

В результате указанных процессов создается характерная для коньячных спиртов основа, обладающая богатым букетом и полным вкусом с тонами выдержки.

1. Одарченко В.Я. и др. Качество коньяка при выдержке.//Виноделие и виноградарство.- 2001. №2 с.16-17
2. Скурихин И.М. Химия коньячного производства. - М.: изд-во «Пищевая промышленность», 1969.

## СИНТЕЗ И ПРЕВРАЩЕНИЯ ГИДРОПЕРОКСИДОВ МЕТИЛЦИКЛОГЕКСИЛБЕНЗОЛА

*Балукова А.А., Курганова Е.А., Кратирова Д.Д.*

Ярославский государственный технический университет

При алкилировании толуола циклогексанолом образуется смесь метилциклогексилбензола, которая содержит ~ 70 % *para*- и 30 % *meta*-изомера. При автоокислении такой смеси кислородом воздуха в интервале температур 120 – 140 °С образуется смесь, содержащая до 13–15 % гидропероксидов.

Изучено взаимодействие сернокислого железа и едкого натра с гидропероксидами метилциклогексилбензола, выделены продукты: *n*-амил-*n*-толилкетон, 1-(*n*-толил)-1-циклогексанол, 1-(*n*-толил)-1-циклогексен, 5-гидроксипентил-*n*-толилкетон.

Гидропероксиды метилциклогексилбензолов разлагаются концентрированной серной кислотой с образованием *para*-, *ortho*-крезолов и циклогексанона.

Гидропероксиды *n*-метилциклогексилбензола при 140 °С разлагаются с расщеплением циклогексильного кольца до *n*-амил-*n*-толилкетона.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ФОРМЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

*Рукавишников В.В., Белик А.В.*

Челябинский государственный университет

Современное моделирование в теоретической органической химии в настоящее время перспективно, востребовано и приобрело распространенный характер. Это касается не только условий реакций, физико-химических свойств органических соединений, но и оценки их пространственного строения.

До настоящего времени молекула в пространстве представлялась, как правило, в виде совокупности атомных образований со сферической симметрией. Конкретный образ молекулы определялся межатомными расстояниями и выбранной системой оценки атомных радиусов. В част-