

## КАТАЛІТИЧНЕ РОЗКРИТТЯ ЦИКЛУ ЕПІХЛОРИДРИНУ БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ ПРИ ВАРІОВАННІ ПОЛЯРНOSTІ РОЗЧИННИКА

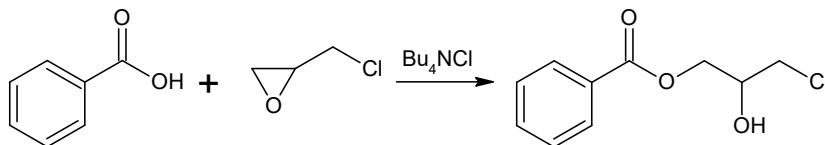
*Казаків О. А., Бахалова С. А., Швед О. М., Діденко Н. О.*

Кафедра неорганічної, органічної та аналітичної хімії, Донецький національний університет імені Василя Стуса, вул. 600-річчя, 21, 21021, Вінниця, Україна  
kazakov.o@donnu.edu.ua

В основі синтезу ряду лікарських препаратів, полімерних композицій для герметиків, клеїв, пластифікаторів лежить взаємодія оксиранів з протонодонорними реагентами (спирти, феноли, карбонові кислоти). На практиці найбільш важливою є реакція епіхлоргідрину (ЕХГ) з органічними кислотами, зокрема ароматичними кислотами, які покращують термо- та теплостійкість композитів. Для оптимізації промислових процесів, прогнозування поведінки споріднених сполук важливими є дослідження закономірностей нуклеофільного розкриття оксиранового циклу протонодонорами. Каталізатори, що показують високу ефективність у цій реакції, є солі тетраалкіламонію. Створення прогностичної моделі вимагає дослідження механізму реакції, що робить актуальним вивчення поведінки реагентів молекулярної будови і каталізаторів іонної будови у розчинниках різної полярності.

Метою роботи є дослідження впливу полярності розчинника на реакційну здатність бензойної кислоти при взаємодії з епіхлоргідрином в надлишку останнього. Надлишок ЕХГ знижує перебіг бічних реакцій, процесів утворення самоасоціатів.

Реакція здійснюється за схемою:



Каталізатором обрано сполуку іонної будови – тетрабутиламоній хлорид. Кінетичні закономірності реакції досліджено варіюванням концентрації каталізатора. Температура реакції 60 °С. Розчинником виступав ЕХГ ( $\epsilon = 22,6$ ) та його суміші з ТГФ у співвідношеннях 1:1 об. ( $\epsilon = 15,01$ ) та 7:3 об. ( $\epsilon = 18,01$ ). Перебіг реакції контролювали за зміною концентрації бензойної кислоти методом потенціометричного кислотно-основного титрування. Експериментальні дані оброблялися за відомими кінетичними формулами із застосування методів статистичної математики та кореляційного аналізу.

За результатами дослідження встановлено, що у розчинниках різної полярності спостерігається нульовий порядок реакції за бензойною кислотою та перший за каталізатором. Знайдено константи швидкості некаталітичної та каталітичної стадій реакції, доведено кінетичне рівняння швидкості. Показано, що каталітична стадія реакції перебігає на 3–4 порядків швидше, ніж некаталітична. Це доводить ефективність тетрабутиламоній хлориду як каталізатора розкриття циклу епоксиду. Встановлено, що зі зниженням полярності розчинника в ряду ЕХГ < ЕХГ:ТГФ (1:1 об.) < ЕХГ:ТГФ (7:3 об.) швидкість реакції збільшується, що відповідає закономірностям процесів, які відбуваються за  $S_N2$  механізмом за участю сполук іонної будови. Це доводить, що для досліджуваної багатостадійної реакції лімітуючою стадією є нуклеофільна атака аніоном солі на карбон оксиранового циклу.