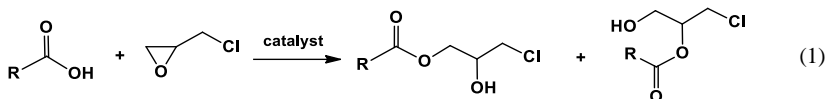


# СУМІСНИЙ ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ І ПОЛЯРНОСТІ РОЗЧИННИКА НА РЕАКЦІЙНУ СИСТЕМУ «ЕПІХЛОРГІДРИН – ПРОПІОНОВА КИСЛОТА – ТЕТРА-*n*-БУТИЛАМОНІЙ ЙОДИД»

*Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М.*

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна  
kravchuk\_a@donnu.edu.ua

Реакція карбонових кислот з епіхлоргідрином (ЕХГ) лежить в основі синтезу гліцидилкарбонових естерів (1), які є перспективними мономерами для отримання полімерних матеріалів і композицій з різноманітними властивостями та широким спектром використання.



Реакція каталітичного ацидолізу ЕХГ є модельною для вивчення механізму нуклеофільного розкриття оксиранового циклу карбоновими кислотами.

Особливості перебігу реакції (1) залежать від умов реакції, співвідношення реагентів. Проведення ацидолізу оксиранів в умовах надлишку останнього забезпечує зниження кількості бічних реакцій та утворення ізомерних гліцидилових естерів – 1-хлор-3-ацилокси-пропанолу-2 (головний продукт) та 1-хлор-2-ацилоксипропанолу-1 (мінорний продукт). Швидкість утворення естерів та їх співвідношення визначаються природою каталізатора. Ефективними каталізаторами реакції є галогеніди тетраалкіламонія.

Метою роботи є дослідження впливу температури і полярності розчинника на ацидоліз епіхлоргідрину пропіоновою кислотою в присутності – тетра-*n*-бутиламоній йодиду. Об'єктами дослідження є пропіонова кислота, епіхлоргідрин, тетра-*n*-бутиламоній йодид ( $(n\text{-C}_4\text{H}_9)_4\text{NI}$ ). Дослідження проведені у надлишку ЕХГ в розчинниках: епіхлоргідрин, бінарні суміші епіхлоргідрин : тетрагідрофуран (ТГФ, 50 % об.) та епіхлоргідрин : нітробензол (НБ, 50 % об.). Експеримент здійснювали для концентрації кислоти 0,2 моль/л, каталізатора 0,00125; 0,00375; 0,00250; 0,00500 моль/л в температурному інтервалі 40 ÷ 80 °С. Контроль за перебігом реакції здійснювався методом кислотно-основного рН-потенціометричного титрування розчином лугу. Чистоту вихідних речовин оцінювали хроматографічно, за даними ІЧ-спектроскопії.

За результатами роботи визначено, що  $(n\text{-C}_4\text{H}_9)_4\text{NI}$  є ефективним каталізатором реакції (1) у розчинниках різної полярності, встановлено порядки реакції за кислотою нульовий і перший – за каталізатором у розчинниках різної полярності. Розраховано спостережувані, некаталітичні та каталітичні константи швидкості. Встановлено лінійну залежність швидкості реакції пропіонової кислоти з ЕХГ від температури у координатах рівняння Арреніуса у розчинниках ЕХГ, ЕХГ : ТГФ, ЕХГ : НБ. Обчислено активаційні параметри процесу, значення яких є характерними для реакцій, що перебігають за  $\text{S}_\text{N}2$ -механізмом. Показано, що полярність реакційного середовища впливає на швидкість реакції ацидолізу ЕХГ: зі зниженням полярності розчинника, тобто при переході від ЕХГ : НБ до ЕХГ і ЕХГ : ТГФ, швидкість реакції розкриття циклу ЕХГ пропіоновою кислотою збільшується. Методами кореляційного аналізу здійснено оцінку сумісного впливу температури і полярності на реакційну здатність пропіонової кислоти у реакції (1). Отримані результати надають можливість оптимізації умов проведення реакції, зокрема у синтезі полімерних матеріалів на основі епоксидних сполук.