**Исследование протекания реакций димеризации и изомеризации олеиновой кислоты с использованием методов колебательной спектроскопии в сочетании с квантово-химическим моделированием.**

***Бондаренко Д.С., Кузнецов П.С., Дементьев К.И.***

*Аспирант, 2 курс аспирантуры*

*Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

*E-mail:* bondarenko@ips.ac.ru

Димеры жирных кислот (ЖК) широко применяются в качестве присадок к топливам и смазкам, в получении полиэфиров, полиамидов, полиуретанов. В качестве катализаторов димеризации ЖК чаще всего используют бентонитовые глины –­­ обменно-модифицированный монтмориллонит, в межплоскостном пространстве, которого присутствуют кислотные центры Льюиса (ЛКЦ) и Бренстеда (БКЦ), поэтому считают, что процессы димеризации идут по катионному механизму. Однако, сложность состава получаемых продуктов димеризации и многочисленность неоднозначных интерпретаций проводимых экспериментов не позволяет иметь достоверные данные не только о механизме каталитических превращений ЖК, но даже о составе и структуре получаемых продуктов. Олеиновая кислота (ОК) наряду с линолевой кислотой (ЛК) являются основными продуктами ЖКТМ. Данная работа посвящена исследованию экспериментов по превращению олеиновой кислоты (ОК) с использованием бентонитовой глины и цеолита –­­ морденита методами колебательной спектроскопии, включая высокотемпературную ИК спектроскопию диффузного отражения in situ, в сочетании с теоретическим моделированием ОК и ЛК методами квантовой химии в приближении теории функционала плотности (DFT).

Димеризацию ОК проводили в реакторе автоклавного типа при следующих условиях: температура –­­ 250 ºС; давление –­­ 4 бар (аргон); соотношение кислоты к катализатору –­­ 4:1. Время реакции –­­ 4 часа. ИК спектры отражения регистрировали на ИК-фурье-спектрометре IFS-66 v/s Bruker с кристаллами ZnSe (30 скан., диапазон 600-4000 см-1, разрешение 2 см-1) Квантово-химические расчеты проводили методом DFT в базисе 6-31+G(d,p) при использовании программного пакета Gaussian.

Исследование превращения ОК на цеолите и использованием экспериментальных методов ИК спектроскопии в сочетании с квантово-химическим моделированием позволило установить возможность прохождения димеризации по двойной связи или изомеризации углеводородных цепей. Протекание реакций существенным образом зависит от размеров каналов цеолитов и межслойных расстояний в бентонитовых глиняных катализаторах. Показано, что в ходе превращения ОК на мордените, максимальный диаметр окон которого не превышает 12 Å, происходит исключительно процесс катионной изомеризации углеводородной цепи со сдвигом двойной связи с середины молекулы в ОК в сторону карбоксильной группы и с изменением конфигурации сдвинутой двойной связи с цис- в ОК на транс- в продуктах превращения. Превращение ОК на монтмориллоните, межслойные расстояния в котором превышает 15 Å проходит менее эффективно, но при этом вклад реакции димеризации значительно превышает вклад реакции изомеризации. В ходе исследования ИК спектров ОК и продуктов ее превращения создана и апробирована методика структурно группового анализа, позволяющая количественно определять состав продуктов превращения и микроструктуру двойных связей. Результаты, полученные при исследовании превращения ОК, являющейся одним из основных продуктов в ЖКТМ открывают возможности для более детально изучения других ЖК.

*Исследование выполнено в рамках Государственного задания ИНХС РАН*