

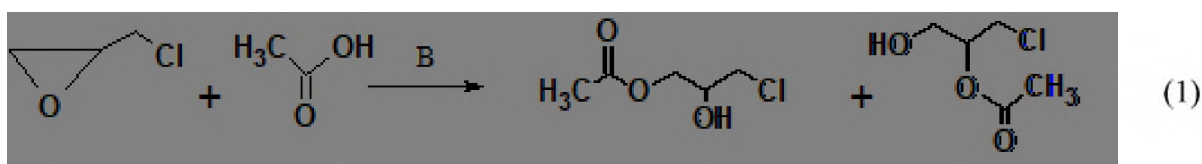
**ВПЛИВ СПІВВІДНОШЕННЯ РЕАГЕНТ:
СУБСТРАТ НА ЗАКОМІРНОСТІ АЦЕТОЛІЗУ 2-(ХЛОРМЕТИЛ)ОКСИРАНУ
ПРИ КАТАЛІЗІ ТЕТРАЕТИЛАМОНІЙ ЙОДИДОМ**

Макоцька О. Ю., Ютілова К. С., Швед О. М.

Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

makotska.o@donnu.edu.ua

Хлорметилоксиран (епіхлоргідрин, ЕХГ) – універсальний синтон органічного синтезу, що використовується для добування нових біологічно активних полук, різноманітних гетеро- і макроциклічних структур, мономерів епоксидних смол, стабілізаторів для хлорорганічних сполук, іонобмінних смол тощо. Особливий науковий та технологічний інтерес представляє реакція розкриття циклу ЕХГ карбоновими кислотами (1). Серед ефективних каталізаторів реакції (1) є галогеніди



тетраалкіламонію, третинні аміни. Здійснення цілеспрямованого синтезу на основі реакції (1) базується на встановленні закономірностей перебігу реакції та дослідженні факторів, що впливають на швидкість реакції та дозволяють регулювати її. Важливим чинником, який характеризує механізм реакції, є порядок реакції як загальний, так і за окремими речовинами. Аналіз літературних даних показує, що порядок ацидолізу оксирану залежить від кислотності реагента та співвідношення реагент: оксиран. Для більшості з досліджених реакційних серій порядок реакції за оксираном перший, за реагентом варіюється від 0 до 1 в залежності від складу реакційної суміші, кислотності реагента. В надлишку реагента порядок реакції за ним дорівнює 1, в надлишку оксиранадорівнює 0.

Метою роботи є дослідження впливу співвідношення концентрацій оцтової кислоти та субстрата – оксиранана закономірності каталітичного ацетолізу ЕХГ кінетичними методами. Об'єктами дослідження є епіхлоргідрин, оцтова кислота, каталізатор: тетраетиламоній йодид. Для варіювання концентрації епіхлоргідрину дослідження проведені у бінарному розчиннику ЕХГ:ТГФ (тетрагідрофуран), тобто ЕХГ виступає не лише субстратом, але й входить до складу розчинника. Вміст ТГФ складав 50 об.%. Концентрація оцтової кислоти варіювалася в діапазоні 0,20 ÷ 2,00 моль/л при стандартній концентрації каталізатора – 0,005 моль/л. Співвідношення концентрацій субстрат : реагент варіювалось від 32 до 3. Дослідження проведені за температури 60 °С. Хід реакції контролювали за витрощанням оцтової кислоти методом потенціометричного кислотно-основного титрування.

За результатами дослідження визначено порядки реакції за кислотою, оксираном і каталізатором. Встановлено, що порядок реакції за реагентом залежить від співвідношення концентрацій оцтової кислоти і ЕХГ. При співвідношенні 1 : 32 спостерігається нульовий порядок реакції за кислотою. Збільшення концентрації реагента призводить до зміни порядку реакції за ним з нульового на перший. При співставних концентраціях реагента і субстрата порядок реакції за останнім є першим. Порядок реакції за каталізатором у всіх серіях дорівнює 1. Встановлені кінетичні рівняння швидкості дали змогу розрахувати спостережувані, каталітичні і некаталітичні константи швидкості реакції. Залежність порядку реакції за реагентом від мольного співвідношення реагент : субстрат свідчать про багатостадійний механізм процесу, що відбувається зі зміною лімітуючої стадії.