

1. Bakulev, V., Dehaen, W.; V.S., The Chemistry of 1,2,3-Thiadiazoles. 2004, 241.

*Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ: 08-03-00376-а, 08-03-92208-ГФЕН\_а, 10-03-96084-р\_урал\_а*

## **ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ СУЛЬФИРОВАНИЯ АКРИДОНА В УСЛОВИЯХ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

*Маркович Ю.Д., Кудрявцева Т.Н., Брылёв М.И., Пелевин Н.А.*

Курский государственный технический университет

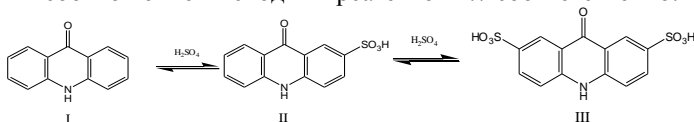
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, д. 94

kstu-oah@yandex.ru

Исследована возможность оптимизации процесса получения акридон-2-сульфоновой кислоты прямым сульфированием 9-акридонона концентрированной серной кислотой в условиях микроволнового излучения (МВИ).

Исследования влияния МВИ на скорость реакции сульфирования проводились на лабораторной микроволновой системе Mars фирмы SEM Corporation при мощности микроволнового излучения мощностью 400 Вт.

Нами был осуществлен синтез акридон-2-сульфоновой кислоты сульфированием акридона серной кислотой концентрацией 93,5±1%, с мольным соотношением исходных реагентов 1:7 соответственно.



Важно было сравнить кинетические характеристики процессов сульфирования акридонов в условиях традиционного способа нагрева и в условиях МВИ с целью выявления наиболее оптимальных условий синтеза акридон-2-сульфо кислоты. Процессы протекали при 140, 150, 160±2 °С.

Кинетические исследования проводили методом отбора проб, анализ которых осуществляли методом количественной тонкослойной хроматографии с использованием высокоэффективных пластин «Сорбфил» ПТСХ-АФ-В-УФ; в качестве элюента для ТСХ использовали предварительно разработанный состав подвижной фазы. Хроматограммы обрабатывали на видеоденситометре «Сорбфил» при длине волны 254 нм. Статистическую обработку проводили с помощью программы «Сорбфил 1.8».

По результатам обработки хроматограмм удалось рассчитывать степень накопления акридон-2-сульфоновой кислоты и построить кинетические кривые расходования акридона.

На основе построенных кинетических кривых удалось рассчитать константы скорости расходования акридона в реакции сульфирования, представленные в табл.

Таблица 1 – Кинетические параметры реакций сульфирования акридона в концентрированной серной кислоте

Температурный режим, °С	Время процесса, мин	Константа скорости, $k$ , $\times 10^{-6} \text{ c}^{-1}$	
		Традиционный способ нагрева	МВИ
140	240	111,2	115,9
150	80	234,9	381,7
160	30	388,8	680,3

Из полученных результатов видно, что реакции сульфирования акридона, проводимые в условия МВИ, протекают с большей скоростью, возможно, в следствие появления в реакционной смеси большего числа эффективных соударений реагирующих молекул.

1. Маркович Ю.Д., Пелевин Н.А., Кудрявцева Т.Н., Лоторев Д.С., Ахматдинов Р.Р. Кинетические характеристики реакции сульфирования акридона и 2-метилакридона // Известия КурскГТУ.- № 2.-2008.- С. 42-45.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

*Шафиков М.З., Ельцов О.С., Бельская Н.П.*

Уральский государственный технический университет – УПИ

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Shafikoff@gmail.com

В настоящее время квантово-химические расчеты позволяют химикам изучать и предсказывать реакционную способность веществ, не прибегая при этом к реальному проведению химических экспериментов.

Для изучения изменения нуклеофильности в ряде однотипных соединений, в которых варьируются электронные свойства заместителей, нами были проведена серия квантово-химических расчетов зарядов и энергий ВЗМО арилгидразонов, содержащих карбоксамидную, тиоамидную и амидиновую группы с помощью методов MP2 и DFT.