

дентов Казанского государственного университета 2007 года. Сборник статей. – Казань: Издательство Казанского государственного университета, 2007. - С. 85-87.

2. Галкин В.И., Мальцев Д.Б., Собанов А.А., Бахтиярова Ю.В., Горохов В.Л. Кинетика и механизм образования карбоксилатных фосфатаинов в реакции третичных фосфинов с непредельными карбоновыми кислотами // Ученые записки Казанского университета. Естественные науки. - 2006. - Т.148, №4. - С. 17-26.

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЖИДКОФАЗНОГО ОКИСЛЕНИЯ МЕТИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЦИКЛОГЕКСИЛБЕНЗОЛОВ

*Курганова Е.А., Смирнова Е.В., Кормилицына А.Л.,
Чистякова М.Н., Шуханкова Н.В.*

Ярославский государственный технический университет

Гидроперекисное окисление метильных производных циклогексилбензолов аналогично окислению кумола и лежит в основе совместного получения алкилфенолов и циклоалканона.

Определенный научный и практический интерес представляет вопрос об оценке реакционной способности метильных производных циклогексилбензолов в процессе окисления.

Скорость окисления и накопления гидропероксида для различных циклогексилбензолов не одинакова, несмотря на то, что все эти углеводороды в одинаковых условиях окисляются преимущественно по *трет*-С-Н связи. Реакционную способность изученных соединений в реакции жидкофазного окисления оценивали по отношению констант скоростей роста и обрыва цепи $k_2/\sqrt{k_6}$ - так называемого параметра окисляемости.

Установлено, что увеличение количества метильных групп в фенильном фрагменте приводит к снижению скорости окисления. В то же время кумол и цимол – структурные аналоги циклогексилбензола и циклогексилтолуола соответственно – окисляются значительно быстрее. У циклогексилкумола скорость окисления и накопления гидропероксида наибольшая. Различную реакционную способность метильных производных циклогексилбензолов между собой и по сравнению с кумолом и цимолом в реакции окисления можно объяснить различным пространственным строением этих углеводородов и их свободных радикалов.

Было установлено, что рассчитанные полуэмпирическим методом АМ1 значения потенциала ионизации (I) исходных молекулярных систем и энергии локализации (ΔH) для стадии образования радикалов

