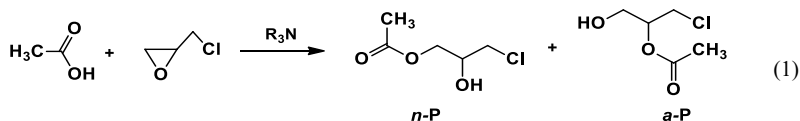


ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОНЦЕНТРАЦІЇ КИСЛОТНОГО РЕАГЕНТУ
НА КІНЕТИЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ АЦЕТОЛІЗУ
2-(ХЛОРМЕТИЛ)ОКСИРАНУ У ПРИСУТНОСТІ ТРЕТИННИХ АМІНІВ

Тарасенко В. В., Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна
tarasenko_v@donnu.edu.ua

Епіхлоргідрин (2-(хлорметил)оксиран, ЕХГ) – поширений синтон для одержання поліфункціональних сполук та мономерів епоксидних смол для виробництва хемо-, термо-, теплостійких композицій, лакофарбових матеріалів, клеїв, ряду лікарських речовин. Для прогнозування властивостей синтезованих матеріалів актуальним є вивчення механізму реакції розкриття асиметричного оксиранового циклу протоновмісними нуклеофільними реагентами, зокрема, карбоновими кислотами (1). Реакція (1) за участю ЕХГ перебігає з утворенням двох ізомерних хлоргідринових естерів: продукту «нормального» розкриття циклу *n-P* і «аномального» розкриття *a-P*, проте лише естер *n-P* здатний до подальшої циклізації, що робить його цінним інтермедіатом у синтезі епоксидних смол. Ефективними каталізаторами нуклеофільного розкриття циклу ЕХГ карбоновими кислотами є третинні аміни R_3N . Порядок реакції (1) залежить від природи реагента та співвідношення концентрацій ЕХГ : реагент.



Метою роботи є дослідження впливу концентрації оцтової кислоти та структури третинних амінів як каталізаторів у реакції ацетолізу ЕХГ у бінарному розчиннику нітробензол : епіхлоргідрин.

Об'єктами дослідження є: кислотний реагент – оцтова кислота, оксиран – епіхлоргідрин, третинні аміни – триетиламін, три-*n*-бутиламін, метилди-*n*-октиламін. Дослідження проводилось в умовах надлишку ЕХГ за температури $(60 \pm 0,1)^\circ\text{C}$ у бінарному розчиннику епіхлоргідрин : нітробензол (НБ) 1:1 об. Каталітичну активність R_3N досліджено в діапазоні концентрацій амінів $0,00125 \div 0,00500$ моль/л, початкова концентрація оцтової кислоти варіювалась в межах $0,184 \div 2,35$ моль/л. Контроль за ходом реакції здійснено методом рН-потенціометричного кислотно-основного титрування. Обробку результатів експерименту проведено статистичними методами та методом комп'ютерного моделювання механізму реакції у програмі KINET.

За результатами дослідження визначено перший порядок реакції за каталізатором. Дослідження реакції (1) в інтервалі концентрації кислоти показало, що зі збільшенням концентрації кислоти порядок реакції зростає в межах $0 \div 1$. Визначено спостережувані і каталітичні константи швидкості реакції у присутності серії R_3N . Встановлено, що зі збільшенням об'єму замісника біля атому нітрогену спостережувані і каталітичні константи швидкості реакції (1) зменшуються. З отриманих експериментальних даних реакції за допомогою програми KINET змодельовані кінетичні криві за ймовірними механізмами, які підтверджують знайдені порядки реакції. Одержані результати розширюють уявлення щодо механізму реакції (1), пояснюють експериментальні дані щодо зміни порядку реакції за кислотним реагентом та дають змогу прогнозувати перебіг реакції в залежності від співвідношення концентрацій реагента і субстрата, що важливо, зокрема, для оптимізації промислового процесу синтезу мономерів епоксидних смол.