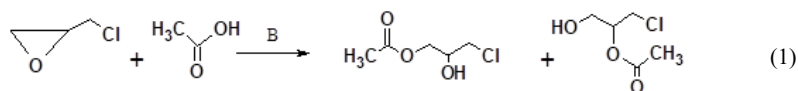


ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КОНЦЕНТРАЦІЇ РЕАГЕНТУ НА ЗАКОНОМІРНОСТІ КАТАЛІТИЧНОГО АЦЕТОЛІЗУ ЕПІХЛОРИДРИНУ

Макоцька О. Ю., Кравчук А. В., Югілова К. С., Швед О. М.

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

Епіхлорідрин (1-хлор-2,3-епоксипропан, ЕХГ) завдяки напруженості тричленного цикла має високу реакційну здатність та знаходить широке застосування у виробництві епоксидних смол, клеїв, є вихідною речовиною у синтезі різноманітних продуктів органічного синтезу, у тому числі барвників, поверхнево-активних речовин, фармацевтичних препаратів. Найбільше практичне значення мають реакції нуклеофільного розкриття циклу ЕХГ (1), зокрема карбоновими кислотами. Проведені дослідження показали, що особливості перебігу процесу (1) залежить від ряду факторів, таких як температура, природа каталізатора, розчинника. Порядок реакції залежить від співвідношення концентрацій кислотного реагенту і субстрату. Так, в надлишку оксирана спостерігається переважно нульовий порядок реакції за реагентом, в надлишку кислоти – переважно перший порядок.



Ефективними каталізаторами реакції (1) є галогеніди тетраалкіламонію $\text{R}_4\text{N}^+\text{Hal}^-$ та третинні аміни R_3N , що є носіями нуклеофільних активних центрів. Використання четвертинних амонієвих солей та третинних амінів дає змогу знизити температуру синтезу на 20–30 °С та забезпечує високу регіоселективність одержання β -гідроксипропілових естерів. Каталітична здатність N-вмісних сполук залежить від їхньої структури, основності, нуклеофільності. У ряді досліджених реакційних серій спостерігається помітний вплив структури катіона тетраалкіламонієвої солі на швидкість реакції, тоді як для інших серій каталітична активність солей більшою мірою визначається природою аніона.

Метою роботи є дослідження впливу концентрації оцтової кислоти та структури каталізатора на закономірності ацетолізу ЕХГ кінетичними методами. Об'єктами дослідження є епіхлорідрин, оцтова кислота, каталізатори: *n*-тетрабутиламоній хлорид, тетрабутиламоній йодид та третиламин.

Вивчення ацетолізу епіхлорідрину проводилося у бінарній суміші ЕХГ з тетрагідрофураном (ТГФ) у співвідношенні 1:1 об. Дослідження проводилось за температури (60±0,1) °С. Концентрація оцтової кислоти варіювалася в діапазоні 0,20 ÷ 2,00 моль/л за сталої концентрації каталізатора 0,005 моль/л.

В результаті проведених досліджень визначено, що порядок реакції (1) залежить від концентрації оцтової кислоти. Встановлено нульовий порядок за кислотою при співвідношенні концентрацій кислота : оксиран 1 : 32, але при збільшенні концентрації кислоти порядок реакції змінюється на перший. Визначено перший порядок реакції за каталізатором. Оцінено вплив структури каталізатора на перебіг ацетолізу. Зі збільшенням об'єму катіона швидкість реакції (1) збільшується. Найбільш ефективним каталізатором в умовах дослідження виявився *n*-тетрабутиламоній хлорид, що має найбільш об'ємний катіон. Встановлено, що каталіз солями тетраалкіламонію є більш ефективним, ніж третинними амінами. Показано, що збільшення концентрації кислотного реагента впливає на співвідношення швидкостей елементарних стадій реакції в рамках єдиного механізму реакції.