

# CHEMICAL SCIENCES

## СИНТЕЗ АРОМАТИЧЕСКИХ АЦЕТИЛЕНОВЫХ СПИРТОВ НА ОСНОВЕ ФЕНИЛАЦЕТИЛЕНА

**Бურიёв Ф.Х.**

*Чирчикский государственный педагогический институт, Узбекистан*

## SYNTHESIS OF AROMATIC ACETYLENE ALCOHOLS BASED OF PHENYLACETYLENE

**Buriyev F.**

*Chirchik State Pedagogical Institute, Uzbekistan*

### АННОТАЦИЯ

Синтезированы ароматические ацетиленовые спирты (ААС) взаимодействием ацетиленового углеводорода- фенилацетилена (ФА) с кротоновым альдегидом и кетонами (ацетон, метилэтилкетон, метилизопропилкетон, пинокалин и ацетофенон) по методу Фаворского. Систематически научно обосновано влияние различных факторов- молярное соотношение исходных веществ, температуры, продолжительности реакции и природу растворителей на выход продукта. Определены виды промжуточных и дополнительных соединений и их образование. Найдено оптимальное условие синтеза с высоким выходом в процессе. Определена чистота, строение, элементный состав, кванто- химический и физические константы синтезированных соединений. Найдено оптимальное условие синтеза продукта с высоким выходом. Предложено механизм реакции основываясь на литературные источники.

### ABSTRACT

Aromatic acetylene alcohols (AAA) synthesized by reacting acetylene with phenylacetylene (PhA)- croton aldehyde and ketones (acetone, methyl ethyl ketone, methyl isopropyl ketone, acetophenone and pinokalin) by the method Favorsky. Scientifically proven influence of various factors-the molar ratio of the starting materials, temperature and the nature of the solvent on the yield of the product itself. The optimal conditions for the synthesis of a high yield in the process. Determined purity, structure, elemental composition, quantum chemical and physical constants of the synthesized compounds. The optimal conditions for the synthesis of a product with a high yield. The reaction mechanism based on literary sources.

**Ключевые слова:** ароматические ацетиленовые спирты, катализатор, кинетика, технологический процесс.

**Keywords:** aromatic acetylenic alcohols, catalyst, kinetics, technological process.

Высокая реакционная способность  $C\equiv C$ - и  $C-H$  связей в алкинах делает их участниками разнообразных реакций, составляющих одним из основных разделов органической синтетической и промышленной химии, которая называется “химия ацетилена” [1]. Содержание в молекуле ААС тройной связи и гидроксильной группы, расширяет области их применения. Они синтезируются в основном, на основе ацетиленовых углеводородов [2]. Из них широко распространены методы является реакции Фаворского [3], Гриньяра-Июича [4] и диазотирования [5]. Ацетиленовые углеводороды и их различные производные в силу их высокой реакционной способности и доступности широко применяются в органическом синтезе [6]. ААС используются в сельском хозяйстве в качестве биологически активных веществ, медицине- успокаивающих и более утешающих препаратов, органическом синтезе в виде исходных соединений, электротехнике как высококачественные растворители, мономеры при получения полимеров, в активные биоингибиторы химической и биохимической коррозии металлических конструкций и т.д. [7, 8].

**Экспериментальная часть.** ПМР спектры синтезированных соединений сняты на спектрофотометрах Jeol FX-90 Q (90 МГц) и ИК спектры зарегистрированы в тонком слое на спектрофотометре Bruker JFS-25. Спектры ЯМР  $^1H$  записаны при комнатной температуре на приборе Bruker DPX-400 с рабочей частотой 400.13 МГц, растворитель-  $CDCl_3$ , внутренний стандарт- ГМДС. Анализ реакционных смесей осуществляли методом ГЖХ на приборе ЛХМ-80, детектор по теплопроводности, газ-носитель- гелий, колонка 3000Ч3 мм, жидкая фаза полиэтиленгликоль 2000, 1% на NaCl.

**Методика синтеза фенилацетилена.** В трехгорлую колбу объемом 1000 мл, снабженную обратным холодильником и мешалкой, помещали 250 мл хлороформа и 230 мл стирола. Охлаждали и перемешивали, по каплям в течение 2 часов прибавляли 116 мл брома. Затем реакционную смесь перемешивали в течение 30 минут при 35 °C и отгоняли хлороформ. После сушки остатка на воздухе получили 1-фенил-1,2-дибромэтан с выходом 514 г,  $T_{пл}=33$  °C.

В той же колбе нагревали с обратным холодильником 56 г КОН в 240 мл метилового спирта при перемешивании и прибавляли небольшими порциями 132 г 1-фенил-1,2-дибромэтана в течение 2,5 часов. Смесь кипятили 30 минут при перемешивании, затем охлаждали и смешивали с 250 мл воды. Отделяли маслянистый слой, сушили над  $K_2CO_3$  и перегоняли в вакууме в присутствии гидрохинона [9]. Выход фенилацетилена 68% (от теоретического),  $T_{кип}=141-143$  °C,  $d_D^{20} = 0,92952 / \text{см}^3$ ,  $n_D^{20} = 1,5589$ .

**Методика синтеза ААС.** В трехгорлую колбу объемом 500 мл, снабженную механической мешалкой, обратным холодильником и капельной воронкой, помещали 56 г (1 моль) порошкообразного КОН и сразу же прибавляли 200 мл тетрагидрофурана (ТГФ), колбу охлаждали смесью льда и соли до температуры -5 °C и через капельную воронку в течение 1 часа прибавляли 10,2 г (0,1 моль) ФА и 0,1 моль кетона растворенного в 25 мл диэтилового эфира, после чего смесь оставляли на ночь. Реакционную смесь при охлаждении ледяной водой гидролизуют, эфирный слой и эфирные вытяжки сушили над поташем и подвергали перегонке в присутствии гидрохинона. Полученный спирт растворяется в бензоле, ацетоне, хлороформе и других органических растворителях, но плохо растворим в воде.

**Технология производства ААС.** (В качестве примера предложены технология производства диметилфенилацетиленилкарбинола). Технологический процесс производства диметилфенилацетиленилкарбинола разработан совместно с сотрудниками ОАО «Навоийазот».

В реактор 1 из бункера 2 загружается КОН, из емкости 3 ТГФ и образуется суспензия. В суспензию из емкости 4 подаётся фенилацетилен, а из 5 с помощью насоса ацетон. Реактор снаружи охлаждается жидким азотом, который подаётся из баллона. Процесс в этих условиях при температуре 0

°C проводится при продолжительности 6 часов. Образующийся катализат гидролизуются в емкости 6 и подается в сепаратор 7, в котором жидкий слой подается в отпарку 8, а остаток в другую емкость. Из отпарки органическая часть подается в ректификационную колонну 9. При этом последовательно выделяются непрореагировавшие ацетон и фенилацетилен, которые соответственно подается в емкости. При 145–147 °C выделяется диметилфенилацетиленилкарбинол и собирается в емкость 10.

Изучение всех параметров технологии синтеза диметилфенил-ацетиленилкарбинола:

- технологический процесс проводится при атмосферном давлении;

- общая продолжительность процесса составляет 10 часов, из них 2 часа приготовление суспензии; взаимодействие реагентов между собой 6 часов, гидролиз промежуточных продуктов – 0,5 часов, сепарация 0,5 часов и фракционное разделение образующихся продуктов – 1 час;

- для начальных трёх этапов температура процесса 0 °C, четвертого этапа – 100 °C и для процесса ректификации 180 °C;

- процесс проводится периодически и непрерывно, и при этом подача фенилацетилена составляет 0,476 л/час, ацетона 0,315 л/час, ТГФ 0,375 л/час и КОН 0,113 кг/час;

- выход диметилфенилацетиленилкарбинола составляет 3,15 мол/л час и скорость реакции 0,39 мол/л. час. При этом энергия активации реакции равно 9,16 ккал/моль;

- при проведении процесса соблюдается требование техники безопасности и защиты окружающей среды;

- установлено, что диметилфенилацетиленилкарбинола кипит при 145–147 °C, плотность 1,450 г/см<sup>3</sup>, показатель преломления 1,9320, его строения установлено по данным ИК- и ПМР- спектроскопии, состав- по данным элементного анализа, а чистота- методом ГЖХ.

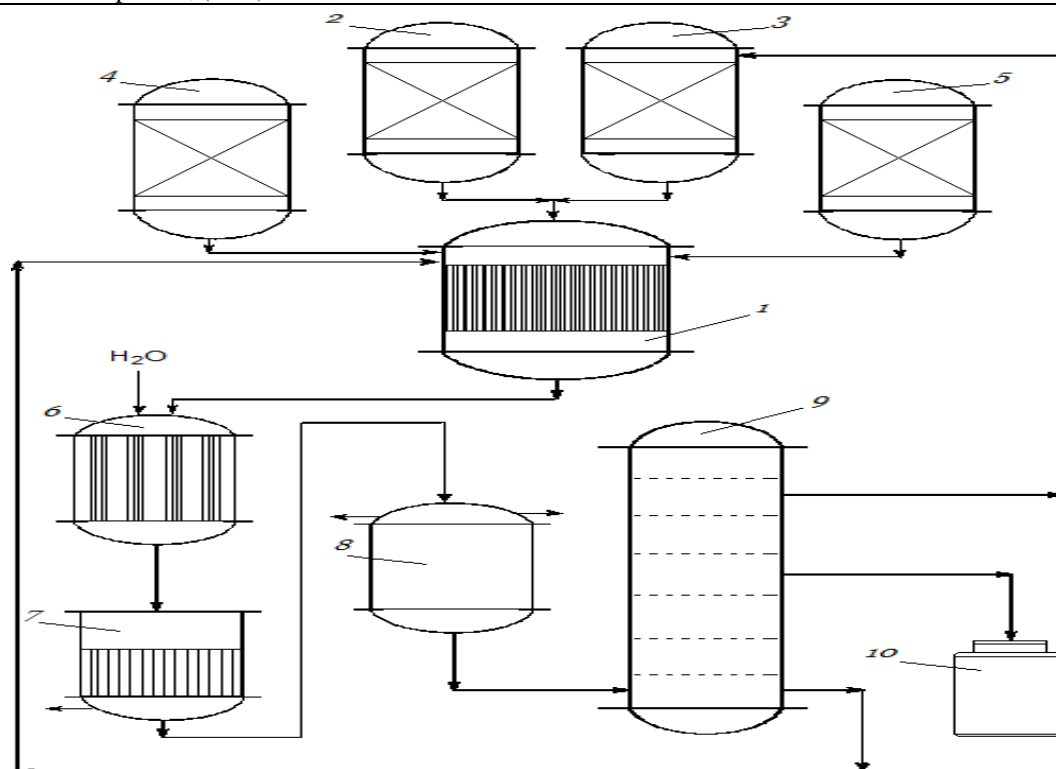
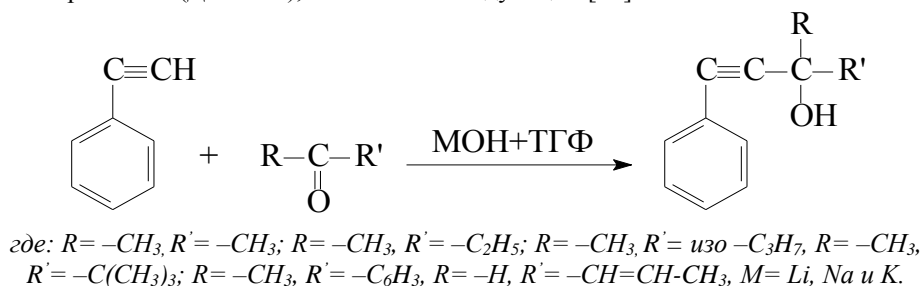


Рис. 1. Принципиальная технологическая схема процесса получения диметилфенилацетиленилкарбинола  
1–реактор, 2–бункер для катализатора, 3–емкость для ТГФ, 4–емкость для ФА, 5–емкость для ацетона, 6–емкость для гидролиза, 7–сепаратор, 8–отпарк, 9–ректификационная колонка, 10–емкость для ААС.

**Результаты и их обсуждение.** Можно синтезировать ААС взаимодействием на ФА некоторых кетонов и альдегидов по методу Фаворского. В качестве карбонильных соединений использовали ацетон, метилэтилкетон, метилизопропилкетон, пинокалин, ацетофенон и кротоновый альдегид и при соответственно синтезировали ААС: диметилфенилацетиленилкарбинола (ДМФАК), метилэтил-

фенилацетиленилкарбинола (МЭФАК), метилизопропилфенилацетиленилкарбинола (МИПФАК), метил-третичныйбутилфенилацетиленилкарбинола (МТБФАК), фенилфенил-ацетиленилкарбинола (ФФАК) и пропенилфенилацетиленилкарбинола (ПФАК).

Схему реакции синтеза ААС протекает в следующем [10]:



Для оптимизации процесса синтеза ААС систематически исследовали влияние различных факторов- температуры, продолжительности реакции, растворителя и природы катализаторов, мольных содержаний исходных реагентов на их выхода.

В качестве растворителей использовали протонные и апротонные растворители– метанол, этанол, диэтиловый эфир (ДЭЭ) и тетрагидрофуран, применяли катализаторы высокой основности LiOH, NaOH и KOH.

В табл.1. проведены результаты по влиянию природы катализатора и продолжительности реакции на выход ААС.

С увеличением продолжительности реакции от 4 до 8 часов увеличивается выход целевого продукта. Основной причиной этого является, то что при проведении реакции продолжительностью 4 – 6 часов исходные реагенты полностью не вступают в реакции и остаются в смеси, а также они при взаимодействии с катализатором образуют ацетилениды, уменьшает количество катализатора и соответственно способствует падению активности последнего. Это отрицательно влияет на выход продукта.

Природа катализаторов также имеет важное значение, так как, чем активнее катализатор в про-

цессе промежуточно образующий алкоголь быстрее превращается в ААС. В результате увеличивается выход спирта.

С увеличением продолжительности реакции до 10 часов ААС частично полимеризуется, кроме

этого выделение воды из молекулы спирта приводит к образованию побочных продуктов и соответственно уменьшается выход продукта.

Таблица 1

Влияние катализаторов и продолжительности реакции на выход ААС  
(температура 0 °С, растворитель ТГФ)

Катализатор	Продолжительность реакции, час	Выход ААС, %					
		I	II	III	IV	V	VI
LiOH	4	24,1	21,5	18,4	17,6	34,7	37,8
	6	37,8	33,5	28,4	26,5	39,4	51,3
	8	42,6	36,0	34,0	29,6	46,4	58,7
	10	40,3	34,4	32,7	29,1	45,5	52,0
	12	21,4	19,6	17,3	15,6	26,4	29,5
NaOH	4	29,8	27,0	25,5	22,4	39,8	48,5
	6	46,8	43,0	39,0	36,5	49,7	57,2
	8	52,4	50,5	47,3	43,2	55,8	65,2
	10	51,1	49,3	45,8	41,3	54,2	62,0
	12	29,9	26,4	21,2	17,4	31,4	36,2
KOH	4	54,4	45,5	41,9	38,6	61,2	56,2
	6	73,3	67,6	55,3	51,3	78,4	62,2
	8	81,4	72,1	65,3	57,6	85,3	70,4
	10	80,0	71,3	64,0	55,7	83,8	67,5
	12	46,7	38,3	34,6	29,7	50,1	40,5

где: I- ДМФАК; II- МЭФАК; III- МИПФАК; IV- МТБФАК; V- ФФАК; VI- ПФАК.

При продолжительности реакции до 12 часов в системе ААС невступившие исходные реагенты действием растворителя и катализатора приводит к образованию промежуточных соединений вследствие чего, наблюдается резкое уменьшение выхода продукта. В том числе образуется в растворе процессе протонирования образованного электрофильного карбкатиона, в результате в системе дегидратируясь ААС превращается содержащее в молекуле двойную и тройную связь углеводорода или простым эфирам, реакции присоединение на  $-C=O$  связи кетонов, в системе образованное ААС взаимодействия с невступившим ФА образует эфиры,

содержащие винильную группу, за счет конденсации кетонов с щелочью приводит к резкому уменьшению выхода продукта.

При ходе каталитических реакции обязательно надо учитывать среду. Наблюдается, что растворитель служит катализатором во многих реакциях. Поэтому учитывая во время синтеза увеличение скорости реакции, выход продукта и правильность подбора растворителя дает возможность для целевого направления реакции. Исходя из этого исследовали влияние растворителя на выход ААС, проводили реакции в течение 8 часов, при температуре 0°С. Исходные реагенты получили в эквимолекулярном соотношении.

Таблица 2

Влияние природы катализатора и растворителя на выход ААС

Катализатор	Растворитель	Выход ААС, %					
		I	II	III	IV	V	VI
KOH	этанол	41,3	39,0	34,2	28,7	47,3	36,2
	метанол	54,0	48,4	38,9	33,0	62,0	46,0
	ДЭЭ	74,1	66,2	62,3	54,1	78,3	65,0
	ТГФ	81,4	72,1	65,3	57,6	85,3	70,4
NaOH	метанол	37,6	31,3	26,6	20,0	43,5	29,6
	ДЭЭ	48,6	45,0	41,1	37,4	52,4	42,2
	ТГФ	52,4	50,5	47,3	43,2	55,8	48,6

Из таблицы видно, что при применении в качестве растворителя ТГФ наблюдается выхода ААС. При применении ДЭЭ относительно высокие выход ААС по сравнению с этанолом и метанолом объясняется следующим образом: использованные катализаторы образуют суспензии с этанолом и метанолом и одновременно вступая в реакцию превращаются в алкогольаты, при этом уменьшается количество катализатора, его каталитический ро

теряется, что соответственно затрудняет взаимодействие исходных реагентов между собой, в результате снижается эффективность выхода ААС.

ДЭЭ образует, с катализатором чистую суспензию не уменьшая, количества катализатора, намного увеличивает каталитическую активность, облегчает образование продукта и служит разделе-

нию образованных в смеси промежуточных, органических и неорганических веществ. Эти факторы положительно влияют на выход ААС.

Можно объяснить относительно высокий степени продукта среди растворителей, считающихся апротонными ДЭЭ и ТГФ следующим образом:

– катализаторы в ТГФ быстро и легко переходят в растворенное состояние для образования активных центров исходных веществ и создается удобная гомогенно-каталитическая среда.

– ДЭЭ и ТГФ обладают основными свойствами, в них атом кислорода содержит необобщенную электронную пару [11]. Необобщенные электронные пары этого атома кислорода в растворах распределяют в плотности ДЭЭ, а в ТГФ отрицательный заряд по кольцу будет в делокализованном положении, что в свою очередь увеличивает основность и каталитическую активность щелочей, в результате приводит к повышению выхода продукта.

– в результате исследований выявлена влияние растворителей на скорость реакции, селективность процесса и фазового столкновения (стереоселективность). Определили повышение по следующему ряду этанол <метанол <ДЭЭ <ТГФ.

Влияние молекулярного количества исходных веществ и температуры на выход ААС приведено в таблице 3.

Из таблицы видно, что, когда отличается молярное количество друг от друга исходных веществ наблюдается увеличение выхода продукта. Например, при соотношении количества ФА относительно количества кетонов или альдегида от 3 до 5 увеличивается выход спиртов максимум 9 и 12,5%. В обратном случае при подаче большого количества ФА 5 и 3 раза определили выход ААС больше примерно на 17%.

Таблица 3

Влияние молярного соотношения реагирующих компонентов и температуры на выход ААС (катализатор КОН, растворитель ТГФ, продолжительность реакции 8 час)

Температура, °C	ФА:RCOR <sup>I</sup>	Выход ААС, %					
		I	II	III	IV	V	VI
-20	1:5	42,3	38,3	34,1	31,0	47,6	35,9
	1:3	39,0	36,4	33,0	29,4	45,0	34,3
	1:1	38,4	35,0	32,0	28,7	43,5	33,6
	3:1	44,3	39,6	35,4	33,0	48,9	36,5
	5:1	46,8	42,0	38,4	36,7	50,3	37,0
0	1:5	82,3	73,8	67,4	58,4	86,2	72,3
	1:3	81,6	73,0	66,6	58,1	85,9	71,6
	1:1	81,4	72,1	65,3	57,6	85,3	70,4
	3:1	82,4	74,0	67,0	59,5	86,3	72,5
	5:1	91,3	86,0	78,5	74,3	94,3	76,0
20	1:5	37,4	33,0	30,2	25,5	43,3	32,7
	1:3	36,6	32,6	29,9	25,0	42,0	32,2
	1:1	35,9	31,1	29,7	23,3	40,1	30,4
	3:1	39,6	35,2	32,1	27,6	45,0	34,3
	5:1	42,0	39,6	35,3	32,4	49,9	38,0

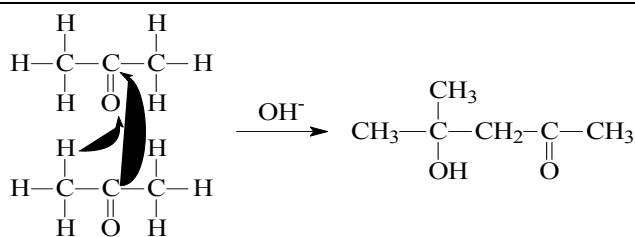
На основании результатов исследований, когда брали количество исходных веществ обратно по отношению эквимолекулярного увеличение выхода ААС можно объяснить следующим образом:

– в процессе когда больше брали ФА подвижный водород и его молекулы замешают атом металла щелочей, ускоряющий реакции присоединения, образуется в большом количестве ацетиленид металла;

– содержащий сильный положительный заряд атом металла в молекуле ацетиленида атакует кислород карбонильной группы последующими, образует алкоголяты содержащий ионную связь. Алкоголяты соединения легко гидролизующие превращаются в ААС в системе. Металлы, выделившиеся из молекулы алкоголятов, повторно образуют щелочи

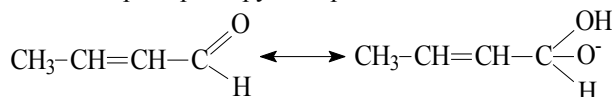
и ацетилениды. Надо отдельно отметить, что при избытке ФА каталитическая активность щелочей относительно снижается;

– при избытке кетонов относительно ФА не наблюдается резкой степени повышения выхода ААС, причиной является избыточное количество альдегида и кетонов необходимое для реакции количество ФА будет недостаточно, кроме этого они в щелочной среде частично полимеризуются и конденсируются. Кроме этого в процессе образованные ААС взаимодействуют с альдегидом и кетонами, в результате промежуточные продукты превращаются в дополнительные продукты альдолы. В качестве образца приводим пример образования 4-окси-4-метил-2-пентанон соединением двух молекул ацетона.



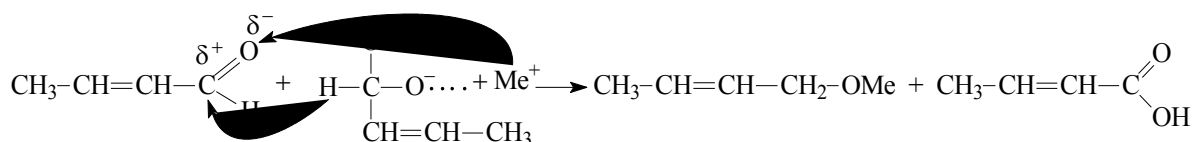
– избыточное количество кротонового альдегида при отсутствии  $\delta$ -водородного атома в молекуле под действием щелочей не подвергается процессу конденсации, но в щелочной среде реагирует

по реакции Канныцаро [12]. При этом в начальной стадии анион гидроксила щелочи присоединив молекулу кротонового альдегида, образует анион гидрата альдегида.



– анион реагирует второй молекулой альдегида и катиона металлов, его водород в состоянии гидрид водорода переходит на вторую молекулу

кротонового альдегида и при расщеплении водой образует спирт и соли кислоты;



В заключении можно сказать, что исходных веществ не в эквимольном соотношении ФА или альдегида и кетонов, при эквимольном соотношении эффективность выхода продукта растет, но наряду с этим наблюдается в свою очередь увеличение количества промежуточных и дополнительных продуктов, вследствие чего создается основа к образованию отхода реакции. Исходных веществ выход ААС относительно меньше, чем в не равном молярном количестве исходных веществ, оптимальным условием выбрали для этого процесса первый случай. В этом случае, во-первых, было

меньшее количество образованных дополнительных и промежуточных соединений, во вторых остается возможность повторного использования непрореагировавших ФА, альдегида и кетонов.

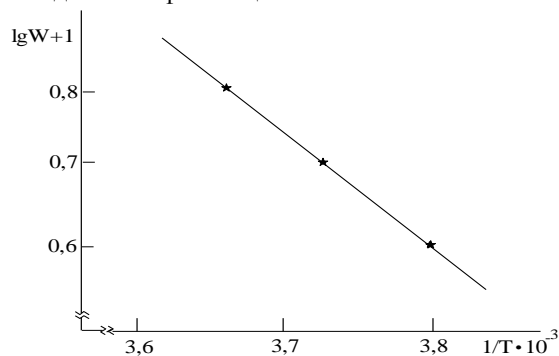
В табл. 4. приведены некоторые кинетические параметры синтеза (I) и (II) при продолжительности реакции 4 – 8 часов и температуре  $-10 \div 20^\circ\text{C}$ , на основе которых составлены зависимости  $\lg W$  от  $1/T$  (Рис. 2.) и рассчитаны энергии активации образования I (9,16 ккал/моль) и II (10,06 ккал/моль).

Таблица 4

Некоторые кинетические данные синтеза I и II (растворитель ДЭЭ, катализатор КОН)

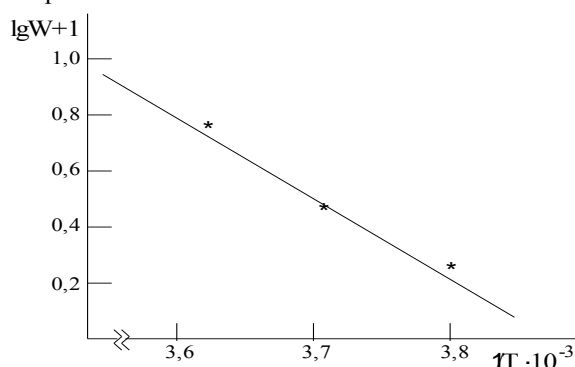
Продол- житель-	Выход продукта				Средняя скорость реакции (W)			
	I		II		I		II	
	%	моль/час	%	моль/час	%/час	моль/л.час	%/час	моль/л.час
Температура, $-10^\circ\text{C}$								
4	36,4	1,99	32,2	1,54	9,10	0,49	8,05	0,38
6	51,3	2,38	53,7	2,53	8,55	0,40	8,95	0,42
8	66,6	3,17	57,6	2,69	8,32	0,39	7,20	0,33
Температура, $0^\circ\text{C}$								
4	46,4	2,26	39,4	1,80	11,6	0,56	9,85	0,45
6	69,5	3,17	65,1	2,89	11,5	0,31	10,8	0,48
8	74,1	3,15	66,2	2,91	9,26	0,39	8,27	0,36
Температура, $10^\circ\text{C}$								
4	39,8	2,05	28,5	1,44	9,95	0,51	7,12	0,36
6	58,5	2,74	43,5	2,16	9,75	0,36	7,25	0,35
8	71,5	3,22	47,9	2,32	8,94	0,40	5,98	0,29
Температура, $20^\circ\text{C}$								
4	22,3	1,36	16,1	0,82	5,58	0,34	4,02	0,20
6	37,6	1,86	24,8	1,27	6,26	0,31	3,10	0,21
8	60,1	2,86	27,2	1,36	7,51	0,35	3,40	0,17

Значение энергии активации синтеза (I) меньше, чем (II). Это показывает, что образование последнего из фенилацетилен и метилэтилкетона



а)

протекает труднее, чем (I) из соответствующих исходных соединений. Эти данные согласуются с экспериментальными.



б)

Рис. 2. Зависимость  $\lg W$  от  $1/T$   
а) для синтеза (I), б) для синтеза (II)

Для изыскания возможных областей применения, синтезированных соединений изучена их микробиологическая активность против биокоррозии трубопроводов нефтяной промышленности в лабораторных условиях совместно с сотрудниками института микробиологии АН РУз.

Полученные фенилацетиленовые спирты и их виниловые эфиры обладают микробиологической активностью. Среди исследованных соединений фенилфенилацетиленкарбинола, диметилфенилацетиленкарбинола и метилэтилфенилацетиленкарбинола обладают активными бактерицидными свойствами в отношении бактерий *Pseudomonas stutzeri*, *Pseudomonas putida*, *Pseudomonas turcosa*, *Ps aeroginoza*, *Arthrobacter chroococcum*, *Micrococcus album*, *Micrococcus sulfurous*, *Desulfovibrio vulgaris*, *Desulfovibrio sp*; *Acinetobacter sp*; *Rhodococcus eruthropolis*, *Rhodococcus luteus*, *Rhodococcus terrae*, *Basillus sp*. выделенных из проб нефтепромысловых трубопроводов.

Применение препаратов в концентрациях 0,01 мг на 1 л элективной питательной среды, засеянной суспензий одного вида бактерий, показало, что они обладают фунгицидным действием биокоррозии

нефтепромысловых трубопроводов. Препараты могут служить основой для создания нового поколения ингибиторов микробных коррозий металлических конструкций, применяемых в нефтяной промышленности.

Известно, что химические свойства, а также реакционность молекул во многом зависят от их электронной структуры и энергетических характеристик.

Предсказание конкретной координации донорных центров гетероциклических соединений является весьма трудной и актуальной задачей органической химии. С бурным развитием методов квантово-химических расчетов молекул появилась возможность планирования экспериментальных исследований и проведения направленного синтеза органических и др. соединений [10].

Исходя из этого были исследованы вышеуказанные параметры использованных исходных ААС.

В качестве примера приведены результаты изучения геометрии и электронного строения молекул диметилфенилацетиленкарбинола полуэмпирическим квантово-химическим методом PM3 (Рис. 3– 6).

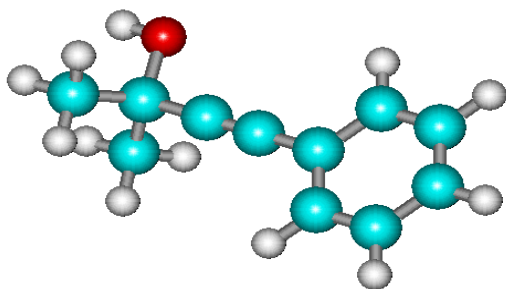


Рис. 3. 3D структура диметилфенилацетиленкарбинола

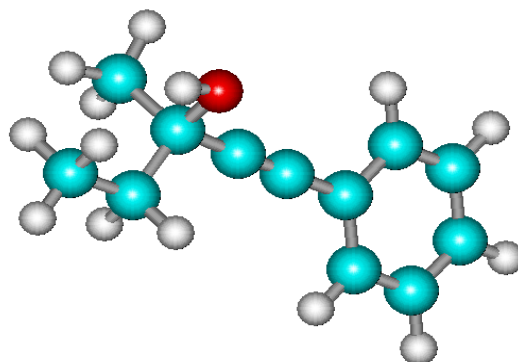


Рис. 4. 3D структура метилэтилфенилацетиленкарбинола

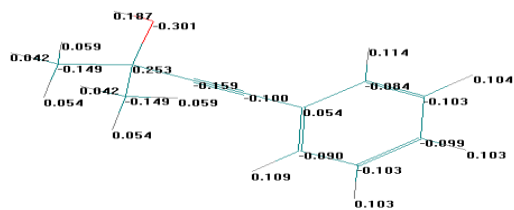


Рис. 5. Распределение зарядов на атомах молекулы диметилфенилацетиленилкарбинола

Проведены квантово-химические расчеты выбранных диметилфенил-ацетиленилкарбинола. При этом определены значения общей энергии (-41055,7 ккал/моль), энергии образования (-2549,6 ккал/моль), теплоты образования (14,96 ккал/моль), энергии электронов (-216463,0 ккал/моль), энергии ядер (175407,4 ккал/моль), дипольного момента (1,573 D) и заряда атома кислорода в изученных соединениях.

Эти данные могут быть использованы для характеристики молекул, а также определения их реакционной способности.

Таким образом, выполненные квантово-химические исследования электронной структуры и энергетических характеристик выбранных молекул позволяют определить приоритетные центры связывания ароматического соединения и показывают, что такое моделирование может быть эффективно использовано для определения активных центров молекул.

**Заключение.** Систематически исследован синтез ААС по методам Фаворского. Изучено влияние температуры, продолжительности реакции, мольного соотношения исходных реагентов, количества и природы растворителей и катализаторов. Определены оптимальные условия реакций.

На основе результатов проведенных экспериментов оптимальные условия синтеза ААС с высоким выходом при проведении процесса КОН в растворе ТГФ, при температуре 0 °С, в дополнении реакции 8 часов. Наблюдается максимум выхода ААС, что составляет I=81,4%; II=72,1%; III=65,3%; IV=57,6%; V=85,3% и VI=70,4%.

На основе изучения природы, свойств и строения исходных веществ при синтезе ААС доказана относительная эффективность, увеличиваются по следующему ряду: МТБФАК < МИПФАК < ПФАК < МЭФАК < ДМФАК < ФФАК.

Исследована микробиологическая синтезированных соединений и выявлено, что фенилфенилацетиленилкарбинола, диметилфенилацетиленилкарбинола и метилэтилфенилацетиленилкарбинола являются активными ингибиторами биокоррозии металлов и они рекомендованы для широкого исследования в промышленных условиях.

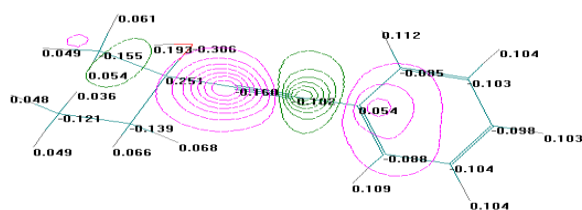


Рис. 6. Распределение электронной плотности в молекуле метилэтилфенилацетиленилкарбинола

Наработаны опытные партии диметилфенилацетиленилкарбинола и фенилфенилацетиленилкарбинола на опытной установке ОАО «Навоиазот».

Разработан технологический регламент производства фенилфенил-ацетиленилкарбинол и диметилфенилацетиленилкарбинола.

### Литература

1. Темкин О.Н. Химия ацетилена “Ацетиленовое дерево” в органической химии XXI века. // Соросовский образовательный журнал. 2001. Т.7. №6. С. 32-41.
2. Темкин О.Н. Химия ацетилена. // Соросовский образовательный журнал. 1998. №6. С. 32-41.
3. Трофимов Б.А., Гусарова Н.К. Ацетилен: Новые возможности классических реакций // Успехи химии, 2007, №6, С. 551-586.
4. Щелкунов С.А., Сиволобова А.О., Матаева С.О., Мингбаев Д.Б., Мулдахмедов З.М. Взаимодействия реактивов Гриньяра с 2-метил-4-хлорбут-3-ин-2-олом в средах, заменяющих диэтиловый эфир. // Журнал органической химии. 2001. Т.37. Вып.1. С. 17-20.
5. Белов Б.И., Козлов В.В. Условия диазотирования и свойства диазосоединений. // Успехи химии. 1963. Т. 32. № 2. С. 121-153.
6. Мавланий М.Э., Нурманов С.Э., Зиядудлаев О.Э. Синтез 1фенил-3,4-диметилпентин-1-ола-3 и его винилового эфира// Узбекский журнал нефти и газа. 2013. №2. С. 73-78.
7. Ziyadullaev O.E. Synthesis and technological of aromatic acetylenic alcohols, their vinyl ethers on the base of phenylacetylene: des. cand. chem. sc. Tashkent. 2011. pp. 213.
8. Diederich E.F., Stang P.J., Tykwinski R.R. Acetylene Chemistry. Chemistry, Biology, and Material Science. Weinheim. 2005, no. 5, pp. 156-162.
9. B.A. Trofimov. In The Chemistry of Heterocyclic Compounds. Wiley-Interscience, New York. 1992. No. 2, pp. 131-139.
10. Платэ Н.А. Основы химии и технологии мономеров: – М.: Наука: Наука/Интерпериодика, 2002. 696 с.
11. Примухамедов И.М. Органическая химия. - Ташкент. Медицина. 1990. 561 с.
12. Искандаров С.А., Садиков Б.Д. Основа теории органической химии. -Ташкент. Мехнат. 1987. 436 с.