**Извод**

**Оптимизација оксидације 3-метилпиридина у никотинску киселину катализовану ванадијум оксидом**

Pavel Vorobyev, Tatyana Mikhailovskaya, Olga Yugay\*, Lyudmila Saurambaeva,

Anna Serebryanskaya, Nikolay Chukhno, Raya Kurmakyzy

*A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty 050010, Kazakhstan*

*Извод*: После модификација V2O5 помоћу SnO2 и ZrO2 уочено је повећање селективности у оксидацији 3**-**метилпиридина у никотинску киселину, у гасовитој фази, помоћу ванадијум-оксида. Показано је да услед присуства SnO2 и ZrO2 долази до повећања афинитета према протону атома кисеоника у ванадијум-оксиду, и да је смањивање енталпије депротоновања метил-групе супстрата повезано са везиванјем атома азота супстрата за Луисову киселину (ванадијум јон). Ове карактеристике израчунате су квантно-хемијским поступцима Теорије функционала густине (Density Functional Theory). Модификацијама бинарних катализатора V2O5-SnO2 и V2O5-ZrO2 додавањем TiO2 повећава се нуклеофилност ванадил кисониковог атомашто има за последицу повећавање каталитичке активности и селективности у синтези никотинск екиселине.