

РАЗРАБОТКА ПУТЕЙ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА
ИЗОПРЕНА ПО «ДИОКСАНОВОМУ» МЕТОДУ В ПРИСУТСТВИИ
УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК РАЗЛИЧНОГО ДИАМЕТРА

Пасько П. А.¹, Вакулин И. В.¹, Зайтунова Г. Г.¹, Вакулина А. И.²

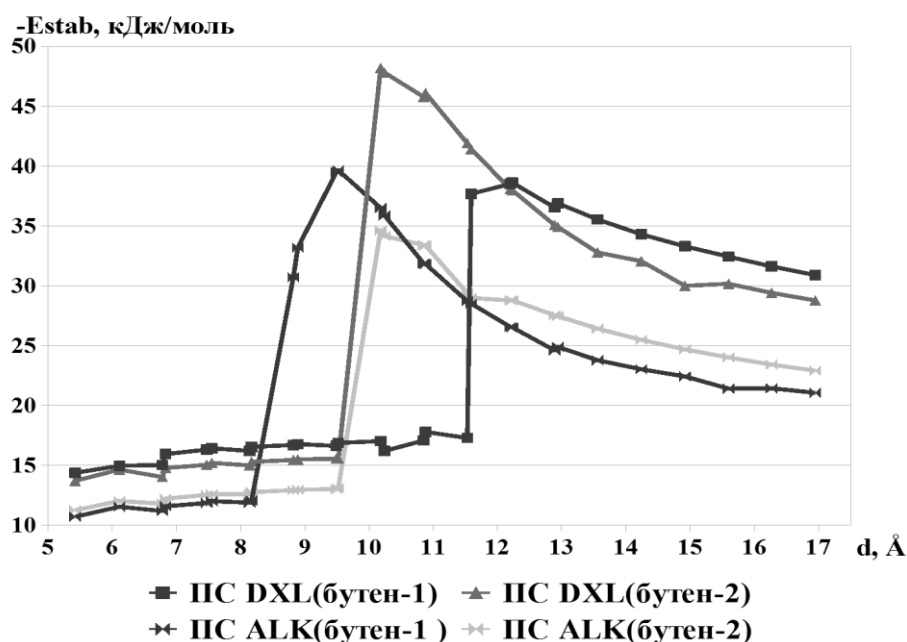
¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²УОР № 1, г. В. Пышма, Россия

pasko.pav62@gmail.com

β -замещенные гидрированные фураны и их производные, представляют большой практический интерес. Однако отсутствие удобных методов их синтеза затрудняет широкое применение указанных соединений. Методами квантовой химии и молекулярной динамики изучена возможность повышения селективности образования 4,4-диметил-1,3-диоксана реакции Принса, который является ключевым полупродуктом в синтезе изопрена по «диоксановому» методу.

Избирательная стабилизация ПС данной реакции может осуществляться цеолитами и углеродными нанотрубками и не требует формирования новых материалов, содержащих полости определенного строения. Нами были рассмотрены углеродные нанотрубки различных диаметров и кластеры на их основе. Ниже представлены зависимости энергии стабилизации рассматриваемых переходных ПС от диаметра углеродных нанотрубок.



Во всех случаях они имеют экстремальный характер для обоих рассмотренных механизмов. При этом в случае внутримолекулярной циклизации ненасыщенных алкоксикарбениевых ионов наиболее заметный стабилизирующий эффект для углеродных нанотрубок должен наблюдаться в интервале значений диаметров 9,50–12,23 Å. В случае рециклизации диоксолениевых ионов интервал несколько смещен в область больших значений и составляет 10,18–12,23 Å. Очевидно, именно в данном интервале значений диаметров формирование ПС происходит уже внутри трубки.