

## Streszczenie

Trotyl jest jednym z najpopularniejszych materiałów wybuchowych na świecie. Otrzymuje się go w procesie trójstopniowego nitrowania toluenu mieszaniną kwasu azotowego(V) i kwasu siarkowego(VI). Oprócz trotylu powstają także niesymetryczne trójnitrotolueny. Powstają one w wyniku nitrowania *meta*-nitrotolueny powstałego na pierwszym etapie. Obecnie usuwa się je w procesie siarczynowania. Efektem tego procesu są toksyczne i trudne w utylizacji ścieki- czerwone wody. Jako sposób rozwiązania tego problemu zaproponowano opracowanie takiej metody nitrowania toluenu, gdzie nie będą powstały niesymetryczne trójnitrotolueny lub będzie ich powstawać znacznie mniej. W celu osiągnięcia tego wybrano selektywne nitrowanie toluenu na pierwszym etapie, tak aby nie powstawał *meta*-nitrotoluen lub powstawało go znacznie mniej niż w przypadku klasycznej metody nitrowania.

W części doświadczalnej pracy przebadano różnego rodzaju środki nitrujące i badano wpływ takich czynników jak: temperatura, stężenie, stosunek molowy i czas prowadzenia reakcji. Jako najbardziej optymalny środek nitrujący zaproponowano roztwór tlenku azotu(V) w chloroformie. Przeprowadzono nitrowania toluenu do mononitrotolueny oraz mononitrotolueny do dinitrotolueny metodą ciągłą z jego udziałem. Poszukiwano najbardziej optymalnych warunków z wykorzystaniem matematycznych metod planowania eksperymentów. Na podstawie powyższych badań uzyskano parametry prowadzenia reakcji nitrowania toluenu do dinitrotolueny przy użyciu roztworu tlenku azotu(V) w chloroformie, metodą ciągłą w układzie kaskady. W kolejnym etapie pracy opracowano metodę nitrowania dinitrotolueny do trinitrotolueny z użyciem jak najmniejszej ilości kwasu siarkowego(VI) i znaleziono dla niej optymalne parametry.

Dinitrotoluen powstały w wyniku reakcji nitrowania w układzie kaskady, w optymalnych warunkach, został znitrowany do trinitrotolueny. Powstały produkt miał temperaturę topnienia 80,22 °C, podczas gdy temperatura topnienia nieoczyszczonego trotylu otrzymanego klasyczną metodą wynosi 76 °C.

Ponadto zbadano wpływ dodatku różnego rodzaju katalizatorów dla każdego etapu nitrowania. Najlepsze rezultaty dają katalizatory, których pory są zbliżone rozmiarami do cząsteczki toluenu. Przykładem tego są sita molekularne 13X. Kwasowość katalizatora

przyspiesza reakcję ale powstaje nieco więcej *meta*-nitrotoluenu. Nie znaleziono katalizatora, który pozwalał na pełną konwersję dinitrotoluenu do trinitrotoluenu.

**Słowa kluczowe:** *selektywne nitrowanie, trotyl, tlenek azotu(V), optymalizacja, matematyczne metody planowania eksperymentów*