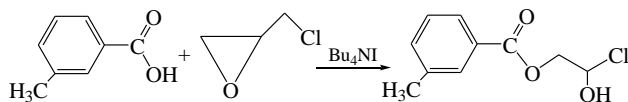


АЦИДОЛІЗ ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНУ 3-МЕТИЛБЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ  
В ПРИСУТНОСТІ ТЕТРАБУТИЛАМОНІЙ ЙОДИДУ*Марчук Л. С., Міщенко А. О., Бахалова Є. А., Швед О. М.*Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна  
marchuk.l@donnu.edu.ua

Реакція карбонових кислот з заміщеними оксиранами, зокрема епіхлоргідрином (ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових естерів, які є перспективними мономерами епоксидних смол, що призначені для герметиків, клеїв, компонентів фарб, антикорозійних покриттів, цементних модифікаторів тощо. Каталітичний ацидоліз ЕХГ, крім практичного значення, використовується як модельна реакція для вивчення біохімічних процесів детоксикації речовин екзогенного характеру. Для прогнозування реакційної здатності карбонових кислот в реакції з епоксидними сполуками важливим є дослідження механізму реакції. Реакція бензойної кислоти з хлорметилоксираном є однією з найбільш практично значущих реакцій, що використовується у синтезу сполук з високою термостійкістю. Проте при варіюванні замісників у бензойній кислоті властивості реакції змінюються. Тому актуальним є здійснення систематичних дослідів щодо впливу будови карбонових кислот на закономірності розкриття оксиранового циклу.

Метою даної роботи є дослідження впливу температури, природи та концентрації каталізатора – тетрабутиламоній йодиду – на реакційну здатність 3-метилбензойної кислоти в реакції з 2-хлорметилоксираном:



Об'єктами дослідження обрано 3-метилбензойну кислоту, хлорметилоксиран, який взято у надлишку та каталізатор реакції – тетрабутиламоній йодид. Концентрація бензойної кислоти становить 0,3 моль/л, четвертинної амонієвої солі – варіювалась в межах 0,00125–0,0050 моль/л. Кінетичні дослідження проводилися в температурному інтервалі 40–60 °С. У якості розчинника обрано суміш ЕХГ з тетрагідрофураном (ТГФ) у об'ємному співвідношенні 1:1. Вихідні речовини очищали за опрацьованими методиками. Контроль за перебігом реакції здійснювали потенціометричним кислотно-основним титруванням. Обробка експериментальних даних проводилась із застосуванням методу кореляційного аналізу.

За одержаними результатами встановлено нульовий порядок реакції за 3-метилбензойною кислотою та перший за каталізатором – тетрабутиламоній йодидом, що є основою для подальшого аналізу механізму реакції. Знайдено спостережувані константи швидкості реакції, співставлення яких з концентрацією каталізатора дозволило розрахувати константи швидкості некаталітичної та каталітичної стадій процесу. Визначено, що у відсутності каталізатора реакція на декілька порядків більш повільніша, ніж при наявності каталізатора, що доводить ефективність тетрабутиламоній йодиду як каталізатора реакції. Дослідження реакційних серій при різних температурах дозволив встановити активаційні параметри (енергія, ентальпія та ентропія активації) реакції, які відповідають процесам, що здійснюються за бімолекулярним нуклеофільним заміщенням. Отримані закономірності перебігу реакції є важливим внеском у дослідження реакційної здатності оксиранових сполук та механізму його розкриття і надають змогу для удосконалення методик синтезу мономерів епоксидних смол.