

Химия и технология органических веществ
Chemistry and technology of organic substances

УДК 543.544.43+544.016

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-3-203-214>

EDN VFQXIM



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Определение энтальпии испарения сложных эфиров пентаэритрита различного строения с использованием газохроматографических характеристик удерживания

Ю.Ф. Иванова, В.В. Емельянов✉, С.В. Леванова, Ю.Н. Тельнов

Самарский государственный технический университет, Самара, 443100 Россия

✉ Автор для переписки, e-mail: koraks95@mail.ru

Аннотация

Цели. Получение и хроматографический анализ сложных эфиров пентаэритрита; определение логарифмических индексов удерживания Ковача и энтальпий сорбции с помощью газовой хроматографии; оценка энтальпии испарения тетраэфиров пентаэритрита на основе линейных корреляций с энтальпиями сорбции и логарифмическими индексами удерживания.

Методы. Синтез проводили в изотермическом реакторе смешения при соотношении пентаэритрит : карбоновая кислота = 1 : 4 (мольн.), в режиме самокатализа во избежание протекания побочных превращений, имеющих место при агрессивном кислотном катализе, при $T = 393.2$ К. Анализ полученных образцов проводили с использованием программно-аппаратного комплекса «Хроматэк-Аналитик» на базе хроматографа «Кристалл-2000М», оснащенного капиллярной колонкой ($60 \text{ м} \times 0.32 \text{ мм} \times 0.5 \text{ мкм}$) с привитой неподвижной фазой ВР-1 (100% диметилполисилоксан). Условия анализа: изотермический режим; температура колонки $433.2\text{--}603.2$ К; температуры испарителя и детектора одинаковы и равны 623.2 К; деление газового потока 1 : 50; газ носитель — гелий; объем вводимой пробы — 0.15 мкл; для разбавления реакционных проб применяли метанол.

Результаты. Впервые получены значения индексов удерживания Ковача и энтальпий сорбции для 31 сложного эфира пентаэритрита различной структуры (моно-, ди-, три- и тетраформатов, 2-метилпентаноатов, 4-метилпентаноатов, 2,2-диметилбутаноатов, 2-этилбутаноатов, октаноатов, наноатов, деканоатов). Получены корреляционные уравнения, позволившие оценить энтальпию испарения для тетраэфиров пентаэритрита (для 7 соединений данные получены впервые).

Выводы. Значения параметров удерживания представляют собой линейные зависимости с высокой степенью корреляции ($R^2 > 0.99$) в исследованном температурном диапазоне ($433.2\text{--}603.2$ К). Рассчитанные энтальпии испарения в пределах погрешности корреляционных зависимостей на основе энтальпий сорбции и логарифмических индексов удерживания совпадают с литературными и прогнозируемыми по методу Quantitative Structure-Property Relationship значениями. Полученные данные могут быть использованы для проектирования узлов разделения многокомпонентных смесей и идентификации данных соединений.

Ключевые слова

сложные эфиры пентаэритрита, индексы удерживания, энтальпии испарения, этерификация, сорбция

Поступила: 31.10.2024

Доработана: 11.12.2024

Принята в печать: 08.04.2025

Для цитирования

Иванова Ю.Ф., Емельянов В.В., Леванова С.В., Тельнов Ю.Н. Определение энтальпии испарения сложных эфиров пентаэритрита различного строения с использованием газохроматографических характеристик удерживания. *Тонкие химические технологии*. 2025;20(3):203–214. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-3-203-214>

RESEARCH ARTICLE

Determination of the enthalpy of evaporation of pentaerythritol esters of various structures using gas chromatographic retention characteristics

Yulia F. Ivanova, Vladimir V. Emelyanov✉, Svetlana V. Levanova, Yuri N. Telnov

Samara State Technical University, Samara, 443100 Russia

✉ Corresponding author, e-mail: koraks95@mail.ru

Abstract

Objectives. The work set out to prepare and chromatographically analyze pentaerythritol esters, use gas chromatography to determine the Kováts logarithmic retention indices and enthalpies of sorption, and evaluate the enthalpy of evaporation of pentaerythritol tetraesters based on linear correlations with enthalpies of sorption and logarithmic retention indices.

Methods. The synthesis was carried out in an isothermal stirred reactor at $T = 393.2$ K at a molar ratio of pentaerythritol to carboxylic acid of 1 : 4 in self-catalysis mode to avoid side reactions that occur during aggressive acid catalysis. The obtained samples were analyzed using Chromatec Analytic hardware and software complex based on a Kristall-2000M chromatograph equipped with a capillary column ($60\text{ m} \times 0.32\text{ mm} \times 0.5\text{ }\mu\text{m}$) having BP-1 grafted stationary phase (100% dimethylpolysiloxane). The analysis conditions were as follows: isothermal mode; column temperature, 433.2–603.2 K; evaporator and detector temperatures, 623.2 K; gas flow split, 1 : 50; carrier gas, helium; volume of injected sample, 0.15 μL ; diluent of reaction samples, methanol.

Results. For the first time, the values of the Kováts retention indices and enthalpies of sorption were found for 31 pentaerythritol esters of various structures (mono-, di-, tri-, and tetramethanoates; 2-methylpentanoates; 4-methylpentanoates; 2,2-dimethylbutanoates; 2-ethylbutanoates; octanoates; nanoates; and decanoates). The obtained correlation equations were used to estimate the enthalpy of evaporation of pentaerythritol tetraesters (for 7 compounds, data were obtained for the first time).

Conclusions. The retention parameters were found as linear dependencies with a high degree of correlation ($R^2 > 0.99$) in the studied temperature range (433.2–603.2 K). The enthalpies of evaporation calculated based on the enthalpies of sorption and logarithmic retention indices within the limits of error of the correlation dependencies coincide with the literature data and the values predicted by the quantitative structure–property relationship method. The obtained data can be used to design units for separating multicomponent mixtures and identify these compounds.

Keywords

pentaerythritol esters, retention indices, enthalpy of evaporation, esterification, sorption

Submitted: 31.10.2024

Revised: 11.12.2024

Accepted: 08.04.2025

For citation

Ivanova Yu.F., Emelyanov V.V., Levanova S.V., Telnov Yu.N. Determination of the enthalpy of evaporation of pentaerythritol esters of various structures using gas chromatographic retention characteristics. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2025;20(3):203–214. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-3-203-214>

ВВЕДЕНИЕ

Сложные эфиры на основе пентаэритрита являются востребованными в различных областях мировой промышленности. Данный интерес продиктован, в первую очередь, возможностью варьирования химических и/или физических свойств путем введения различного числа кислотных фрагментов той или иной структуры. Это позволяет использовать их в качестве пластифицирующих композиций для полимерных продуктов, алкидных смол, смазочных материалов, неподвижных хроматографических фаз, неионогенных поверхностно-активных веществ [1–6].

Массовое применение пластификаторов ограничивается рядом требований, накладываемых техническими и экономическими нормами: необходимостью отсутствия запаха и цветности, коммерческой доступности, а также термодинамической совместимости с полимерным материалом [7]. Таким свойствам, как правило, удовлетворяют сложные эфиры пентаэритрита линейного и изо-строения со средней молекулярной массой в диапазоне 400–800 г/моль [8]. При этом наиболее существенный эффект проявляют соединения разветвленной структуры, обладающие более высокой устойчивостью к эмиссии из полимера, по сравнению с их изомерами линейной структуры.

Для создания оптимальных технологий получения сложноэфирных продуктов необходимы надежные данные по энтальпиям испарения, которые используются при проектировании реакционных узлов или узлов разделения [9]. Экспериментальное определение базируется на получении давления насыщенного пара различными методами — прямыми (эбулиометрия), косвенными (транспирация) и др. Однако при этом возникают сложности: классический эбулиометрический метод непригоден для соединений, имеющих малую термостабильность (что однозначно проявляется для разветвленных сложноэфирных структур), а при использовании метода транспирации эксперимент может оказаться чрезвычайно длительным ввиду высокой молекулярной массы сложного эфира [10–11].

В последнее время все большее значения приобретают методы моделирования, позволяющие с удовлетворительной точностью проводить экспрессную оценку энтальпии испарения исходя из надежных параметров удерживания соединений, получаемых в условиях газовой хроматографии [12].

Цель данной работы — получить и хроматографически проанализировать сложные эфиры пентаэритрита; определить индексы удерживания Ковача для ряда неизученных сложных эфиров пентаэритрита различной структуры; определить энтальпии

сорбции; оценить энтальпии испарения для тетраэфиров путем прогнозирования на основе экспериментальных корреляций.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Синтез сложных эфиров пентаэритрита

В качестве объектов исследования были использованы сложные эфиры пентаэритрита, не имеющие справочного описания по индексам удерживания в условиях газожидкостной хроматографии на основе следующих кислот: муравьиная (98%, *neoFroxx GmbH*, Германия); 2-метилпентановая (98%, *Merck*, Германия); 4-метилпентановая (99%, *Sigma-Aldrich*, США); 2,2-диметилбутановая (98%, *Acros Organics*, США); 2-этилбутановая (99%, *Acros Organics*, США); октановая (99%, *Sigma-Aldrich*, США); нонановая (99%, *Sigma-Aldrich*, США); декановая (99%, *Sigma-Aldrich*, США), получаемых по нижеизложенной схеме.

Синтезы проводили при мольном соотношении спирт : карбоновая кислота = 1 : 4 с целью получения продуктов всех степеней замещения. Оборудование эксперимента — реактор с рубашкой (*RULLAB*, Россия), соединенный с обратным холодильником. Термостатирование реактора проводилось

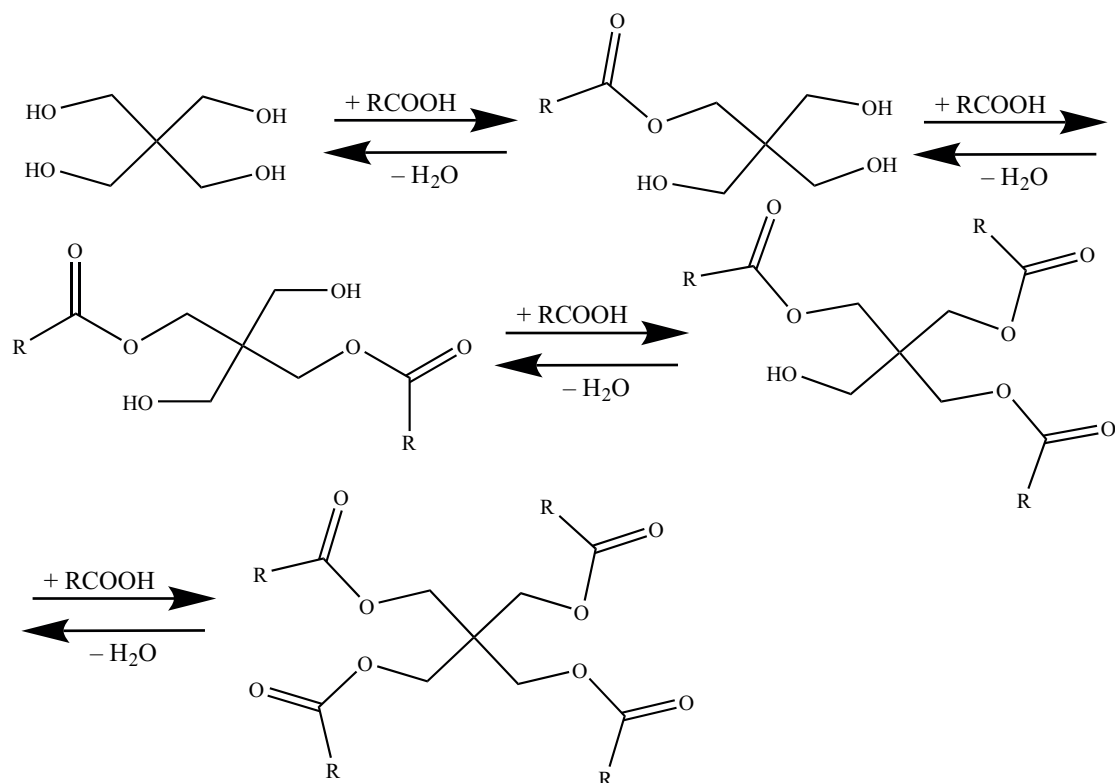


Схема. Получение сложных эфиров пентаэритрита

Scheme. Synthesis of pentaerythritol esters

за счет циркуляции полиметилсилоксана ПМС-200 (*Acros Organics*, США) с помощью циркуляционного масляного термостата (*Huber*, Германия). Температура реакции — 393 К. Процесс проводили в режиме самокатализа во избежание протекания побочных превращений, имеющих место при агрессивном кислотном катализе. Перемешивание реакционной системы производилось с использованием магнитной мешалки (*Heidolph*, Германия). Реакцию вели до появления сигналов всех 4 возможных продуктов — моноэфиров, диэфиров, триэфиров и тетраэфиров. Глубина превращения пентаэритрита проводилась в соответствии с кинетическим контролем реакции по изменению хроматографических сигналов во времени (постепенному исчерпыванию спирта и «накоплению–падению» концентраций в ряду моно-, ди-, три- и тетразамещенных продуктов).

Анализ реакционной смеси

Анализ полученных образцов проводили с использованием программно-аппаратного комплекса «Хроматэк-Аналитик» на базе хроматографа «Кристалл-2000М» (*Хроматэк*, Россия), оснащенного капиллярной колонкой (60 м × 0.32 мм × 0.5 мкм) с привитой неподвижной фазой ВР-1 (100% диметилполисилоксан, *Хроматэк*, Россия). Условия анализа: изотермический режим; температура колонки 433.2–603.2 К; температура испарителя 623.2 К; температура детектора 623.2 К; деление газового потока 1 : 50; газ носитель — гелий; объем вводимой пробы — 0.15 мкл; для разбавления реакционных проб применяли метанол (*Acros Organics*, США). Концентрационный диапазон измеряемых соединений находился на уровне 0.2–0.6 мг/мл. Фактор асимметрии хроматографических пиков был равен 1, что исключает возможность перегрузки хроматографической колонки, а также ее физическую модификацию, что могло привести к искажению значений индексов удерживания [13–14].

Определение параметров удерживания

Определение индексов удерживания и энтальпий сорбции проводили по уравнениям (1–4) [15].

$$I_x = \frac{\ln(t'_x) - \ln(t'_z)}{\ln(t'_{z+1}) - \ln(t'_z)} \cdot 100 + 100z, \quad (1)$$

$$\ln(k) = \frac{\Delta \bar{S}_{\text{сорб}}}{R} - \frac{\Delta \bar{U}_{\text{сорб}}}{RT}, \quad (2)$$

$$k = \frac{t_R - t_M}{t_M}, \quad (3)$$

$$\Delta \bar{H}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}}) = \Delta \bar{U}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}}) - RT, \quad (4)$$

где I_x — индекс удерживания исследуемого вещества; t'_x , t'_z , t'_{z+1} — приведенное время удерживания исследуемого образца x и нормальных алканов с числом атомов углерода z , а также $z+1$; $R = 8.3145$ Дж/(моль·К) — универсальная газовая постоянная; t_R — абсолютное время удерживания исследуемого вещества; t_M — мертвое время удерживания; k — фактор удерживания; $\Delta \bar{U}_{\text{сорб}}$ — изменение внутренней энергии при средней температуре эксперимента; $\Delta \bar{S}_{\text{сорб}}$ — энтропия при средней температуре эксперимента; $\Delta \bar{H}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}})$ — энтальпия сорбции при средней температуре эксперимента.

Приведение экспериментальных значений энтальпий сорбции к температуре 298.2 К выполняли с помощью уравнения (5):

$$\Delta H_{\text{сорб}}(298.2 \text{ К}) = \Delta \bar{H}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}}) + (-\Delta_{\text{ж}}^{\text{н}} C_P^{\circ})(298.2 - T_{\text{ср}}), \quad (5)$$

где $\Delta_{\text{ж}}^{\text{н}} C_P^{\circ}$ — теплоемкость фазового перехода «жидкость–пар», спрогнозированная по методу, предложенному авторами в работе [16] на основе модифицированных индексов Рандича.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Индексы удерживания

Для всех соединений в температурном интервале 433.2–603.2 К (все исследованные температурные режимы приведены в табл. 1) удалось достичь четкого разделения компонентов анализируемой пробы, за исключением монодеканоатов пентаэритрита, что, вероятно, связано со схожими значениями времен удерживания нормальных алканов.

Доверительный интервал при определении индексов удерживания определялся при 3–4 измерениях и составлял не более 0.2 ед.

Экспериментальные значения логарифмических индексов удерживания, а также их температурные зависимости приведены в табл. 1.

Одной из известных зависимостей, связывающей логарифмический индекс удерживания со структурой соединения, является корреляция относительно числа атомов углерода в кислотном фрагменте сложного эфира при наличии линейной структуры. Для этого необходимо иметь данные для определения индекса удерживания при единой температуре. В качестве такой температуры было выбрано значение 513.2 К на основе данных, полученных в работе [17], а также в связи с тем, что данная температура находится в исследуемом нами диапазоне (433.2–603.2 К), что позволяет провести удовлетворительную аппроксимацию к 513.2 К.

Таблица 1. Экспериментальные значения индексов удерживания сложных эфиров пентаэритрита

Table 1. Experimental values of retention indices of pentaerythritol esters

№	T, K / I _i				I _{513.2}	ΔI/ΔT	a*	b*	R ²
Моноэфиры Monoesters									
Метаноат Methanoate	433.2 1272.2	443.2 1279.5	453.2 1285.0	463.2 1290.4	1320.8	6.1	0.6011	1012.4	0.994
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	523.2 1912.7	533.2 1920.5	543.2 1928.3	553.2 1935.2	1905.3	7.5	0.7533	1518.8	0.999
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	523.2 1989.0	533.2 1997.0	543.2 2004.9	553.2 2014.1	1980.5	8.4	0.8323	1553.4	0.999
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	503.2 1750.6	513.2 1750.6	523.2 1750.7	533.2 1750.8	1750.6	0.1	0.0067	1747.2	0.999
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	513.2 1572.2	523.2 1576.4	533.2 1581.3	543.2 1585.3	1572.2	4.4	0.4438	1344.4	0.999
Октаноат Octanoate	573.2 2113.2	583.2 2122.1	593.2 2130.7	603.2 2139.8	2060.1	8.9	0.8848	1606.0	0.999
Наноат Nanoate	573.2 2233.0	583.2 2242.6	593.2 2252.0	603.2 2262.4	2174.4	9.8	0.9759	1673.5	0.999
Диэфиры Diesters									
Метаноат Methanoate	433.2 1452.6	443.2 1457.4	453.2 1461.7	463.2 1466.8	1490.1	4.7	0.4680	1249.9	0.999
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	513.2 2166.7	523.2 2172.9	533.2 2183.4	543.2 2188.9	2166.7	7.4	0.7720	1770.3	0.985
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	523.2 2285.4	533.2 2289.8	543.2 2293.9	553.2 2299.4	2280.6	4.7	0.4603	2044.4	0.996
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	503.2 2092.6	513.2 2102.6	523.2 2110.8	533.2 2121.6	2102.6	9.7	0.9528	1613.2	0.998
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	513.2 2067.5	523.2 2074.3	533.2 2079.7	543.2 2086.8	2067.5	6.4	0.6337	1742.4	0.997
Октаноат Octanoate	573.2 2723.4	583.2 2729.3	593.2 2735.1	603.2 2742.3	2685.7	6.3	0.6253	2364.8	0.997
Наноат Nanoate	573.2 2919.4	583.2 2925.7	593.2 2932.0	603.2 2938.2	2881.8	6.3	0.6280	2559.4	0.999
Деканоат Decanoate	—	—	593.2 3113.0	603.2 3119.7	3059.7	2.7	0.6670	2117.4	—
Триэфиры Triesters									
Метаноат Methanoate	433.2 1506.7	443.2 1509.7	453.2 1512.7	463.2 1516.2	1532.0	3.2	0.3178	1368.9	0.999
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	513.2 2491.7	523.2 2494.6	533.2 2497.1	543.2 2499.6	2491.7	2.6	0.2617	2357.5	0.999
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	523.2 2588.9	533.2 2591.0	543.2 2593.5	553.2 2595.7	2586.6	2.3	0.2292	2469.0	0.999
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	503.2 2385.7	513.2 2391.2	523.2 2396.3	533.2 2401.7	2391.2	5.3	0.5318	2118.1	0.999
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	513.2 2329.7	523.2 2332.1	533.2 2334.0	543.2 2336.4	2329.7	2.2	0.2207	2216.5	0.999
Октаноат Octanoate	573.2 3273.9	583.2 3275.0	593.2 3276.4	603.2 3277.6	3266.5	1.2	0.1236	3203.0	0.998

Таблица 1. Продолжение

Table 1. Continued

№	$T, K / I_i$				$I_{513.2}$	$\Delta I / \Delta T$	a^*	b^*	R^2
Наноат Nanoate	573.2 3555.4	583.2 3558.0	593.2 3560.6	603.2 3563.1	3540.2	2.6	0.2548	3409.4	0.999
Деканоат Decanoate	573.2 3840.3	583.2 3841.4	593.2 3842.7	603.2 3843.7	3833.4	1.1	0.1150	3774.4	0.998
Тетразэфиры Tetraesters									
Метаноат Methanoate	433.2 1537.3	443.2 1538.5	453.2 1540.3	463.2 1541.5	1548.7	1.4	0.1440	1474.8	0.995
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	513.2 2751.5	523.2 2750.8	533.2 2749.7	553.2 2747.7	2751.5	-0.9	-0.0967	2801.3	0.996
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	523.2 2881.7	533.2 2879.7	543.2 2877.5	553.2 2875.5	2883.8	-2.1	-0.2089	2991.0	0.999
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	503.2 2616.8	513.2 2619.3	523.2 2621.8	533.2 2624.6	2619.3	2.6	0.2593	2486.3	0.999
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	513.2 2650.2	523.2 2649.8	533.2 2649.4	543.2 2649.0	2650.2	-0.4	-0.0415	2671.5	0.999
Октаноат Octanoate	573.2 3737.9	583.2 3733.5	593.2 3729.8	603.2 3725.7	3761.8	-4.1	-0.4015	3967.9	0.999
Наноат Nanoate	573.2 4102.3	583.2 4098.2	593.2 4094.1	603.2 4090.0	4126.9	-4.1	-0.4072	4335.6	0.999
Деканоат Decanoate	573.2 4430.6	583.2 4426.0	593.2 4421.2	603.2 4416.5	4459.1	-4.7	-0.4729	4701.7	0.999

* Коэффициенты a и b получены из температурной зависимости логарифмических индексов удерживания $I = aT + b$, где T — температура хроматографической колонки в К.

* The coefficients a and b are derived from the temperature dependence $I = aT + b$ of the logarithmic retention indices, where T is the temperature of the chromatographic column, K.

Зависимость индексов удерживания от числа атомов углерода в кислотном фрагменте (см. рисунок) демонстрирует хорошую линейризацию ($R^2 = 0.999$), что говорит об адекватности полученных результатов.

Энтальпии сорбции и прогнозирование энтальпии испарения

Результаты расчета энтальпии сорбции приведены в табл. 2.

Анализ величин энтальпий сорбции, приведенной к температуре 298.2 К показал, что зависимость энтальпии сорбции от числа замещенных гидроксильных групп имеет линейную анаморфозу для эфиров с различным кислотным фрагментом, что свидетельствует об аддитивном вкладе метиленового фрагмента в значение энтальпии. При этом значения энтальпии сорбции для метаноатов пентаэритрита в условиях погрешности имеют схожие значения, что, вероятно, связано с отсутствием метиленового фрагмента.

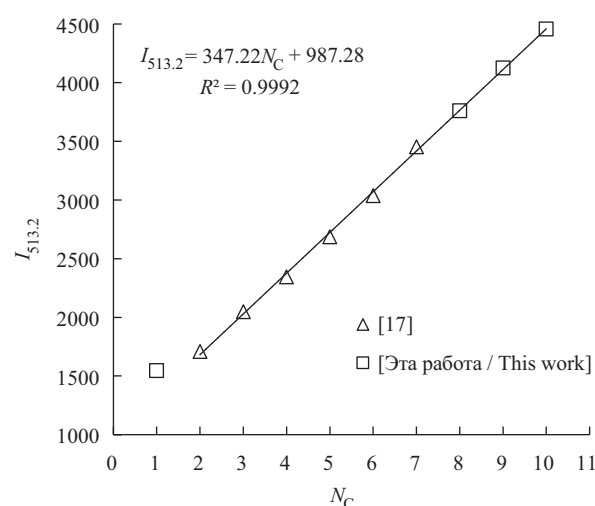


Рис. Зависимость индексов удерживания тетраэфиров пентаэритрита линейного строения при температуре 513.2 К от числа атомов углерода в кислотном фрагменте

Fig. Dependence of the retention indices of pentaerythritol tetraesters of linear structure at a temperature of 513.2 K on the number of carbon atoms in the acid fragment

Таблица 2. Экспериментальные значения энтальпий сорбции сложных эфиров пентаэритрита

Table 2. Experimental values of enthalpy of sorption of pentaerythritol esters

№	$-\Delta_{\text{ж}}^{\text{п}} C_P^{\circ}$, Дж/(моль К) $-\Delta_{\text{лиq}}^{\text{vap}} C_P^{\circ}$, J/(mol K)	$T_{\text{ср}}$, К $T_{\text{ав}}$, К	$-\Delta \bar{H}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}})$, кДж/моль $-\Delta \bar{H}_{\text{sorb}}(T_{\text{av}})$, kJ/mol	$-\Delta H_{\text{сорб}}^{\circ}(298.2)$, кДж/моль $-\Delta H_{\text{sorb}}^{\circ}(298.2)$, kJ/mol
Моноэфиры Monoesters				
Метаноат Methanoate	193.0	448.2	49.8 ± 3.9	80.8 ± 6.6
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	219.5	538.2	60.1 ± 4.9	112.8 ± 9.2
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	219.7	538.2	68.6 ± 0.4	121.4 ± 0.8
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	215.6	518.2	63.6 ± 0.2	111.0 ± 0.3
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	219.7	528.2	62.0 ± 0.7	112.5 ± 1.2
Октаноат Octanoate	236.1	588.2	76.6 ± 0.5	145.0 ± 0.9
Наноат Nanoate	243.2	588.2	79.8 ± 1.3	150.3 ± 2.6
Диэфиры Diesters				
Метаноат Methanoate	180.1	448.2	54.8 ± 2.7	81.8 ± 4.1
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	224.4	528.2	75.6 ± 1.0	127.2 ± 1.6
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	224.9	538.2	76.2 ± 0.7	130.1 ± 1.2
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	217.3	523.2	69.9 ± 0.4	118.8 ± 0.6
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	224.8	528.2	72.3 ± 0.6	124.0 ± 1.0
Октаноат Octanoate	253.3	588.2	81.8 ± 0.6	155.3 ± 1.3
Наноат Nanoate	265.9	588.2	85.7 ± 1.2	162.8 ± 2.4
Деканоат Decanoate	278.7	598.2	85.8	169.4
Триэфиры Triesters				
Метаноат Methanoate	167.2	448.2	57.5 ± 3.1	82.6 ± 4.5
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	224.7	528.2	86.2 ± 0.8	137.9 ± 1.2
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	225.4	538.2	86.0 ± 0.6	140.1 ± 1.0
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	214.3	518.2	80.6 ± 0.1	127.8 ± 0.1
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	225.2	528.2	83.9 ± 0.8	135.6 ± 1.2

Таблица 2. Продолжение

Table 2. Continued

№	$-\Delta_{\text{ж}}^{\text{п}} C_P^{\circ}$, Дж/(моль К) $-\Delta_{\text{лиж}}^{\text{вар}} C_P^{\circ}$, J/(mol K)	$T_{\text{ср}}$, К $T_{\text{ав}}$, К	$-\Delta \bar{H}_{\text{сорб}}(T_{\text{ср}})$, кДж/моль $-\Delta \bar{H}_{\text{sorb}}(T_{\text{ав}})$, kJ/mol	$-\Delta H_{\text{сорб}}^{\circ}(298.2)$, кДж/моль $-\Delta H_{\text{sorb}}^{\circ}(298.2)$, kJ/mol
Октаноат Octanoate	265.5	588.2	98.2 ± 0.9	175.2 ± 1.7
Наноат Nanoate	283.4	588.2	103.6 ± 1.1	185.8 ± 2.1
Деканоат Decanoate	301.8	598.2	103.7	194.3
Тетраэфиры Tetraesters				
Метаноат Methanoate	154.2	448.2	60.0 ± 2.9	83.1 ± 4.1
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	221.8	530.7	93.2 ± 0.7	144.7 ± 1.1
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	222.8	538.2	96.7 ± 0.7	150.2 ± 1.1
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	208.3	518.2	89.1 ± 0.1	134.9 ± 0.2
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	222.6	528.2	93.4 ± 0.6	144.6 ± 0.9
Октаноат Octanoate	274.4	588.2	112.9 ± 0.9	192.5 ± 1.6
Наноат Nanoate	297.7	588.2	120.6 ± 1.6	206.9 ± 2.9
Деканоат Decanoate	321.5	598.2	130.5 ± 1.9	227.0 ± 3.4

Общее уравнение (за исключением метаноатов), описывающее взаимосвязь индекса удерживания, приведенного к единой температуре, и энтальпии сорбции имеет вид:

$$-\Delta H_{\text{сорб}}^{\circ}(298.2) = -6.682N_i + 0.047I_{513.2} + 40.371, (R^2 = 0.965), \quad (6)$$

где N_i — число замещенных гидроксильных групп в молекуле пентаэритрита для соединения i : моноэфир ($N = 1$); диэфир ($N = 2$); триэфир ($N = 3$); тетраэфир ($N = 4$); характеристики прогнозирующей способности по полученному уравнению: максимальное отклонение — 14.3; средняя погрешность прогнозируемых значений — 4.1; стандартное отклонение погрешности — 3.9.

Определение энтальпий испарения возможно путем линейных корреляций относительно хроматографических параметров удерживания:

$$\Delta H_{\text{исп}}^{\circ}(298) = f(I_T),$$

$$\Delta H_{\text{исп}}^{\circ}(298) = f(-\Delta H_{\text{сорб}}^{\circ}(298.2)),$$

где I_T — индекс удерживания соединения при определенной температуре T , К.

Используя приведенные в литературе значения по энтальпиям испарения и энтальпиям сорбции для некоторых тетраэфиров пентаэритрита [17, 18], мы получили следующие корреляционные уравнения (7, 8):

$$\Delta H_{\text{исп}}^{\circ}(298) = 0.0367I_{513.2} + 43.387, (R^2 = 0.991), \quad (7)$$

$$\Delta H_{\text{исп}}^{\circ}(298) = -0.824\Delta H_{\text{сорб}}^{\circ}(298) + 27.055, (R^2 = 0.994). \quad (8)$$

В табл. 3 значения энтальпий испарения тетраэфиров пентаэритрита сравнили со значениями, спрогнозированными по методу Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) [19].

Полученные значения энтальпии испарения находятся на уровне, приемлемом для технических расчетов. Отклонения относительно QSPR метода и литературных данных по тетраэфирам пентаэритрита составляют 3–6%.

Таблица 3. Значения энтальпии испарения тетраэфиров пентаэритрита, полученные разными методами

Table 3. Values of the enthalpies of evaporation of pentaerythritol tetraesters, obtained by various methods

Компонент Component	$\Delta H_{\text{исп}}^{\circ}(298)$, кДж/моль $\Delta H_{\text{evap}}^{\circ}(298)$, kJ/mol			
	Полученные в работе This work		Литературные данные Literature data	Аддитивный метод QSPR [21] Additive method QSPR [21]
	(7)	(8)		
Метаноат Methanoate	100.3 ± 2.0	95.5 ± 1.6	–	102.2 ± 2.8
Этаноат Ethanoate	105.4 ± 0.8	105.0 ± 1.7	106.9 ± 1.8 [18]	106.6 ± 3.0
Пропионат Propionate	118.1 ± 0.9	117.6 ± 1.9	115.0 ± 2.1 [18]	115.7 ± 3.2
Бутаноат Butanoate	129.8 ± 1.0	129.9 ± 2.1	129.8 ± 2.3 [18]	127.4 ± 3.6
2-Метилпропаноат 2-Methylpropanoate	123.2 ± 1.0	123.7 ± 2.0	122.8 ± 2.5 [18]	121.8 ± 3.4
Пентаноат Pentanoate	142.9 ± 1.1	143.5 ± 2.4	144.2 ± 2.3 [18] 134.0 ± 1.9 [18]	141.1 ± 4.0
3-Метилбутаноат 3-Methylbutanoate	135.7 ± 1.1	135.0 ± 2.2	137.4 ± 2.4 [18]	135.7 ± 3.8
2,2-Диметилпропионат 2,2-Dimethylpropionate	125.1 ± 1.0	126.2 ± 2.1	125.2 ± 2.5 [18]	125.9 ± 3.5
Капроат Caproate	156.4 ± 1.3	155.0 ± 2.6	155.4 ± 3.0 [18]	155.1 ± 4.3
2-Метилпентаноат 2-Methylpentanoate	144.4 ± 2.8	146.2 ± 2.4	–	149.4 ± 4.2
4-Метилпентаноат 4-Methylpentanoate	149.3 ± 2.9	150.7 ± 2.5	–	150.1 ± 4.2
2,2-Диметилбутаноат 2,2-Dimethylbutanoate	139.6 ± 2.7	138.1 ± 2.3	–	139.9 ± 3.9
2-Этилбутаноат 2-Ethylbutanoate	140.7 ± 2.8	146.1 ± 2.4	–	149.9 ± 4.2
Гептаноат Heptanoate	168.5 ± 1.6	169.2 ± 2.8	168.5 ± 2.8 [18] 167.5 ± 2.3 [20]	170.3 ± 4.8
Октаноат Octanoate	181.6 ± 3.6	185.6 ± 3.1	–	186.2 ± 5.2
Наноат Nanoate	195.0 ± 3.8	197.4 ± 3.3	193.6 ± 2.0 [20]	202.4 ± 5.7
Деканоат Decanoate	207.2 ± 4.1	214.0 ± 3.5	–	219.1 ± 6.1

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально определены значения индексов удерживания Ковача и оценены энтальпии сорбции для 31 сложного эфира пентаэритрита различной структуры. Значения индексов удерживания представляют собой линейные зависимости с высокой степенью корреляции ($R^2 > 0.99$) в исследованном

температурном диапазоне (433.2–603.2 К). На основании корреляционных уравнений оценены энтальпии испарения для тетраэфиров пентаэритрита (для 7 из них данные получены впервые). Рассчитанные энтальпии испарения в пределах погрешности корреляционных уравнений совпадают с литературными и прогнозируемыми по QSPR методу значениями. Полученные данные могут быть

использованы для проектирования узлов разделения многокомпонентных смесей и идентификации данных соединений.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-00158, <https://rscf.ru/project/24-79-00158>.

Acknowledgments

The research was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 24-79-00158, <https://rscf.ru/project/24-79-00158>.

Вклад авторов

Ю.Ф. Иванова — выполнение эксперимента, обработка данных, написание статьи.

В.В. Емельянов — выполнение эксперимента, обработка данных, написание статьи.

С.В. Леванова — обработка данных, написание статьи.

Ю.Н. Тельнов — выполнение эксперимента.

Authors' contributions

Yu.F. Ivanova — experiment execution, data processing, writing the article.

V.V. Emelyanov — experiment execution, data processing, writing the article.

S.V. Levanova — data processing, writing the article.

Yu.N. Telnov — experiment execution.

Авторы заявляют об отсутствии конфликтов интересов, требующих раскрытия в данной статье.

The authors declare that they have no conflicts of interest that require disclosure in this article.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Howell B.A., Alrubayyi A., Ostrander E.A. Thermal properties of charring plasticizers from the biobased alcohols, pentaerythritol and 3,5-dihydroxybenzoic acid. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2019;138(25):2661–2668. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-08311-8>
2. Пискарев В.В., Викторова Е.А. Современные алкидные краски, их свойства, состав, использование в дизайне и спектр применения. *Вестник Казанского технологического университета.* 2014;17(17):89–91.
3. Миняева О.А., Куприянова Н.П., Григорьева У.А. Влияние добавок неионогенных ПАВ в качестве эмульгаторов на температуру плавления основы мягких лекарственных форм. *Современные проблемы науки и образования.* 2015;1(1):1978.
4. Kurganov A.A., Victorova E.P., Kanateva E.Yu. Monolithic capillary columns based on pentaerythritol acrylates for molecular-size-based separations of synthetic polymers. *J. Sep. Sci.* 2015;38(13):2223–2228. <https://doi.org/10.1002/jssc.201500211>
5. Кучеренко Е.В., Мельник Д.М., Королев А.А., Канатьева А.Ю., Пирогов А.В., Курганов А.А. Монолитные капиллярные колонки на основе тетраакрилата пентаэритрита для хроматографического анализа пептидов. *Журн. физ. химии.* 2015;89(9):1688–1692. <https://doi.org/10.7868/S0044453715090198>
6. Тонконогов Б.П., Попова К.А., Хурумова А.Ф. Перспективы применения сложных эфиров отечественного производства в качестве основ масел для авиационной техники. *Труды Российского государственного университета нефти и газа имени И.М. Губкина.* 2015;278(1):109–120.
7. Сильман А.В., Ниязбакиев И.И., Смирнова Ю.К. Бесфталатные пластификаторы. В сб.: *Современные научные исследования: проблемы и пути их решения: сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции.* СПб: Профессиональная наука; 2020. С. 59–62.
8. Wypych G. *Handbook of Plasticizers*: 2nd ed. Toronto: Chemtech Publishing; 2012. 748 p.

REFERENCES

1. Howell B.A., Alrubayyi A., Ostrander E.A. Thermal properties of charring plasticizers from the biobased alcohols, pentaerythritol and 3,5-dihydroxybenzoic acid. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2019;138(25):2661–2668. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-08311-8>
2. Piskarev V.V., Viktorova E.A. Modern alkyd paints, their properties, composition, use in design and range of applications. *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta = Herald of Kazan Technological University.* 2014;17(17):89–91 (in Russ.).
3. Minyaeva O.A., Kupriyanova N.P., Grigorieva U.A. Effect of nonionic surfactants as emulsifiers on the melting temperature of soft medicinal forms basis. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya = Modern Problems of Science and Education.* 2015;1(1):1978 (in Russ.).
4. Kurganov A.A., Victorova E.P., Kanateva E.Yu. Monolithic capillary columns based on pentaerythritol acrylates for molecular-size-based separations of synthetic polymers. *J. Sep. Sci.* 2015;38(13):2223–2228. <https://doi.org/10.1002/jssc.201500211>
5. Kucherenko E.V., Melnik D.M., Korolev A.A., et al. Monolithic Capillary Columns Based on Pentaerythritol Tetraacrylate for Peptide Analysis. *Russ. J. Phys. Chem. A.* 2015; 89(9): 1688–1692. <https://doi.org/10.7868/S0044453715090198> [Original Russian Text: Kucherenko E.V., Melnik D.M., Korolev A.A., Kanateva A.Yu., Pirogov A.V., Kurganov A.A. Monolithic Capillary Columns Based on Pentaerythritol Tetraacrylate for Peptide Analysis. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii.* 2015;89(9):1478–1483 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0044453715090198>]
6. Tonkonogov B.P., Popova K.A., Hurumova A.F. Perspective of using esters as a national production as bases of oils for the aircraft equipment. *Trudy Rossiiskogo gosudarstvennogo universiteta nefi i gaza imeni I.M. Gubkina = Proceedings of Gubkin University.* 2015;278(1):109–120 (in Russ.).
7. Silman A.V., Niyazbakiev I.I., Smirnova Yu.K. Phthalate-free plasticizers. In: *Modern Scientific Research: Problems and Solutions: A collection of materials of the International Scientific and Practical Conference.* St. Petersburg; 2020. P. 59–62 (in Russ.).

9. Рыжкин Д.А., Раева В.М. Сравнение методов расчета энтальпии парообразования бинарных азеотропных смесей. *Тонкие химические технологии*. 2024;19(4):279–292. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2024-19-4-279-292>
10. Krasnykh E.L., Druzhinina Y.A., Portnova S.V., Smirnova Y.A. Vapor pressure and enthalpy of vaporization of trimethylolpropane and carboxylic acids esters. *Fluid Phase Equilib.* 2018;462:111–117. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2018.01.018>
11. Nesterova T.N., Nazmutdinov A.G., Tsvetkov V.S., Rozhnov A.M., Roshchupkina I.Yu. Vapour pressures and enthalpies of vaporization of alkylphenols. *J. Chem. Thermodyn.* 1990;22(4):365–377. [https://doi.org/10.1016/0021-9614\(90\)90122-7](https://doi.org/10.1016/0021-9614(90)90122-7)
12. Wu E., Sinha S., Yang C., Zhang M., Acree W.E. Abraham Solvation Parameter Model: Calculation of L Solute Descriptors for Large C₁₁ to C₄₂ Methylated Alkanes from Measured Gas–Liquid Chromatographic Retention Data. *Liquids*. 2022;2(3):85–105. <https://doi.org/10.3390/liquids2030007>
13. Зенкевич И.Г., Олисов Д.А. Эффекты дискриминации состава проб при их дозировании в капиллярные газохроматографические колонки с делением потока. *Журн. анал. химии*. 2019;74(7):40–47. <https://doi.org/10.1134/S0044450219070223>
14. Зенкевич И.Г., Павловский А.А. Аномальная температурная зависимость газохроматографических индексов удерживания полярных соединений на неполярных фазах. *Журн. физ. химии*. 2016;90(5):792–799. <https://doi.org/10.7868/S0044453716040348>
15. Портнова С.В., Ямщикова Ю.Ф., Красных Е.Л. Характеристики удерживания и энтальпии сорбции сложных эфиров природных гидроксикарбоновых кислот на неподвижной фазе DB-1. *Журн. физ. химии*. 2019;93(3):577–583. <https://doi.org/10.1134/S0044453719020225>
16. Красных Е.Л., Портнова С.В. Прогнозирование изменения теплоемкости фазового перехода жидкость–пар на основе модифицированных индексов Рандича. Алканы и кислородсодержащие соединения. *Журн. структ. химии*. 2017;58(4):739–744. <https://doi.org/10.15372/JSC20170409>
17. Емельянов В.В., Красных Е.Л., Портнова С.В. Характеристики удерживания и энтальпии сорбции сложных эфиров пентаэритрита и кислот C₂–C₈ на неполярной неподвижной фазе. *Журн. физ. химии*. 2020;94(10):1567–1575. <https://doi.org/10.31857/S004445372010009X>
18. Emel'ianov V.V., Krasnykh E.L., Portnova S.V., Levanova S.V. Synthetic oils based on pentaerythritol esters. Vapor pressure and enthalpy of vaporization. *Fuel*. 2022;312:122908. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.122908>
19. Красных Е.Л., Портнова С.В. Прогнозирование энтальпий испарения на основе модифицированных индексов Рандича. Сложные эфиры. *Журн. структ. химии*. 2016;57(3):466–474. <https://doi.org/10.15372/JSC20160303>
20. Razzouk A., Mokbel I., García J., Fernandez J., Msakni N., Jose J. Vapor pressure measurements in the range 10^{–5} Pa to 1 Pa of four pentaerythritol esters. Density and vapor–liquid equilibria modeling of ester lubricants. *Fluid Phase Equilib.* 2007;260(2):248–261. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2007.07.029>
21. Wypych G. *Handbook of Plasticizers*: 2nd ed. Toronto: Chemtech Publishing; 2012. 748 p.
22. Ryzhkin D.A., Raeva V.M. Comparison of methods for calculating the enthalpy of vaporization of binary azeotropic mixtures. *Fine Chem. Technol.* 2024;19(4):279–292. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2024-19-4-279-292>
23. Krasnykh E.L., Druzhinina Y.A., Portnova S.V., Smirnova Y.A. Vapor pressure and enthalpy of vaporization of trimethylolpropane and carboxylic acids esters. *Fluid Phase Equilib.* 2018;462:111–117. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2018.01.018>
24. Nesterova T.N., Nazmutdinov A.G., Tsvetkov V.S., Rozhnov A.M., Roshchupkina I.Yu. Vapour pressures and enthalpies of vaporization of alkylphenols. *J. Chem. Thermodyn.* 1990;22(4):365–377. [https://doi.org/10.1016/0021-9614\(90\)90122-7](https://doi.org/10.1016/0021-9614(90)90122-7)
25. Wu E., Sinha S., Yang C., Zhang M., Acree W.E. Abraham Solvation Parameter Model: Calculation of L Solute Descriptors for Large C₁₁ to C₄₂ Methylated Alkanes from Measured Gas–Liquid Chromatographic Retention Data. *Liquids*. 2022;2(3):85–105. <https://doi.org/10.3390/liquids2030007>
26. Zenkevich I.G., Olisov D.A. Effects of the Discrimination of Sample Composition with the Use of Split Injection into Gas Chromatographic Capillary Columns. *J. Anal. Chem.* 2019;74(Suppl 1):32–38. <https://doi.org/10.1134/S1061934819070190>
[Original Russian Text: Zenkevich I.G., Olisov D.A. Effects of the Discrimination of Sample Composition with the Use of Split Injection into Gas Chromatographic Capillary Columns. *Zhurnal Analiticheskoi Khimii*. 2019;74(7):40–47 (in Russ.). <https://doi.org/10.1134/S0044450219070223>]
27. Zenkevich I.G., Pavlovskii A.A. Anomalous temperature dependence of gas chromatographic retention indices of polar compounds on nonpolar phases. *Russ. J. Phys. Chem. A*. 2016;90(5):1074–1080. <https://doi.org/10.1134/S0036024416040336>
[Original Russian Text: Zenkevich I.G., Pavlovskii A.A. Anomalous temperature dependence of gas chromatographic retention indices of polar compounds on nonpolar phases. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 2016;90(5):792–799 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0044453716040348>]
28. Portnova S.V., Yamshchikova Y.F., Krasnykh E.L. Retention Characteristics and Sorption Enthalpies of Esters of Natural Hydroxycarboxylic Acids on DB-1 Stationary Phase. *Russ. J. Phys. Chem. A*. 2019;93(3):577–583. <https://doi.org/10.1134/S0036024419020213>
[Original Russian Text: Portnova S.V., Yamshchikova Y.F., Krasnykh E.L. Retention Characteristics and Sorption Enthalpies of Esters of Natural Hydroxycarboxylic Acids on DB-1 Stationary Phase. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 2019;93(3):464–5470 (in Russ.). <https://doi.org/10.1134/S0044453719020225>]
29. Krasnykh E.L., Portnova S.V. Prediction of changes in the heat capacity of the liquid–vapor phase transition based on modified Randić indices. Alkanes and oxygen-containing compounds. *J. Struct. Chem.* 2017;58(4):706–711. <https://doi.org/10.1134/S0022476617040096>
[Original Russian Text: Krasnykh E.L., Portnova S.V. Prediction of changes in the heat capacity of the liquid–vapor phase transition based on modified Randić indices. Alkanes and oxygen-containing compounds. *Zhurnal Strukturnoi Khimii*. 2017;58(4):739–744 (in Russ.). <https://doi.org/10.15372/JSC20170409>]

17. Emel'yanov V.V., Krasnykh E.L., Portnova S.V. Retention indices and sorption enthalpies of pentaerythritol and C₂–C₈ acid esters on nonpolar stationary phases. *Russ. J. Phys. Chem. A*. 2020;94(10):2168–2176. <https://doi.org/10.1134/S003602442010009X>
[Original Russian Text: Emel'yanov V.V., Krasnykh E.L., Portnova S.V. Retention indices and sorption enthalpies of pentaerythritol and C₂–C₈ acid esters on nonpolar stationary phases. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*. 2020;94(10):1567–1575 (in Russ.). <https://doi.org/10.31857/S004445372010009X>]
18. Emel'yanov V.V., Krasnykh E.L., Portnova S.V., Levanova S.V. Synthetic oils based on pentaerythritol esters. Vapor pressure and enthalpy of vaporization. *Fuel*. 2022;312:122908. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.122908>
19. Krasnykh E.L., Portnova S.V. Prediction of enthalpies of vaporization based on modified Randić indices. Esters. *J. Struct. Chem.* 2016;57(3):437–445. <https://doi.org/10.1134/S0022476616030033>
[Original Russian Text: Krasnykh E.L., Portnova S.V. Prediction of enthalpies of vaporization based on modified Randić indices. Esters. *Zhurnal Strukturnoi Khimii*. 2016;57(3):466–474 (in Russ.). <https://doi.org/10.15372/JSC20160303>]
20. Razzouk A., Mokbel I., García J., Fernandez J., Msakni N., Jose J. Vapor pressure measurements in the range 10^{–5} Pa to 1 Pa of four pentaerythritol esters. Density and vapor–liquid equilibria modeling of ester lubricants. *Fluid Phase Equilib.* 2007;260(2):248–261. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2007.07.029>

Об авторах

Иванова Юлия Федоровна, аспирант, кафедра «Технология органического и нефтехимического синтеза», ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244). E-mail: vaewa.yu@yandex.ru. Scopus Author ID 59668481900, SPIN-код РИНЦ 5226-6633, <https://orcid.org/0009-0004-3508-6032>

Емельянов Владимир Владимирович, к.х.н., доцент, кафедра «Технология органического и нефтехимического синтеза», ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244). E-mail: koraks@mail.ru. Scopus Author ID 57219254675, SPIN-код РИНЦ 5802-8200, <http://orcid.org/0000-0002-6228-5713>

Леванова Светлана Васильевна, д.х.н., профессор, заслуженный деятель науки РФ, профессор, кафедра «Технология органического и нефтехимического синтеза», ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244). E-mail: kinterm@mail.ru. Scopus Author ID 6701876379, ResearcherID D-6065-2014, SPIN-код РИНЦ 4521-0265, <http://orcid.org/0000-0003-2539-8986>

Тельнов Юрий Николаевич, магистрант, ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (443100, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244). E-mail: yuriy-telnov@mail.ru. <https://orcid.org/0009-0004-0322-498X>

About the Authors

Yulia F. Ivanova, Postgraduate Student, Technology of Organic and Petrochemical Synthesis Department, Samara State Technical University (244, Molodogvardeyskaya ul., Samara, 443100, Russia). E-mail: vaewa.yu@yandex.ru. RSCI SPIN-code 5226-6633, <https://orcid.org/0009-0004-3508-6032>

Vladimir V. Emelyanov, Cand. Sci. (Chem.), Associate Professor, Technology of Organic and Petrochemical Synthesis Department, Samara State Technical University (244, Molodogvardeyskaya ul., Samara, 443100, Russia). E-mail: koraks@mail.ru. Scopus Author ID 57219254675, RSCI SPIN-code 5802-8200, <http://orcid.org/0000-0002-6228-5713>

Svetlana V. Levanova, Dr. Sci. (Chem.), Professor, Honored Scientist of the Russian Federation, Professor, Technology of Organic and Petrochemical Synthesis Department, Samara State Technical University (244, Molodogvardeyskaya ul., Samara, 443100, Russia). E-mail: kinterm@mail.ru. Scopus Author ID 6701876379, ResearcherID D-6065-2014, RSCI SPIN-code 4521-0265, <http://orcid.org/0000-0003-2539-8986>

Yuri N. Telnov, Master Student, Samara State Technical University (244, Molodogvardeyskaya ul., Samara, 443100, Russia). E-mail: yuriy-telnov@mail.ru. <https://orcid.org/0009-0004-0322-498X>