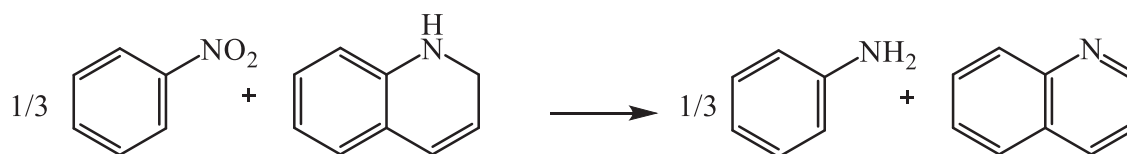


РАСЧЕТ ВЫХОДА ХИНОЛИНА С УЧЕТОМ РЕГЕНЕРАЦИИ ОКИСЛИТЕЛЯ

Синтез хинолина по Скраупу [1] относится к наиболее известным способам синтеза этого гетероциклического соединения из доступного сырья: анилина и глицерина. Механизм этой реакции, включающий нуклеофильное присоединение ароматического амина к α,β -ненасыщенному карбонильному соединению, генерируемому в этой реакции из глицерина в условиях кислотного катализа, и последующая циклизация β -ариламинозамещенного карбонильного соединения, предполагает образование промежуточного дигидрохинолина, для окисления которого в реакцию вводится ароматическое нитросоединение. Восстановление последнего приводит к соответствующему амину, поэтому для исключения образования нежелательных побочных аминов, способных вступать в конкурентную реакцию по аналогичной схеме, для окисления используют ароматическое нитросоединение, восстановление которого дает исходный амин. Так в синтезе 8-оксихинолина для окисления промежуточного продукта используют 2-нитрофенол, восстанавливающийся в 2-аминофенол, который используется в качестве исходного субстрата.

В этой связи при расчете теоретического выхода η целевого продукта в этой реакции необходимо учитывать не только молярное соотношение исходных веществ, но и возвращающийся при восстановлении нитросоединения амин.



В одном цикле реакции на a моль хинолина расходуется $1/3a$ моль нитробензола, который добавляется к исходному субстрату.

$$\eta = a + \frac{1}{3}a + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3}a + \dots + \frac{1}{3^n}a + \dots = a + \sum_{n=1}^N \frac{1}{3^n}a = \sum_{n=0}^N \frac{1}{3^n}a \quad (1)$$

Тогда выход конечного продукта по анилину, взятому в недостатке в количестве a моль должен составлять:

$$\eta_{\text{lim}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N \frac{1}{3^n}a = \frac{3}{2}a \quad (2)$$

Таким образом, при расчете теоретического выхода хинолина в синтезе Скраупа целесообразно использовать предложенную выше формулу.

Следует отметить, что стадия отгонки нитросоединения является весьма существенной, так как позволяет произвести предварительную оценку глубины протекания реакции и в значительной степени определяет чистоту целевого продукта. На последующих стадиях выделения хинолина перегонкой с водяным паром из щелочной среды, диазотирования и разложения соли диазония нитросоединение остаётся неизменным. Вследствие близости температур кипения нитробензола (210,9°C) и целевого хинолина (237,1°C) их разделение путём ректификации остаётся проблематичным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вацуро, К.В. Именные реакции в органической химии / К.В. Вацуро, Г.Л. Мищенко. – М.: Химия, 1976. – 528 с.