

УДК 541.61

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ АЦИЛИРОВАНИЯ СТРУКТУР ГИДРОЛИЗНОГО ЛИГНИНА

Федоров И.В., студент гр. ХТ-31, I курс

Научный руководитель: Ефрюшин Д.Д., к.х.н.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
 г. Барнаул

Одним из перспективных направлений переработки растительного сырья является гидролиз древесной биомассы для получения этанола. В результате гидролиза образуется значительное количество побочного продукта – гидролизного технического лигнина, который можно использовать в качестве энтеросорбента, носителя лекарственных препаратов, гербицидов, пестицидов и других важных продуктов.

Для повышения эффективности действия гидролизного лигнина его можно химически модифицировать, однако это затруднено вследствие сложной сетчатой структуры, а также склонности к конденсации при повышенных температурах, поэтому важно подобрать наиболее эффективные модифицирующие системы. Одной из таких систем является ацилиевая соль уксусной кислоты, которая отлично себя зарекомендовала в качестве ацилирующей системы для получения продуктов на основе сульфатного лигнина [1].

Для теоретической проверки эффективности предполагаемой системы нами были построены наиболее вероятные химические реакции с участием димерных структур гидролизного лигнина, а также рассчитана свободная энергия Гиббса для процесса при помощи надстройки GAMESS пакета ChemOffice 2022.

В первом случае (рисунок 1) мы предположили, что в реакцию ацилирования вступят только гидроксильные группы (алифатические и фенольные). В результате мы рассчитали для данной реакции $dG = -453,79$ кДж/моль.

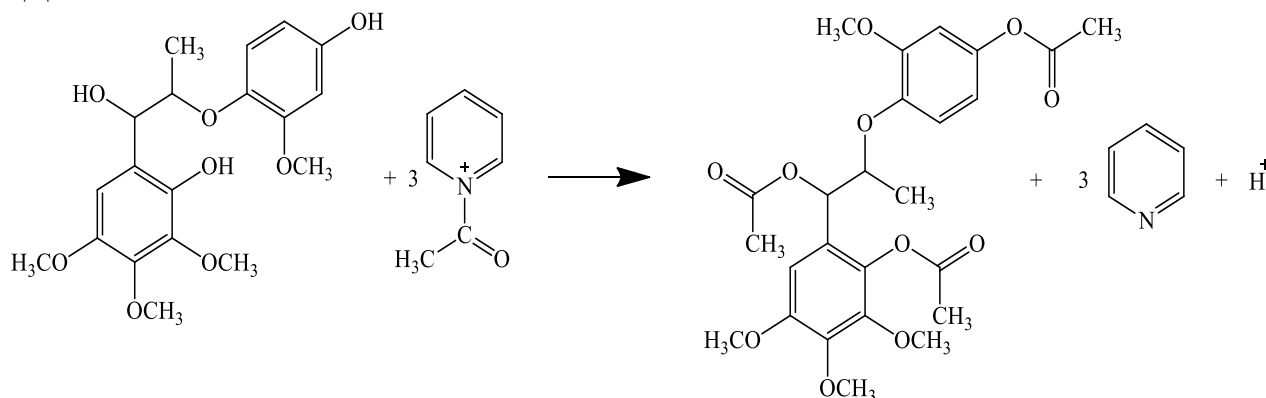


Рисунок 1. Предполагаемая схема проведения реакции ацилирования, если в процессе участвуют только OH-группы

В втором случае (рисунок 2) мы предположили, что в реакцию ацилирования вступят не только гидроксильные группы (алифатические и фенольные), но и метоксильные (произойдет деметоксилирование). В результате мы рассчитали для данной реакции $dG = -1241,59$ кДж/моль.

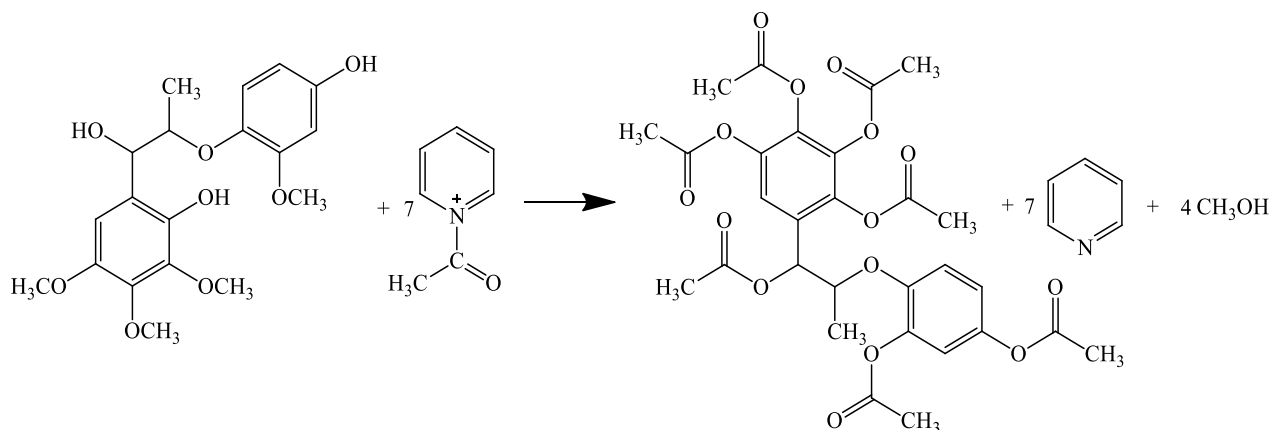


Рисунок 2. Предполагаемая схема проведения реакции ацилирования, если в процессе участвуют OH- и CH_3O - группы

Таким образом, проведя теоретический расчет свободной энергии Гиббса предполагаемых процессов, нами установлено, что обе реакции осуществимы, причем процесс, сопровождающийся реакцией деметоксилирования, является наиболее вероятным, что на практике может привести к получению высокозамещенных продуктов.

Список литературы

1. Ефрюшин, Д. Д. Компьютерное моделирование реакции ацилирования димерных структур лигнина / Д. Д. Ефрюшин, Н. О. Губко, К. С. Кебцев // Химия и химическая технология: достижения и перспективы : Материалы VI Всероссийской конференции, Кемерово, 29–30 ноября 2022 года. – Кемерово: Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, 2022. – С. 206.1-206.4. – EDN DRKDZV.