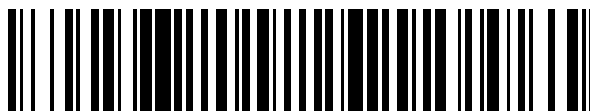


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 524 016**

51 Int. Cl.:

C07C 5/27 (2006.01)

C07C 2/70 (2006.01)

C07C 15/02 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **29.10.2003** **E 03769953 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **08.10.2014** **EP 1559701**

54 Título: **Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático**

30 Prioridad:

01.11.2002 JP 2002319608

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
03.12.2014

73 Titular/es:

MITSUBISHI GAS CHEMICAL COMPANY, INC.
(100.0%)
MITSUBISHI BUILDING, 5-2 MARUNOUCHI 2-
CHOME
CHIYODA-KU, TOKYO 100-8324, JP

72 Inventor/es:

KAWAI, TAKESHI y
INAMASA, KENJI

74 Agente/Representante:

GONZÁLEZ PALMERO, Fe

ES 2 524 016 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático

5 **Campo técnico**

La presente invención se refiere a un procedimiento para la alquilación de un compuesto aromático que tiene sustituyentes y, más específicamente, a un procedimiento mejorado para producir un compuesto alquilaromático que tiene sustituyentes en las posiciones 3 y 5, concretamente 3,5-dimetilcumeno, mediante la alquilación de un compuesto aromático que tiene dos sustituyentes en las posiciones meta con una olefina inferior tal como etileno o propileno. Tales compuestos alquilaromáticos son útiles como materiales de partida para productos farmacéuticos, productos químicos para la agricultura, cristales líquidos, pigmentos funcionales, disolventes y monómeros para plásticos técnicos.

15 **Técnica anterior**

Como método para la alquilación de un compuesto aromático, se conocen ampliamente una reacción de alquilación de Friedel-Crafts o una reacción en fase gaseosa que usa un catalizador de ácido sólido.

20 En la alquilación de un compuesto aromático, la posición (posición orto, meta o para) del anillo aromático del material de partida en el que se introduce un grupo alquilo se determina por el efecto del grupo funcional (orientación). Sin embargo, cuando el compuesto deseado no se ajusta a la orientación de sustitución inherente al grupo funcional, se obtiene un isómero de posición del compuesto deseado como producto. Por tanto, es necesario llevar a cabo una dismutación denominada reacción de isomerización o reacción de transalquilación con el fin de introducir el grupo alquilo en la posición deseada.

Por ejemplo, la alquilación de Friedel-Crafts es un método conocido del pasado, en el que se usa un catalizador de ácido de Lewis tal como cloruro de aluminio como catalizador. Con un método que usa cloruro de aluminio como agente de alquilación, la selectividad con respecto a un compuesto de monoalquilo en la reacción de alquilación es baja. Además, el método requiere etapas complicadas de separación del producto monoalquilado a partir de un producto polialquilado mediante destilación y la posterior transalquilación del compuesto de polialquilo en el compuesto de monoalquilo (documento JP-A-Sho 57-40419).

35 El documento JP-A-Hei 04-346939 da a conocer un método en el que la alquilación se lleva a cabo usando cloruro de aluminio, seguido por transalquilación usando un catalizador de ácido sólido. Este método, sin embargo, requiere retirada o separación mediante destilación del cloruro de aluminio y el HCl usado como cocatalizador antes de la transalquilación y, por tanto, es un procedimiento de múltiples etapas complicado.

40 La memoria descriptiva de la patente estadounidense n.º 5.030.777 da a conocer un procedimiento para producir 3,5-dicloroalquilbenceno en el que un diclorobenceno se somete a una reacción de alquilación que usa cloruro de aluminio como catalizador y bromuro de isopropilo como agente alquilante, seguido por isomerización y transalquilación. Este procedimiento tiene los problemas de que debe usarse un alquilo halogenado como material de partida y de que las etapas del procedimiento son complicadas.

45 El documento JP-A-01 319444 describe un método para la preparación de 3,5-diclorocumeno a partir de m-diclorobenceno en una reacción que implica $AlCl_3$ y HCl.

La reacción de alquilación de Friedel-Crafts que usa cloruro de aluminio requiere etapas complicadas tal como se describió anteriormente. Además, la cantidad del catalizador en relación con el material de partida es grande. Además, el catalizador es apropiado para inactivarse dado que el catalizador tiende a formar un complejo con diversos compuestos producidos por la reacción. Adicionalmente, con el fin de separar el producto del cloruro de aluminio tras la terminación de la reacción, es necesario tratar la mezcla de reacción con agua. Como consecuencia del tratamiento, el cloruro de aluminio se convierte en hidróxido de aluminio. Por tanto, el método tiene el defecto de que es difícil reciclar el catalizador.

55 Con respecto a la reacción de alquilación que usa otros ácidos de Lewis, la memoria descriptiva de la patente estadounidense n.º 4.943.668 da a conocer una reacción de alquilación de metaxileno que usa haluro de aluminio y yodo como catalizador y una α -olefina como agente alquilante. Sin embargo, este método tiene los defectos de que debe usarse yodo además de haluro de aluminio y de que el tiempo de reacción es de hasta 2 a 7 horas. La memoria descriptiva de la patente estadounidense n.º 4.048.248 da a conocer un método de alquilación de un compuesto aromático que usa tetrafluoruro de titanio. Con este método, la selectividad con respecto al producto deseado es del 60 al 70% y no es satisfactoria.

65 El documento JP-A-Hei 06-263656 da a conocer un método en el que se usa un catalizador que contiene tierras raras que usa un grupo sulfonilo que contiene un grupo perfluoroalquilo como contraanión. Este método es superior en comparación con un método que usa un catalizador de haluro de aluminio, puesto que el catalizador puede

reciclarse. Sin embargo, este método tiene los problemas de que el catalizador es costoso y de que la selectividad es baja debido a una reacción de polialquilación adjunta. Concretamente, el rendimiento de productos monosustituídos es de aproximadamente el 30%, el rendimiento de productos disustituídos es aproximadamente del 10 al 30% y el rendimiento de productos trisustituídos es de aproximadamente el 10%. La memoria descriptiva de la patente estadounidense n.º 4.158.677 da a conocer un ejemplo de dialquilación de un alquilbenceno usando un complejo de ácido carboxílico de BF_3 para la producción de aceites sintéticos (lubricantes). Aunque la reacción da un rendimiento del producto deseado de hasta aproximadamente el 90%, este método tiene los problemas de que se requiere un tiempo de reacción prolongado de 20 horas o más y de que el tratamiento posterior del líquido de reacción es problemático.

Tal como se describió anteriormente, cualquier reacción de alquilación convencional que usa un ácido de Lewis como catalizador tiene problemas. Además, como problema común en todos los métodos de fabricación, la reacción requiere múltiples etapas y un tratamiento posterior complicado y, por tanto, no es adecuada para la producción industrial.

En lo anterior se han descrito reacciones de alquilación que usan como catalizador un ácido de Lewis representado por cloruro de aluminio. También se conoce bien una reacción de alquilación que usa como catalizador HF que es un ácido de Brønsted. Además, se da a conocer una reacción que usa HF como catalizador de alquilación. Este método está relacionado con un procedimiento para producir gasolina que tiene un índice de octano mejorado, en el que se hacen pasar olefinas C_2 a C_{20} que contienen HF y una parafina a través de una columna que tiene un lecho fijo de un soporte inerte. A partir del objeto del mismo, el producto debe ser una mezcla de diversos compuestos. Por tanto, este método no se considera que esté relacionado con la alquilación selectiva. Por ejemplo, en el caso del trimetilpentano que es el producto principal, la proporción en peso es de aproximadamente el 70% y la selectividad es baja (memorias descriptivas de las patentes estadounidenses n.º 4.783.567 y n.º 4.891.466).

Las memorias descriptivas de las patentes estadounidenses n.º 2.766.307, n.º 2.803.682 y n.º 2.803.683 y D. A. McCaulay y A. P. Lien, J. Am. Chem. Soc., 77, 1803 (1955) dan a conocer un método para producir alquilxilenos mediante etilación o isopropilación de metaxileno. En los métodos dados a conocer en las patentes y el artículo anteriores, el sistema de catalizadores usa HF y BF_3 al mismo tiempo. Además, se usa HF en una cantidad de 10 a 20 moles por mol del compuesto aromático sustituido de material de partida, que es mucho mayor que la de la presente invención. Por tanto, se produce el problema de que la eficacia de la separación y la purificación del HF usado como catalizador y el producto deseado es baja.

Como métodos de alquilación que usan otros ácidos, pueden mencionarse la alquilación en lecho fijo que usa un catalizador de ácido sulfónico fluorado y la reacción que usa un catalizador de zeolita (documento JP-A-Hei 09-2982). Sin embargo, en el ejemplo que usa un catalizador de ácido sulfónico fluorado, la conversión del compuesto aromático de material de partida no es satisfactoria (aproximadamente del 30%). Además, el método tiene un problema con respecto a la selectividad, puesto que se producen productos alquilados y productos polialquilados ramificados. Un método dado a conocer en los documentos JP-A-2000-297049 y JP-A-2002-20325 usa catalizadores de zeolita. Aunque el método es excelente con respecto a la facilidad en la separación del producto del catalizador, se producen productos polialquilados como subproductos en una cantidad del 10% o más. Adicionalmente, el catalizador es costoso.

Descripción de la invención

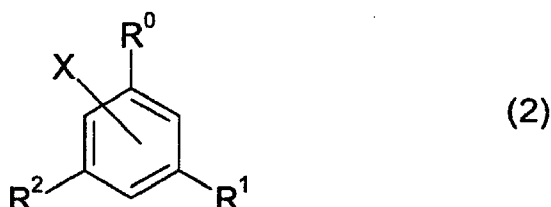
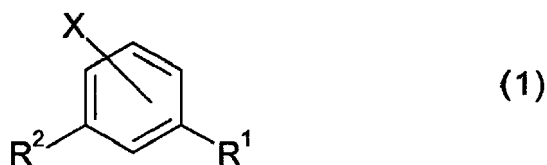
En la circunstancia anterior, un objeto de la presente invención es proporcionar un procedimiento para producir un compuesto alquilaromático que tenga sustituyentes en las posiciones 3 y 5 mediante la alquilación de un compuesto aromático que tiene dos sustituyentes en las posiciones meta, que sea de alto rendimiento y de alta selectividad con respecto al compuesto deseado, que permita la recuperación y el reciclaje del catalizador y que pueda ponerse en práctica a nivel industrial.

Los presentes inventores han realizado un estudio serio en vista de la circunstancia anterior y han encontrado que el compuesto alquilaromático deseado que tiene sustituyentes en las posiciones 3 y 5 puede obtenerse de manera estable con alto rendimiento y alta selectividad en condiciones de reacción suaves y sencillas mediante la alquilación de un compuesto aromático que tiene dos sustituyentes en las posiciones meta con una olefina que tiene de 2 a 4 átomos de carbono en presencia de un catalizador de Brønsted tal como HF, seguido por adición de un ácido de Lewis tal como BF_3 y permitiendo que se realice una isomerización intramolecular. La presente invención se ha completado mediante el hallazgo anterior.

Por tanto, la presente invención proporciona el siguiente procedimiento para producir un compuesto alquilaromático.

1. Un procedimiento para producir un compuesto alquilaromático representado por la fórmula general (2), caracterizado porque se alquila un compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Brønsted y sin la presencia de un ácido de Lewis, y porque se añade posteriormente la mezcla resultante con un ácido de Lewis y se somete a isomerización en presencia conjunta del ácido de Brønsted y el ácido de Lewis, en el que la temperatura a la que se realiza la reacción del compuesto aromático representado

por la fórmula general (1) con propileno es no superior a 20°C pero no inferior a -20°C, en el que el ácido de Broensted es HF y el ácido de Lewis es BF₃;



en las que R¹ y R² son cada uno un grupo metilo y X es un átomo de hidrógeno en las fórmulas generales (1) y (2) y en las que R⁰ es un grupo isopropilo en la fórmula general (2).

2. El procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según el punto 1 anterior, en el que la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza con una razón molar del ácido de Broensted con respecto al compuesto aromático que es de 1 o más.

3. El procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según el punto 2 anterior, en el que la razón molar del ácido de Broensted con respecto al compuesto aromático es de 2 a 5.

4. El procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según uno cualquiera de los puntos 1 a 3 anteriores, en el que la isomerización en presencia conjunta del ácido de Lewis y el ácido de Broensted tras la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza con una razón molar del ácido de Lewis con respecto al compuesto aromático representado por la fórmula general (1) que es de 0,5 o más.

5. El procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según uno cualquiera de los puntos 1 a 4 anteriores, en el que la isomerización en presencia conjunta del ácido de Lewis y el ácido de Broensted tras la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza a una temperatura inferior a 50°C pero no inferior a -30°C.

6. El procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según uno cualquiera de los puntos 1 a 5 anteriores, en el que se incluye propileno en una cantidad de 0,5 a 1 mol por mol del compuesto aromático.

Mejor modo de llevar a cabo la invención

La presente invención se describirá en detalle a continuación. En la presente invención, se hace reaccionar en primer lugar el compuesto aromático representado por la fórmula general (1) anterior con propileno y que sirve como agente alquilante en presencia de un ácido de Broensted tal como HF para formar un compuesto aromático alquilado.

Se prefiere que se use propileno en una cantidad de 0,5 a 1 mol por mol del compuesto aromático representado por la fórmula (1). El uso de propileno en una cantidad de 0,5 a 1 mol es ventajoso a nivel industrial dado que la selectividad basada en la olefina es buena.

El ácido de Broensted usado en la reacción de alquilación es HF por motivos de fuerte acidez, facilidad en la recuperación y la separación, y homogeneidad del complejo del mismo con un ácido de Lewis. Un ácido de Lewis que forma un complejo con HF dificulta la reacción de alquilación y, por tanto, no debe usarse en la fase de alquilación. La cantidad de HF debe ser de al menos 1 mol, preferiblemente de 2 a 5 moles, por mol del compuesto aromático sustituido de material de partida.

La alquilación de la presente invención se caracteriza por llevarse a cabo usando sólo ácido de Broensted y difiere del método convencional en el que la alquilación se realiza usando, como catalizador, una combinación de un ácido de Lewis tal como un catalizador de Friedel-Crafts con un ácido de Broensted o usando un ácido de Lewis por sí mismo. Tal como se describió anteriormente, no es deseable la coexistencia de un ácido de Lewis tal como BF₃ en la fase de alquilación, dado que se impide que se realice la alquilación.

La temperatura de alquilación es no superior a 20°C pero no inferior a -20°C. Una temperatura de alquilación por

debajo de 50°C puede impedir que se realice la polialquilación y puede aumentar la selectividad del producto monoalquilado deseado. Aunque la temperatura por debajo de -30°C no provoca problemas, no es necesario realizar un enfriado en exceso. Durante el transcurso de la alquilación, la temperatura aumenta temporalmente de vez en cuando debido a la exotermia. Si la temperatura se disminuye rápidamente mediante enfriamiento, se permite tal aumento de temperatura temporal más allá del intervalo de temperatura anterior.

En la etapa de alquilación anterior, la alquilación se produce selectivamente en una posición específica de la posición orto, meta o para dependiendo del efecto del grupo funcional (orientación) sobre el anillo aromático. Por ejemplo, la alquilación de metaxileno con propileno en presencia de un catalizador de HF da principalmente 2,4-dimetilcumeno.

A continuación, al mismo recipiente de reacción, se alimenta BF_3 como ácido de Lewis de manera que se produce una reacción de isomerización para obtener el compuesto representado por la fórmula general (2) como resultado de la transalquilación intramolecular (isomerización). La isomerización intramolecular tiene lugar cuando el ácido de Broensted y el ácido de Lewis forman un complejo con el compuesto aromático alquilado. El producto principal es un isómero de posición que es más estable como complejo. Dicho de otro modo, el producto principal es un compuesto alquilaromático que tiene una basicidad aumentada. Por tanto, se obtiene el producto final que tiene una composición diferente de la composición termodinámicamente en equilibrio. Por ejemplo, 2,4-dimetilcumeno producido mediante la alquilación de metaxileno con propileno en presencia de un catalizador de HF experimenta una reacción de isomerización en presencia conjunta de HF y BF_3 para dar 3,5-dimetilcumeno. La reacción anterior, tal como la alquilación de metaxileno con propileno que da como resultado la formación de 3,5-dimetilcumeno, apenas se realiza cuando el catalizador usado en la reacción de isomerización es HF solo o BF_3 solo, o cuando HF y BF_3 coexisten desde el comienzo de la fase de alquilación inicial.

La cantidad de BF_3 es preferiblemente de al menos 0,5 moles por mol del compuesto aromático de partida. La temperatura de reacción puede ser la misma que en la reacción de alquilación y en general es inferior a 50°C pero no inferior a -30°C, preferiblemente no superior a 20°C pero no inferior a -20°C.

Los catalizadores HF y BF_3 usados en la presente invención pueden separarse, recuperarse y reciclarse y no se encuentran con el problema de eliminación de catalizadores de desecho que ha implicado convencionalmente el cloruro de aluminio. Concretamente, HF y BF_3 tras la reacción pueden separarse y recuperarse fácilmente poniéndolos en contacto térmico con hidrocarburos recirculantes en una columna de destilación y pueden reciclarse en el sistema de reacción. Puesto que la temperatura de reacción es tan baja en la presente invención, no se produce corrosión de los aparatos. Además, puesto que el HF y el BF_3 usados en la presente invención tienen alta selectividad de posición, la separación y la purificación del producto deseado no requieren una etapa de separación por destilación y son más fáciles en comparación con el producto de reacción obtenido usando un ácido sólido u otros ácidos de Lewis. Por consiguiente, el procedimiento de la presente invención es un procedimiento industrial económicamente excelente.

En la presente invención, puesto que se usa un ácido de Broensted en la reacción de alquilación y se usa un ácido de Lewis en la reacción de isomerización, y, en particular, puesto que se usa HF como ácido de Broensted y se usa BF_3 como ácido de Lewis, cada una de las reacciones puede llevarse a cabo de una manera adecuada. El método anterior difiere bastante de la alquilación convencional mediante una reacción de Friedel-Crafts o un método mejorado de la misma.

Es decir, el procedimiento de la presente invención se caracteriza por el uso de sólo ácido de Broensted para llevar a cabo una etapa que corresponde a la alquilación en el método convencional y por la formación de un complejo de ácido de Broensted-ácido de Lewis, tal como HF- BF_3 , para llevar a cabo una etapa que corresponde a una reacción de isomerización. Concretamente, se retarda el punto en el tiempo en el que se añade un ácido de Lewis tal como BF_3 . Por tanto, se permite que la alquilación que usa el ácido de Broensted, tal como HF, y la isomerización que usa el complejo de ácido de Broensted-ácido de Lewis, tal como HF- BF_3 , se realicen como si ambas reacciones fueran una sola reacción. Además, las reacciones pueden realizarse en "un solo recipiente" sin retirar el catalizador o aislar el producto mediante destilación a la mitad de la reacción.

Tal como se describió en lo anterior, el procedimiento de la presente invención es excelente en los resultados de la reacción en comparación con el método convencional y tiene varias ventajas en las etapas del procedimiento y, por tanto, es claramente distinto del método convencional.

La presente invención se describirá en más detalle a continuación a modo de ejemplos.

En los ejemplos, los resultados de reacción (rendimiento y selectividad) son valores partiendo de la base de propileno a menos que se indique específicamente otra cosa.

Ejemplo 1

En un autoclave Hastelloy C que tenía un volumen interior de 300 ml y estaba equipado con un agitador

electromagnético, una placa deflector, una abertura de soplado de gas y una abertura de alimentación de líquido, se cargaron 20 g (0,19 mol) de metaxileno, a lo que se alimentaron lentamente 18,8 g (0,94 mol) de HF anhidro desde la abertura de alimentación de líquido a presión. Se enfrió el contenido hasta -10°C. A continuación, se alimentaron gradualmente 7,9 g (0,19 mol) de propileno al autoclave desde la abertura de soplado de gas. Tras la finalización de la alimentación, se comenzó agitación y se continuó durante 30 minutos. Entonces se detuvo la agitación y se introdujeron gradualmente 25,5 g (0,38 mol) de BF₃ en el autoclave desde la abertura de soplado de gas. La temperatura antes de la alimentación de BF₃ era de -15°C. Tras la finalización de la alimentación de BF₃, se comenzó de nuevo la agitación y se continuó durante 30 minutos. Entonces, se terminó la reacción. Después de eso, se vertió la mezcla de reacción en agua helada. Se llevó a cabo la extracción usando 80 g de tolueno y se separó la fase orgánica. Se extrajo de nuevo la fase acuosa con 50 g de tolueno. Se combinaron las dos fases orgánicas y se lavaron con una disolución de hidrogenocarbonato de sodio acuosa y luego con agua purificada. Se analizó el producto mediante cromatografía de gases. El rendimiento de 3,5-dimetilcumeno era del 64% y la selectividad era del 92%.

Ejemplo 2

Se llevó a cabo una reacción usando un autoclave Hastelloy C que tenía un volumen interior de 6.000 ml y estaba equipado con un agitador electromagnético, una placa deflector, una abertura de soplado de gas y una abertura de alimentación de líquido de la misma manera que en el ejemplo 1. Para la reacción, se usaron 2.003 g (18,9 mol) de metaxileno, 943 g (47,1 mol) de HF anhidro y 715 g (17,0 mol) de propileno. Una vez terminada la reacción, se alimentó la mezcla de reacción a una velocidad de 300 ml por hora junto con 600 g por hora de benceno a una columna de destilación (presión interna de la columna: 0,38 MPa, 122°C) en la que se hizo recircular benceno. Se separó una disolución en benceno de 3,5-dimetilcumeno y se recogió del fondo de la columna, mientras se descargaba BF₃ de la parte superior y HF de una abertura de descarga bajo el condensador. Se condensó la disolución en benceno de 3,5-dimetilcumeno obtenida del fondo de la columna usando un evaporador y luego se destiló (presión interna de la columna: 0,0133 MPa, número de plato: 12, razón de reflujo: 10) para obtener 1.925 g de 3,5-dimetilcumeno deseado (temperatura de destilación: 129°C). La pureza era del 99,2% y el rendimiento de aislamiento era del 76%.

Ejemplo 3

Se llevó a cabo la reacción del ejemplo 2 de la misma manera. Después, se alimentó la mezcla de reacción a una velocidad de 300 ml por hora junto con 600 g por hora de benceno a una columna de destilación (presión interna de la columna: 0,49 MPa, 136°C) en la que se hizo recircular benceno. Se separó una disolución en benceno de 3,5-dimetilcumeno y se recogió del fondo de la columna, mientras se descargaba BF₃ de la parte superior y HF de una abertura de descarga bajo el condensador. Se condensó la disolución en benceno de 3,5-dimetilcumeno obtenida del fondo de la columna usando un evaporador y luego se destiló de la misma manera que en el ejemplo 2 para obtener 1.911 g de 3,5-dimetilcumeno deseado. La pureza era del 99,0% y el rendimiento de aislamiento era del 76%.

Ejemplo 4

Se llevó a cabo la reacción del ejemplo 2 de la misma manera. Después, se alimentó la mezcla de reacción a una velocidad de 140 ml por hora junto con 430 g por hora de hexano a una columna de destilación (presión interna de la columna: 0,38 MPa, 110°C) en la que se hizo recircular hexano. Se separó una disolución en hexano de 3,5-dimetilcumeno y se recogió del fondo de la columna, mientras se descargaba BF₃ de la parte superior y HF de una abertura de descarga bajo el condensador. Se condensó la disolución en hexano de 3,5-dimetilcumeno obtenida del fondo de la columna usando un evaporador y luego se destiló de la misma manera que en el ejemplo 2 para obtener 1.872 g de 3,5-dimetilcumeno deseado. La pureza era del 98,7% y el rendimiento de aislamiento era del 74%.

Ejemplo 5

Se repitió el ejemplo 1 de la misma manera descrita excepto que la cantidad de alimentación de propileno era de 4,0 g (0,09 mol). Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 74% y la selectividad era del 91%. Se aprecia que se mejora el rendimiento usando propileno en una cantidad de 0,5 moles por mol de metaxileno en comparación con el rendimiento (del 64%) obtenido usando propileno en una cantidad de 1 mol por mol de metaxileno.

Ejemplo 6

Se repitió el ejemplo 1 de la misma manera descrita excepto que la cantidad de HF era de 9,4 g (0,47 mol) y la cantidad de BF₃ era de 12,8 g (0,19 mol). Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 70% y la selectividad era del 94%. Se aprecia que se mejora la selectividad usando HF y BF₃ en cantidades de 2,5 moles y 1 mol, respectivamente, por mol de metaxileno en comparación con la selectividad (del 92%) obtenida usando HF y BF₃ en cantidades de 5 moles y 2 moles, respectivamente, por mol de metaxileno.

Ejemplo comparativo 1

Se repitió el ejemplo 1 de la misma manera descrita excepto que se añadió BF_3 antes de la alimentación de propileno. Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 9% y la selectividad era del 99%. Se aprecia que, cuando se añade BF_3 en la fase de reacción de alquilación, el rendimiento es considerablemente bajo, aunque la selectividad es alta.

Ejemplos comparativos 2 a 7

Se repitió el ejemplo comparativo 1 de la misma manera descrita excepto que se cambiaron las cantidades de HF y propileno (razones molares en relación con metaxileno). En la tabla 1 se muestran el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno y la selectividad.

Se observa que, cuando se añade BF_3 en la fase de reacción de alquilación, no se obtienen buenos resultados incluyendo el rendimiento y la selectividad incluso cuando se cambian las cantidades de HF y propileno.

Tabla 1

	Razón molar empleada		Resultados de reacción	
	HF/metaxileno	Propileno/metaxileno	Rendimiento (%)	Selectividad (%)
Ejemplo comparativo 2	5	0,6	4	58
Ejemplo comparativo 3	6	4	45	68
Ejemplo comparativo 4	10	4	46	76
Ejemplo comparativo 5	5	11	0	0
Ejemplo comparativo 6	5	4	19	47
Ejemplo comparativo 7	20	4	48	50

Ejemplo comparativo 8

Se repitió el ejemplo 1 de la misma manera descrita excepto que no se añadió BF_3 en absoluto. Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 7% y la selectividad era del 13% y el rendimiento de 2,4-dimetilcumeno era del 27%. Se aprecia que, cuando no se añade BF_3 , no se realiza la isomerización.

Ejemplo comparativo 9

Se repitió el ejemplo comparativo 8 de la misma manera descrita excepto que se usaron HF y propileno en cantidades de 60 g (3,0 mol) y 32 g (0,75 mol), respectivamente. Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 0,2% y la selectividad era del 0,2% y que el rendimiento de 2,4-dimetilcumeno era del 0,5% y el rendimiento de diisopropilmetaxileno era del 70%. Se aprecia que, cuando aumentan las cantidades de HF y propileno sin usar BF_3 , aumenta considerablemente el rendimiento del producto disustituido y apenas se obtiene el producto deseado.

Ejemplo comparativo 10

Se repitió el ejemplo comparativo 1 de la misma manera descrita excepto que, tras el HF, se habían añadido BF_3 y propileno en su totalidad, se realizó la reacción durante 6 horas. Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 1,1% y la selectividad era del 27%. El rendimiento de 2,4-dimetilcumeno era del 0% y el rendimiento de diisopropilmetaxileno era del 0,1%. A partir del hecho de que apenas se obtienen los productos alquilados incluso cuando se aumenta el tiempo de reacción, se observa que no se realiza la reacción de alquilación en presencia de BF_3 , sino que más bien se forma un complejo de metaxileno/HF/ BF_3 estable.

Ejemplo comparativo 11

Se repitió el ejemplo 1 de la misma manera descrita excepto que no se añadió HF en absoluto y que se cambió la cantidad de BF_3 a 19,2 g (0,28 mol) y se cambió el tiempo de reacción a 30 minutos dado que no se añadió HF. Se analizó el producto obtenido mediante cromatografía de gases para revelar que el rendimiento de 3,5-dimetilcumeno deseado era del 0,9% y la selectividad era del 2,4%. Se aprecia que cuando no se añade HF, no se realiza la reacción de alquilación.

Aplicabilidad industrial

Según el procedimiento de la presente invención, en la producción de 3,5-dimetilcumeno y que implica en general

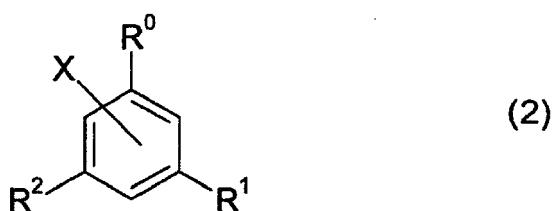
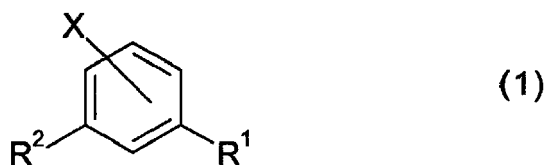
una dificultad en la introducción en el núcleo aromático, el compuesto alquilaromático deseado puede producirse con alto rendimiento y alta selectividad en condiciones de reacción suaves y sencillas a partir de un compuesto aromático de material de partida.

5 Los compuestos alquilaromáticos producidos mediante el procedimiento de la presente invención son útiles como productos intermedios para productos químicos funcionales para su uso en materiales farmacéuticos, para la agricultura y electrónicos.

10 Con el método de la presente invención, el catalizador usado puede recuperarse y reciclarse. Por tanto, pueden obtenerse económicamente compuestos alquilaromáticos deseados de una manera ventajosa a nivel industrial mientras que se reduce la carga sobre el medio ambiente.

REIVINDICACIONES

1. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático representado por la fórmula general (2), caracterizado porque se alquila un compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted y sin la presencia de un ácido de Lewis, y porque se añade posteriormente la mezcla resultante con un ácido de Lewis y se somete a isomerización en presencia conjunta del ácido de Broensted y el ácido de Lewis, en el que la temperatura a la que se realiza la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno es no superior a 20°C pero no inferior a -20°C, en el que el ácido de Broensted es HF y el ácido de Lewis es BF₃;



- en las que R¹ y R² son cada uno un grupo metilo y X es un átomo de hidrógeno en las fórmulas generales (1) y (2) y en las que R⁰ es un grupo isopropilo en la fórmula general (2).
2. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según la reivindicación 1, en el que la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza con una razón molar del ácido de Broensted con respecto al compuesto aromático que es de 1 o más.
3. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según la reivindicación 2, en el que la razón molar del ácido de Broensted con respecto al compuesto aromático es de 2 a 5.
4. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, en el que la isomerización en presencia conjunta del ácido de Lewis y el ácido de Broensted tras la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza con una razón molar del ácido de Lewis con respecto al compuesto aromático representado por la fórmula general (1) que es de 0,5 o más.
5. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4, en el que la isomerización en presencia conjunta del ácido de Lewis y el ácido de Broensted tras la reacción del compuesto aromático representado por la fórmula general (1) con propileno en presencia de un ácido de Broensted se realiza a una temperatura inferior a 50°C pero no inferior a -30°C.
6. Procedimiento para producir un compuesto alquilaromático según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, en el que se incluye propileno en una cantidad de 0,5 a 1 mol por mol del compuesto aromático.