

**ПРО СУМІСНЕ ОКИСНЕННЯ КУМОЛУ І БЕНЗИЛОВОГО СПИРТУ
В ПРИСУТНОСТІ N-ГІДРОКСИФТАЛІМІДУ**

Гринда Ю. М.¹, *Хавунко О. Ю.*¹, Компанець М. О.², Шендрик О. М.³, Опейда Й. О.^{1,3}

¹Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглекімії
ім. Л. М. Литвиненка НАНУ

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглекімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ

³Донецький національний університет імені Василя Стуса

oksana.khavunko@gmail.com

Раніше було встановлено, що невеликі добавки бензилового спирту (ВА) до кумолу (RH), діють інгібуючи. Метою цієї роботи було дослідити дію N-гідроксифталіміду (NHPI) в процесі сумісного окиснення кумолу та бензилового спирту молекулярним киснем в області концентрацій, де спостерігається інгібуюча дія ВА. Кінетику окиснення досліджували за поглинанням кисню газоволюмометрично. Швидкість перемішування забезпечувала перебіг реакції в кінетичній області.

Досліджено окиснення індивідуальних компонентів кумолу та бензилового спирту в ацетонітрилі в присутності лише AIBN та AIBN з NHPI (табл.). Порівняння дослідів 1 та 2 показує, що в той час як додавання 0,01 моль/л NHPI при ініційованому окисненні індивідуального кумолу каталізує реакцію, то у випадку окиснення бензилового спирту каталітичного ефекту не спостерігається.

Вивчено вплив відносних концентрацій кумол-бензиловий спирт на швидкість ініційованого AIBN (0,025 моль/л) їх сумісного окиснення як у присутності, так і у відсутності радикального каталізатора NHPI. Показано, що додавання до RH 5 % об. ВА викликає зниження швидкості окиснення в 1,2 рази, тоді як у присутності NHPI спостерігається зниження швидкості реакції в 3,3 рази.

Табл. Швидкості сумісного окиснення RH та ВА в ACN (1:1), [AIBN] = 0,025 моль/л, [NHPI] = 0,01 моль/л, 70 °C, P _{O2} = 1 атм					
W _{ai} - присутній AIBN, W _{nh+ai} - присутні NHPI+AIBN					
№	[NHPI], моль/л	[RH], % об.	[BA], % об.	W _{ai} · 10 ⁵ , моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹	W _{nh+ai} · 10 ⁵ , моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
1	-	-	100	1,72	1,74
2	-	100	-	2,15	3,44
3	-	97,5	2,5	1,80	1,05
4	-	95	5	1,64	1,76
5	-	58	42	1,50	1,54
6	0,005	97,5	2,5		0,82
7	0,01	97,5	2,5		1,05
8	0,02	97,5	2,5		1,23
9	0,04	97,5	2,5		1,78
10	0,06	97,5	2,5		3,11

Не спостерігається дія NHPI в концентрації 0,01 моль/л при окисненні суміші RH – ВА 58:42 та 95:5 в ACN (досліди 5, 4). Разом з тим при співвідношенні RH – ВА 97,5:2,5 є суттєве зростання швидкості окиснення при збільшенні концентрації NHPI (досліди 6–10).

Додавання NHPI поступово зменшує інгібуючу дію ВА, а при концентрації NHPI 0,06 моль/л ця дія практично нівелюється.

При сумісному окисненні кумолу та бензилового спирту, в області малих концентрацій спирту спостерігається сильний інгібуючий ефект пов'язаний з наявністю реакцій обриву HOO· + ROO·. Додавання NHPI зменшує частку цієї реакції за рахунок реакції HOO· + NHPI, де утворюються радикали PINO, що не беруть участі в реакціях обриву ланцюгів.