

Тематическое направление: Квантово-химическое изучение трансформаций триглицеридов.
Часть 2.

Элементарные акты реакции гидролиза триглицеридов и каталитическая роль интермедиатных аутентичных алифатических карбоновых кислот в формировании их метиловых эфиров в физических условиях сверхкритических флюидов

© Курдюков^{1*+} Александр Иванович, Габитова^{2*+} Асия Радифовна,
Гумеров^{2*} Фарид Мухамедович, Офицеров³ Евгений Николаевич
и Мингалиев¹ Айну́р Фанилович

¹ Центр новых информационных технологий; ² Кафедра теоретических основ теплотехники; Казанский национальный исследовательский технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: ¹⁾ (843) 231-42-30; ²⁾ 231-42-11. E-mail: ¹⁾ butlerov@mail.ru; ²⁾ gum@kstu.ru

³ Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: ofitser@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: триглицериды жирных кислот, метанол, метилацетат, триацетин, гидролиз, алифатические карбоновые кислоты, переэтерификация, метиловые эфиры жирных кислот, кислотный катализ, механизм реакции, элементарные акты, квантово-химическое моделирование, сверхкритические флюиды, метод DFT.

Аннотация

Квантово-химическим методом DFT с функционалом плотности PBE в базисе 3z (сопоставимому базисному набору cc-pVTZ) в реализации программы *Priroda 4.11* исследованы реакции переэтерификации и гидролиза триглицеридов в среде метанола при промоторном содействии аналогов жирных кислот в физических условиях сверхкритических флюидов, то есть при T = 623 К и P = 300 атм.

Показано, что в условиях сверхкритических флюидов имеет место термодинамическое равновесие разнообразных реакционных систем, реализующих элементарные акты метанолиза и гидролиза триглицеридов, в сторону накопления каталитически значимого количества жирных кислот. При этом ассоциаты карбоновая кислота – метанол (или вода) в одностадийной реакции метанолиза (или гидролиза) по алкоксикарбонильной группе аналогов триглицерида в условиях сверхкритических флюидов дают промоторный эффект, что в сочетании с наличием потенциальной ловушки, делает направления реакции с их участием основным каналом накопления целевых продуктов процесса метанолиза триглицеридов, то есть метиловых эфиров жирных кислот.

Отмечается, что в условиях высоких температур и давления имеет место необычный вид катализа, обусловленный сдвигом термодинамического равновесия разнообразных реакционных систем, реализующих элементарные акты метанолиза и гидролиза триглицеридов, в сторону накопления каталитически значимого количества жирных кислот. При переходе к обычным условиям тоже термодинамическое равновесие переводит жирные кислоты в их метиловые эфиры.