

ДОСЛІДЖЕННЯ СТАНУ ТЕТРАБУТИЛАМОНІЙ ХЛОРИДУ ЯК КАТАЛІЗАТОРУ РОЗКРИТТЯ ОКСИРАНОВОГО ЦИКЛУ БЕНЗОЙНОЮ КИСЛОТОЮ

*Казаков О. А.*¹, Швед О. М.², Бахалова С. А.³,
Розанцев Г. М.¹, Діденко Н. О.⁴, Жильцова С. В.¹

¹Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

²Інститут фізико-органічної хімії і вуглекімії ім. Л. М. Литвиненка НАНУ,
Київ, Україна

³Приватне акціонерне товариство «Інфузія», Вінниця, Україна

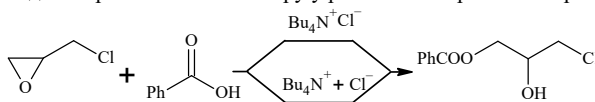
⁴Вінницький національний медичний університет імені Миколи Пирогова, Вінниця,
Україна

kazakov.o@donnu.edu.ua

Висока реакційна здатність оксиранів зумовлює їх широке використання в синтезі лікарських препаратів, речовин медичного призначення, полімерних композицій для герметиків, клеїв, пластифікаторів. Для створення синтетичних капсул на основі оксиранів як синтонів, подальша трансформація яких регіоселективно призводить до утворення необхідних структур, базовими виступають дослідження механізмів запланованих перетворень. До однієї з практично значущих відноситься реакція 2-(хлорметил)оксирану (епіхлоргідрину, ЕХГ) з протонвмісними реагентами, зокрема спиртами, фенолами, карбоновими кислотами. Ефективними каталізаторами цієї реакції виступають солі тетраалкіламонію. З урахуванням невисоких основних і нуклеофільних властивостей аніонів солей, важливим є дослідження механізму їх каталітичної дії. Встановлено, що розкриття циклу оксирану відбувається за механізмом бімолекулярного нуклеофільного заміщення. У разі солей тетраалкіламонію, що мають іонну будову, атакуючим нуклеофілом може бути сольватна, контактна чи розділена іонна пара в залежності від полярності розчинника:



Метою роботи є дослідження стану іонного каталізатора у системі «ЕХГ–бензойна кислота– Bu_4NCl » шляхом співставлення кінетичних і термодинамічних аспектів реакції та електропровідності розчинів каталізатора у розчинниках різної полярності:



Дослідження проведено при варіюванні температури (313÷353 К), концентрації каталізатора (0,00125÷0,005) та полярності розчинника, у якості якого обрано ЕХГ (субстрат і розчинник) та його суміші з тетрагідрофураном (ТГФ). Хід реакції контролювали за витрачанням бензойної кислоти у часі методом потенціометричного кислотного-основного титрування. Кінетику реакції вивчали до глибоких ступенів конверсії кислотного реагенту, що дало змогу встановити нульовий порядок реакції за бензойною кислотою, перший порядок реакції за каталізатором у всіх досліджених умовах. За результатами кінетичних і термодинамічних досліджень обчислені спостережувані і каталітичні константи швидкості реакції при різних температурах у розчинниках різної полярності. Електропровідність Bu_4NCl визначена кондуктометричним методом у воді, ЕХГ та суміші ЕХГ і ТГФ при різних температурах. Встановлена прямолінійна залежність електропровідності солі від полярності розчинника та температури. Показано, що каталітична активність Bu_4NCl добре корелюється із станом солі у розчині. Збільшення полярності розчинника сприяє утворенню розділеної іонної пари, але знижує швидкість реакції за рахунок підвищення ступеню сольватації іонів. Добуті дані дають змогу деталізувати механізм каталітичної дії солей у реакції розкриття оксиранового циклу протонвмісними реагентами.