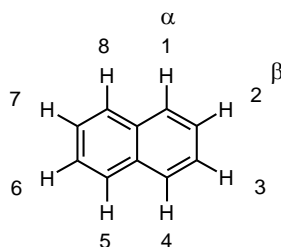


ROLA KSZTAŁTOSELEKTYWNOŚCI W KATALIZIE NA PRZYKŁADZIE SYNTEZY IZOMERÓW DIIZOPROPYLONAFTALENU

dr inż. Robert Brzozowski

Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa

W trakcie seminarium pokażę, na przykładzie syntezy diizopropylonaftalenu (DIPN), w jaki sposób może zmieniać się skład izomeryczny DIPN w zależności od różnych efektów kształtoselektywności lub też ich braku.



Synteza 2,6-DIPN wzbudza duże zainteresowanie, ze względu na możliwość wykorzystania go do produkcji wysoko jakościowych tworzyw sztucznych (np. PEN, PBN). Zastosowanie w reakcji alkilacji naftalenu zeolitów szerokoporowatych, takich jak np. Y, L, beta, mordenit, stwarza możliwość uzyskania wysokiej selektywności reakcji do 2,6-DIPN, ze względu na możliwość wystąpienia efektów przestrzennych.

W literaturze pojawiło się jednak wiele sprzecznych doniesień na ten temat. Z jednej strony, oprócz wysokiej β,β -selektywności (do 2,6-DIPN i 2,7-DIPN) opisywano wysoki stosunek molowy izomerów 2,6-DIPN do 2,7-DIPN, nawet 9/1. Z drugiej jednak strony pojawiły się doniesienia o braku kształtoselektywności prowadzącej do wysokiego stosunku izomerów 2,6-DIPN do 2,7-DIPN w reakcji prowadzonej w obecności takich samych katalizatorów i w podobnych warunkach. Zasugerowałem, że rozbieżności te wynikały z niepoprawnej analizy izomerów DIPN, a efekt kształtoselektywności, przejawiający się wysokim stosunkiem 2,6-DIPN / 2,7-DIPN dotyczył mordenitu, a nie zeolitów Y, beta czy katalizatorów mezoporowatych. Ostatnio ukazały się publikacje, w których w ogóle zanegowano możliwość takiego efektu kształtoselektywności, nawet w przypadku mordenitu. Udowodniłem jednak niezbicie, że efekt taki istnieje. W przeciwieństwie do doniesień literaturowych, udowodniłem także negatywny wpływ wody na ten rodzaj kształtoselektywności.

W oparciu o badania własne, jak i przykłady znalezione w literaturze, pokazałem inny efekt kształtoselektywności związany z wejściami do porów zeolitów (ang. *pore mouth selectivity* lub *pore entrance selectivity*) oraz pokazałem jak ważną rolę w katalizie mogą odgrywać wejścia do porów zeolitów w porównaniu z centrami kwasowymi znajdującymi się całkowicie wewnątrz porów lub na powierzchni zewnętrznej kryształów.

W pracach swoich pokazałem też, że zastosowanie w alkilacji naftalenu katalizatorów mezoporowatych, takich jak AIMCM-48, AISBA-15, GaSBA-1, AISBA-1 i FeSBA-1, które nie wykazują żadnych przeszkód przestrzennych wewnątrz porów, pozwala na otrzymanie produktu DIPN o bardzo małej zawartości 2,6-DIPN, który to izomer jest niepożądany w przypadku, gdy mieszanina DIPN ma być stosowana np. jako wysoko jakościowy rozpuszczalnik.