

ФЕНОЛІЗ ЕПІХЛОРГІДРИНУ ПРИ КАТАЛІЗІ ТЕТРАБУТИЛАМОНІЙ ЙОДИДОМ: КІНЕТИЧНІ ТА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ЗАКОНОМІРНОСТІ

Доманський С. В.¹, Горобчук О. М.¹, Ютілова К. С.¹, Швед О. М.², Розанцев Г. М.¹

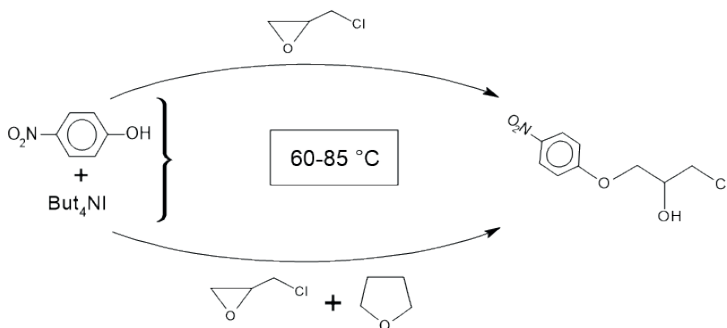
¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна

s.domanskyi@donnu.edu.ua

Участь епоксидних сполук в реакціях полімеризації виробничого масштабу забезпечує такі комплексні технологічні запити як виготовлення високоміцних конструкцій, зокрема в авіаційній, космічній та автомобільній промисловості, виробництво вуглецевих і склопластикових виробів. Ключовою реакцією в описаних індустріальних процесах є розкриття циклу оксирану, зокрема при взаємодії епіхлоргідрину (ЕХГ) з фенолами, що надає змогу синтезу епоксидних смол, які забезпечують матеріалам термо-, тепло-, хемостійкість, оптичну прозорість. Факторами, що забезпечують оптимальну швидкість реакції, є температура, наявність ефективних каталізаторів, склад реакційної суміші, природа розчинника.

Метою даної роботи є дослідження кінетичних і термодинамічних закономірностей каталітичного фенолізу ЕХГ. Каталізатором обрано сполуку іонної будови – тетрабутиламоній йодид (But_4NI), кислотний реагент – 4-нітрофенол. Реакцію проводили у значному надлишку ЕХГ для запобігання бічних процесів та процесів самоасоціації фенолу. Вплив температури вивчали в інтервалі 333–358 К. Дослідження проведені у двох розчинниках: ЕХГ та його суміші з тетрагідрофураном (ТГФ). Контроль за швидкістю реакції здійснювали по витрачанням кислотного реагенту методом кислотно-основного потенціометричного титрування. Розрахунки порядків реакції за компонентами, спостережуваних, некаталітичних і каталітичних констант швидкості реакції, активаційних параметрів процесу проводився з використанням методів математичної статистики та кореляційного аналізу.



Результати показали, що реакція має нульовий порядок реакції за 4-нітрофенолом та перший – за каталізатором. Показно, що ефективність каталізу But_4NI збільшується у менш полярному середовищі – суміші ЕХГ і ТГФ. Зростання швидкості реакції сприяють такі чинники як підвищення температури і зниження полярності розчинника. Встановлені активаційні параметри реакції відповідають процесам бімолекулярного нуклеофільного заміщення. Визначені кінетичні і термодинамічні закономірності надають нову інформацію щодо механізму каталізу і є основою створення моделі прогнозованого і керованого перебігу реакції.