

## ТЕРМОДИНАМІЧНІ АСПЕКТИ РЕАКЦІЇ 2-МЕТИЛБЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ З ЕПІХЛОРИДРИНОМ ПРИ КАТАЛІЗІ СОЛЯМИ ТЕТРААЛКІЛАМОНІЮ

*Шчіпина К. П.*<sup>1</sup>, Бахалова Є. А.<sup>1</sup>, Швед О. М.<sup>1</sup>, Діденко Н. О.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

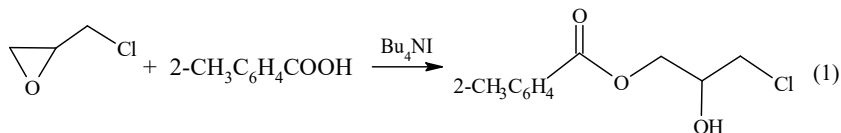
<sup>2</sup>Вінницький національний медичний університет ім. М. І. Пирогова,

Вінниця, Україна

shchipina.k@donnu.edu.ua

Однією з важливих в практиці органічного синтезу є реакція епіхлоргідрину (ЕХГ, 2-хлорметилоксиран) з карбоновими кислотами, зокрема ароматичними кислотами, які надають композитам більш високу термо-, теплостійкість. Дослідження закономірностей нуклеофільного розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами є актуальним не лише для оптимізації промислових процесів, але й для прогнозування поведінки споріднених сполук.

Метою даної роботи є дослідження термодинамічних характеристик реакції 2-метилбензойної кислоти з ЕХГ при каталізі тетрабутиламоній йодидом:



Дослідження проведено в інтервалі температур 40–60 °С в умовах, які моделюють промисловий процес добування епоксидних смол, а саме у значному надлишку ЕХГ, який виступає в якості субстрата та розчинника одночасно. Вивчення реакційної здатності 2-метилбензойної кислоти у реакції (1) здійснено при варіюванні концентрації каталізатора та температури кінетичними методами. Контроль за перебігом реакції здійснювався по витрачання карбонової кислоти потенціометричним кислотно-основним титруванням. Обробка експериментальних даних проводилась із застосуванням методу кореляційного аналізу.

За результатами роботи встановлено кінетичний закон досліджуваної реакції, оцінені спостережувані і каталітичні константи швидкості при 40, 50 і 60 °С, ефективність каталізу тетрабутиламоній йодидом. Показано, що підвищення температури призводить до зростання швидкості реакції (1) за рівнянням Арреніуса. Обробка експериментальних даних за рівняннями Арреніуса і Ейринга надала змогу розрахувати енергію, ентальпію, ентропію і енергію Гіббса активації. Розраховані термодинамічні параметри реакції характерні для бімолекулярних реакцій нуклеофільного заміщення S<sub>N</sub>2. Реакційна здатність 2-метилбензойної кислоти та активаційні параметри процесу порівняно з відповідними даними для бензойної та 3-метилбензойної кислот, кислотні властивості (рKa) яких відповідно знижуються. Встановлено, що при 60 °С підвищення кислотних властивостей карбонових кислот призводить до зниження каталітичних констант швидкості. Проте незалежно від рKa бензойних кислот у досліджуваних умовах в реакції (1) спостерігається однакова енергія Гіббса активації, що дозволяє віднести реакційну серію «бензойні кислоти – епіхлоргідрин – тетрабутиламоній йодид» до ізокінетичної. Це відповідає наявності в системі ентальпійно-ентропійної компенсації та дає змогу регулювати температурно-часові параметри реакції.