таблица 1. Экспериментальные [1–3] и расчетные характеристики бинарных азеотропов при разных давлениях

Р, кПа	x_1 (эксп.), мол. доли	$T_{\text{кип}}$ (эксп), °С	x_1 (расч), мол. доли	$T_{\text{кип}}$ (расч), °С	Δx_1 , %	ΔT , %
Толуол (1)–бутанол (2)						
101,3	0,677	105,47	0,677	105,31	0	0,15
85,3	0,69	99,97	0,7145	99,65	3,55	0,32
40,0	–	–	0,874	78,73	–	–
12,0	–	–	0,998	49,49	–	–
6,7	–	–	–	–	–	–
Бутанол (1)–бутилацетат (2)						
101,3	0,79	–	0,7794	116,97	1,34	–
40,0	–	–	0,598	91,18	–	–
10,0	–	–	0,402	58,97	–	–
6,7	0,37	–	0,3573	50,73	3,43	–

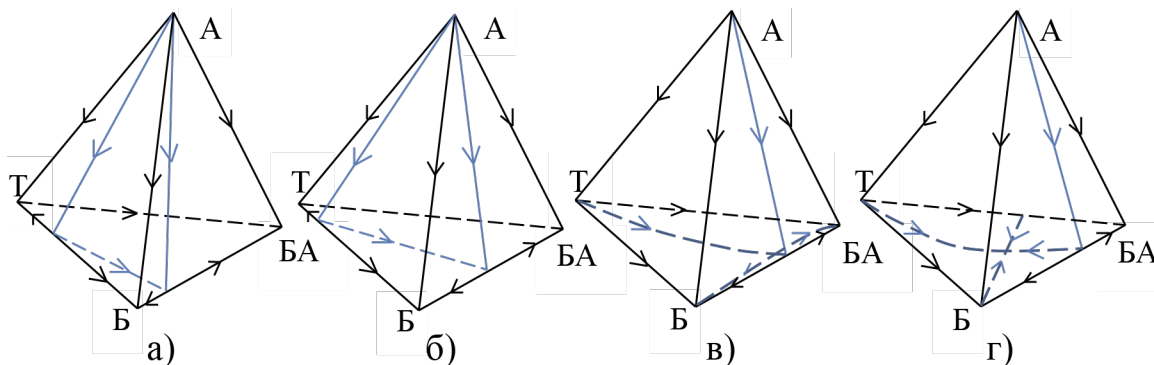


Рис. 1. Фазовые диаграммы четырехкомпонентной системы ацетон (А) – толуол (Т) – бутанол (Б) – бутилацетат (БА) при 101,3 кПа (а), 40 кПа (б), 12 кПа (в), 6,7 кПа (г)

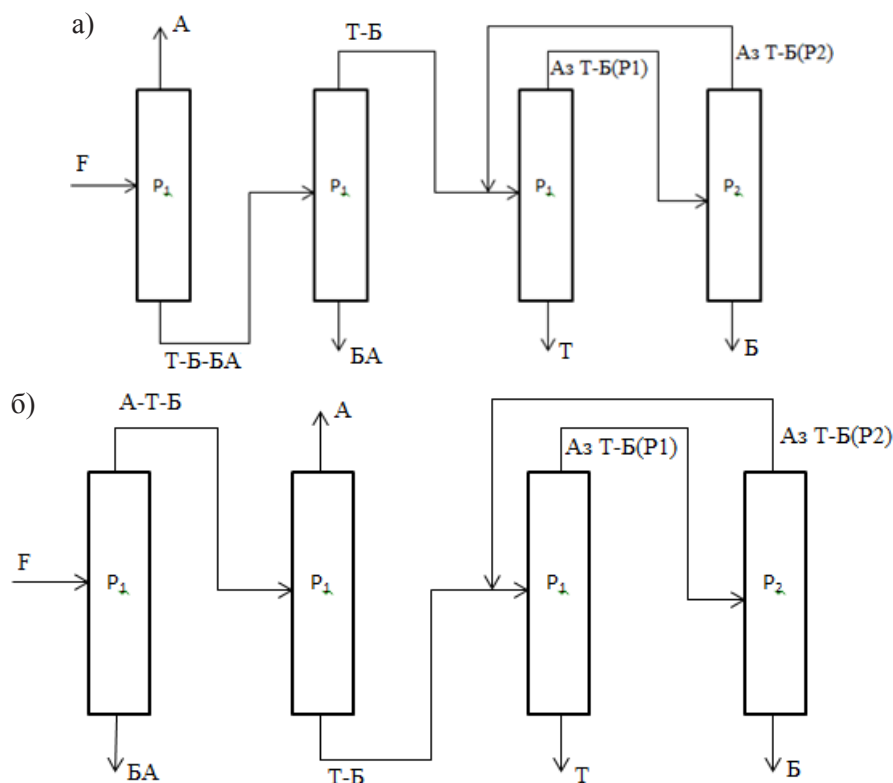


Рис. 2. Схемы разделения четырехкомпонентной смеси А-Т-Б-БА

При понижении давления структура диаграммы фазового равновесия (рис. 1) претерпевает значительные изменения: появляются бинарный (Т-БА) и тройной (Т-Б-БА) азеотропы; в диапазоне давлений 101,3–10 кПа наблюдается сдвиг азеотропа Б-БА и исчезновение азеотропа Т-Б.

Выявленный характер эволюция фазовой диаграммы при варьировании давления позволяет использовать в схеме разделения комплекс

колонн, работающих под разным давлением. Предложены две схемы (рис. 2), отличающиеся типом разделения в первой колонне: первое (а) или второе (б) заданное разделение. Давление в первых трех колоннах 101,3 кПа, в четвертой 43 кПа.

Предварительные расчеты ректификации в колоннах эффективностью до 35 теоретических тарелок показали работоспособность данных схем.

Список литературы

1. Seetharamaswamy V., Subrahmanyam V. Chiranjivi C., Dakshina-murthy P. // *J. Appl. Chem.*, 1969. – 19. – P.258–262.
2. Gorbunov A.N., Susarev M.P., Balashova I.M. // *Zh. Prikl. Khim.*, 1968. – 41. – P.312.
3. Gel'perin N.I., Novikova K.E. // *Zh. Prikl. Khim.*, 1953. – 26. – P.912.

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ СИНТЕЗА МУЛЬТИТОПНЫХ ЛИГАНДОВ ПРОИЗВОДНЫХ ИМИДАЗОЛА

М.А. Ключенко

Научный руководитель – д.х.н., профессор А.С. Потапов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, klyuchenkomaksim@mail.ru

Соединения, содержащие два и более азольных кольца, соединенные алифатическим линкером, могут выступать в качестве хелатирующего лиганда в координационных соединениях различной структуры. Так как данные структуры могут образовывать хелатные комплексы с ионами большинства переходных металлов [1], их можно использовать в качестве сенсоров [2] и строительных блоков для металлоорганических каркасов [3], известные в литературе как MOFs [4].

В данной работе был предложен метод синтеза лигандов с жестким фениленовым линкером на основе имидазола. Синтез проводили между карбонилдимидазолом **1** и рядом производных бензальдегида с использованием в качестве ка-

тализатора хлорида кобальта ($\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) (схема 2). Реакцию проводили в отсутствие растворителя в инертной атмосфере (аргона или азота).

В качестве производных бензальдегида использовались: бензальдегид **2**, 4-гидроксibenзальдегид **3**, анисовый альдегид **4**, 4-нитробензальдегид **5**, 4-бромбензальдегид **6** и терефталевый альдегид **7**. Продукты выделялись с помощью колоночной хроматографии с высокими выходами. Структура синтезированных соединений анализировалась с помощью ИК и ЯМР спектроскопии.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда, проект №15-13-10023.

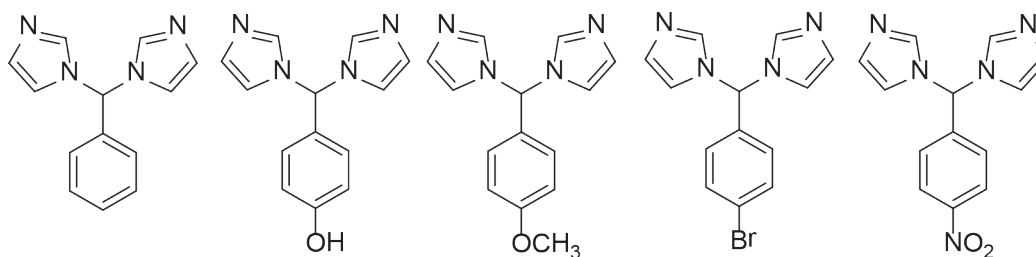


Схема 1.

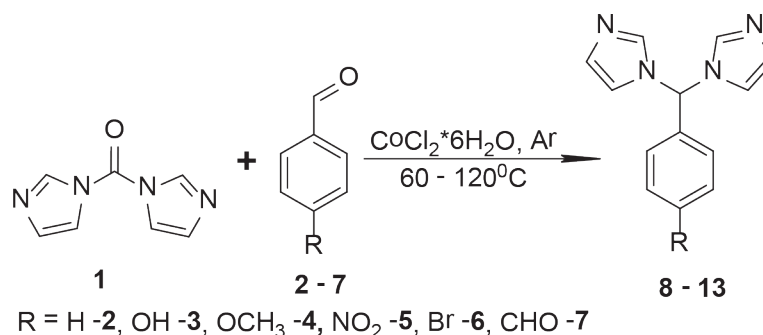


Схема 2. Общая схема синтеза лигандов