

## Жидкофазное гидрирование 5-нитросалициловой кислоты в присутствии палладийсодержащих катализаторов

© Магдалинова<sup>+</sup> Наталья Александровна, Балагадашова Илкнур Джейхуновна, Клюев\* Михаил Васильевич

Кафедра фундаментальной и прикладной химии. Ивановский государственный университет.

ул. Ермака, 39. г. Иваново, 153025. Ивановская область. Россия.

Тел.: +7 (4932) 37-37-03. E-mail: mn2408@mail.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** 5-нитросалициловая кислота, 5-аминосалициловая кислота, гидрирование, палладийсодержащие катализаторы, наноалмазы, активированный уголь.

### Аннотация

В работе представлены результаты исследования реакции жидкофазного каталитического гидрирования 5-нитросалициловой кислоты в присутствии палладиевых катализаторов с использованием в качестве носителей наноалмазов, активированного угля и активированного угля, функционализированного этилендиамином, в мягких условиях ( $T = 298-318$  К,  $P_{H_2} = 1$  атм, растворитель – этанол) с целью получения фарм-препарата – 5-аминосалициловой кислоты. Полученные данные сопоставлены с результатами гидрирования нитробензола, 4-нитрофенола и 3-нитробензойной кислоты. Реакция гидрирования 5-нитросалициловой кислоты протекает с более высокой скоростью в присутствии палладийсодержащих наноалмазов по сравнению с традиционным палладийсодержащим активированным углем. Вычисленные значения активационных параметров реакции указывают на более легкое протекание реакции в присутствии палладийсодержащих наноалмазов. Показано, что наиболее активным в реакции гидрирования 5-нитросалициловой кислоты оказался катализатор на основе наноалмазов с массовым содержанием палладия 3%. Скорость реакции гидрирования нитросоединений уменьшается в ряду: нитробензол > 4-нитрофенол > 3-нитробензойная кислота > 5-нитросалициловая кислота. Снижение скорости реакции гидрирования нитросоединений вызвано стерическим и сольватационным факторами, связанных с наличием полярных заместителей в бензольном кольце, влияющими на процессы адсорбции и координации субстратов на каталитически активных центрах. В молекуле 5-нитросалициловой кислоты имеет место внутримолекулярная водородная связь между атомами карбоксильной и гидроксильной группами, находящихся в *орто*-положении. С помощью квантово-химического моделирования молекулы 5-нитросалициловой кислоты и NBO-анализа (DFT/B3LYP/cc-pVTZ) получены геометрические параметры и энергия внутримолекулярной водородной связи, значения которых характеризуют ее как слабое внутримолекулярное взаимодействие.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Магдалинова Н.А., Балагадашова И.Д., Клюев М.В. Жидкофазное гидрирование 5-нитросалициловой кислоты в присутствии палладийсодержащих катализаторов. *Бутлеровские сообщения*. 2025. Т.82. №4. С.17-23. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-17

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Магдалинова Н.А., Балагадашова И.Д., Клюев М.В. Жидкофазное гидрирование 5-нитросалициловой кислоты в присутствии палладийсодержащих катализаторов. *Бутлеровские сообщения А*. 2025. Т.10. №2. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-17/ROI-jbc-RA/25-10-2-3

### The output for citing the English online version of the article:

Natalia A. Magdalinova, Ilknur D. Balagadashova, Mikhail V. Klyuev. Liquid-phase hydrogenation of 5-nitrosalicylic acid in the presence of palladium-containing catalysts. *Butlerov Communications A*. 2025. Vol.10. No.2. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/25-82-4-17/ROI-jbc-A/25-10-2-3