

Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

МРНТИ: 02.00.05
УДК: 547.52:547.82:541.128

[DOI: 10.53002/112](https://doi.org/10.53002/112)

А.С. Утегул, В.В. Меркулов, А.И. Алмазов, Е.В. Ситдикова.

Карагандинский индустриальный университет, г. Темиртау, Казахстан
(E-mail: a.utegul@tttu.edu.kz, v.merkulov@tttu.edu.kz, e.sitdikova@tttu.edu.kz, a.almazov@tttu.edu.kz)

Дифенилкетонның ацетилен туындысының синтезі

Бұл зерттеудің мақсаты зертханалық жағдайларда алынған тазартылған ацетиленді пайдалана отырып, сілтілі ортада дифенилкетонның ацетилен туындысын синтездеу шарттарын әзірлеу және тәжірибелік сынақтан өткізу болып табылады. Бұл зерттеу карбонилді қосылыстарға ацетилд аниондарының нуклеофильді қосылу механизмін тереңірек түсінуге және реакцияға орта құрамы мен рН әсерін зерттеуге бағытталған. Ацетиленнің активтену процесіне және аралық өнімдердің тұрақтылығына органикалық еріткіштің әсеріне, реакция жүйесінің фазалық құрылымының қалыптасуына ерекше назар аударылады. Синтез нәтижелері полиолдар мен қорғаныс жабындары үшін полимерлік материалдарды жасауда қолданылатын ацетиленді спирттер мен диолдарды өндіруді оңтайландыру үшін пайдаланылады деп күтілуде. Бұл зерттеу көміртегі-көміртекті байланыстардың құрылымын кеңейтілген түсінуге және функционалды органикалық қосылыстарды өндірудің жаңа жолдарын дамытуға ықпал етеді.

Түйін сөздер: ацетилен, дифенилкетон, нуклеофильді қосылу, сілтілі катализ, ацетилен спирттері синтезі.

Кіріспе

Бұл зерттеу ацетиленнің (C₂H₂) сілтілі ортадағы дифенилкетонмен (Ph₂CO) әрекеттесуін зерттейді және жаңа ацетилен туындыларының түзілу механизмдерін белгілейді. Бұл зерттеу синтезді, фазалық ауысуды бақылауды, рН талдауын және реакция механизмінің сипаттамасын қамтитын кешенді тәсілді пайдаланады.

Методология

Ацетиленнің дифенилкетонға нуклеофильді қосылу реакциясының жұмсақ жағдайларда – өтпелі металдарды немесе жоғары қысымды қолданбай – бірінші рет зертханалық жағдайда расталды. Сілтілік катализаторларды (KOH) қолдану ацетиленнің тиімді активтенуін қамтамасыз ететіні, одан кейін кетонның карбонил тобымен әрекеттесуге қабілетті ацетилдтердің түзілуі анықталды. Реакциялық қоспаның динамикалық мінез-құлқы туралы тәжірибелік деректер алынды: үш фазалы құрылымның қалыптасуымен жүретін жүйенің түсінің, тұтқырлығының және рН-ның сипаттамалық өзгерістері тіркелді. Спектрлік мәліметтермен расталған, құрамында гидроксил және винил фрагменттері бар деп болжанатын жаңа ацетилен туындыларының пайда болуының дәлелдері анықталды. Жүйенің физика-химиялық қасиеттері және ацетилдті кешендерді диолды құрылымдарға одан әрі түрлендірудің мүмкін жолдары нақтыланды.

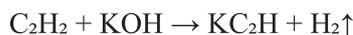
Жасалған синтез әдісі қарапайымдылығымен, қауіпсіздігімен және реагенттердің қолжетімділігімен сипатталады, бұл оны оқу және ғылыми зертханалар үшін қолайлы етеді. Қолданылатын жағдайлар (қалыпты температура, улы катализаторлардың болмауы, минималды қалдық) бұл процесті органикалық синтездің экологиялық таза нұсқасы ретінде қарастыруға мүмкіндік береді. Алынған қосылыстар коррозияға қарсы жабындарды және органикалық гидрогельдерді қоса алғанда, полимерлі және қорғаныс материалдарын синтездеу үшін прекурсорлар ретінде пайдаланылуы мүмкін. Әдістемені ацетиленнің реактивтілігін көрсетуде оқу мақсатында, қосу

Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

реакциялары мен нуклеофильді әрекеттесу бойынша оқу материалын кеңейтуге болады. Бұл зерттеудің нәтижелері органикалық синтез және материалтану саласындағы әрі қарайғы зерттеулерге, сондай-ақ ароматты кетондарға негізделген құрылымдарды модификациялауға негіз болады.

Осылайша, зерттеудің теориялық және қолданбалы мәні бар. Ол ацетилен мен карбонил қосылыстары арасындағы реакциялардың механизмдерін тереңірек түсінуге ықпал етеді және бір уақытта алынған мәліметтерді жаңа материалдар мен технологияларды әзірлеуде практикалық қолдану мүмкіндігін көрсетеді.

Ацетилен (C_2H_2) ең қарапайым алкин, көміртек атомдары арасында үштік байланыстың болуымен сипатталады. π -байланыстардың жоғары концентрациясы ацетилен молекуласын нуклеофильді қосылу және полимерлену реакцияларынан өтуге қабілетті етеді. Сілтілік катализаторлардың (мысалы, КОН) қатысуымен ацетилен айқын нуклеофильділігін көрсететін ацетилідті аниондарды (C_2H^-) түзе алады:



Бұл белсенді түрлер гидратация кезінде диол түріне айналуы мүмкін аралық винил спиртінің қалыптастыру үшін кетонның карбонил тобының электрофильді орталығына, бұл жағдайда дифенил кетонға $(C_6H_5)_2CO$ -ға шабуыл жасауға қабілетті. Реакцияның жалпы схемасын келесідей көрсетуге болады:



Алынған қосылыс - тетрабутинедиол немесе оның ацетилен аналогы - қорғаныс жабындарын өндіру үшін қолданылатын полиолдар мен полимер жүйелерінің синтезінде аралық өнім ретінде қызығушылық тудырады.

Ацетилен генерациясы. Ацетилен кальций карбидінің сумен әрекеттесуі нәтижесінде алынды:



Процесс жылу және газ тәріздес ацетиленнің бөлінуімен қатар жүрді, ол тізбектей қосылған төрт қолбадан тұратын тазарту жүйесі арқылы бағытталды:

1. Хром қоспасы ($K_2Cr_2O_7 + H_2SO_4$) — фосфор мен күкірті бар қоспаларды кетіру;
2. $KMnO_4$ ерітіндісі — қалдық органикалық ластаушы заттардың тотығуы;
3. Ағартқыш ($NaClO$) — органикалық буларды қосымша тотығу және дезактивациялау;
4. Өндірілген әк $Ca(OH)_2$ — ацетиленді кептіру және қышқылдық қалдықтарды бейтараптандыру.

Әрбір қолба арқылы газ ағыны тән көпіршікті дыбыс арқылы көзбен бақыланды. Тазарту аяқталғаннан кейін ацетилен реакциялық қолбаға жіберілді.

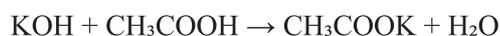
Реакция бесінші қолбада жүргізілді, оның ішінде:

- 250 мл кептірілген органикалық еріткіш,
- катализатор ретінде 60 г калий гидроксиді (KOH),
- 15 г дифенилкетон.

Қолба шамамен $100^\circ C$ температурада ұсталатын су моншасына қойылды. Ацетиленді реакциялық қоспадан өткізгенде келесі өзгерістер байқалды:

- KOH қосқаннан кейін ерітінді қара қоңыр түсті;
- Дифенилкетонды қосқаннан кейін қоспа жеңіл және біртекті болды;
- 15–20 минут ішінде реакциялық қоспа бірте-бірте өзінің бұлдырлығын жоғалтып, ақ түсті ұсақ қосындылар пайда болды.

Реакция аяқталғаннан кейін қоспа 20% сірке қышқылы ерітіндісімен біртіндеп бейтараптандырылды:



Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

Қышқылды қосу кезінде қоспаның рН мәні 10-нан 6-ға дейін өзгерді, нәтижесінде үш фазалы жүйе пайда болды:

1. Жоғарғы қабат: майлы сары органикалық фаза;
2. Ортаңғы қабат: лайлы тұз ерітіндісі;
3. Төменгі қабат: тығыз қоңыр түсті масса (гидрогель тәрізді құрылым).



Сурет 1. Ацетилен дифенилкетонмен әрекеттескенден кейінгі өнімнің фазалық күйі

24 сағаттан кейін қоспасы тұрақтанды. Жоғарғы фаза бөлініп, мақсатты ацетиленді қосылыстары бар реакция өнімін көрсетті.

№1 және №2 зертханалық жобалардың салыстырмалы талдауы

Бұл бөлімде сілтілі катализатор (КОН) қатысуымен ацетиленнің (C_2H_2) дифенилкетонмен (Ph_2CO) реакциясын зерттеу үшін жүргізілген екі зертханалық жобаның салыстырмалы талдауы берілген. Екі жоба да жаңа ацетилен туындыларын алуға және олардың физика-химиялық қасиеттерін зерттеуге бағытталған.

Негізгі айырмашылықтар:

1. Бірінші зертханалық жоба зерттеушілік сипатта болды және ацетиленнің дифенилкетонмен әрекеттесуін орнатуға мүмкіндік берді, бұл жаңа қосылыстың оқшаулануына әкелді.
2. Екінші зертханалық жоба реакция механизмін, рН бақылауын және синтез шарттарын түсіндіруге бағытталған.
3. Өнімдегі айырмашылықтар (ұнтақты және майлы) әртүрлі реакция кезеңдері мен еріткіш жағдайларына байланысты болуы мүмкін.
4. ИҚ спектрлері дифенилкетон туындыларына тән ароматты, ацетилен және гидроксил топтары бар қосылыстардың түзілуін растайды.

Бұл бақылаулар карбонил тобына ацелидтің нуклеофильді қосылу механизміне қатысты теориялық тұжырымдамаларға сәйкес келеді. Сілтілік орта ацетиленді белсендіреді, ал органикалық фаза аралық қосылыстарды тұрақтандырады. Бейтараптандырудан кейінгі фазалардың бөлінуі полярлығымен ерекшеленетін құрамында ацетилен бар спирттер мен калий тұздарының түзілуімен байланысты.

Зерттеу нәтижелері

Алынған қосылыстың әлеуетті практикалық қолданылуы

Сілтілік ортада ацетиленнің дифенилкетонмен әрекеттесуі нәтижесінде түзілген зерттеу барысында алынған қосылыс құрамында гидроксил және ацетилен (немесе винил) функционалдық

Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

топтары бар ароматты туынды болып табылады. Қосылыстың ұсынылған құрылымын $(C_6H_5)_2C(OH)-CH=CH_2$ немесе $(C_6H_5)_2C(OH)-C\equiv CH$ формуласымен сипаттауға болады. Функционалдық фрагменттердің бұл тіркесімі әлеуетті практикалық қолданбалардың кең ауқымын анықтайды.

Ацетилен және винил топтары жоғары реактивті және полимерлену немесе сополимерлеу процестеріне қатыса алады. Хош иісті фрагменттер материалға қаттылық пен термиялық тұрақтылық береді, ал гидроксил топтары басқа компоненттермен адгезия мен үйлесімділікті арттырады. Осыған байланысты бұл қосылыс мыналарды өндіру үшін мономер немесе прекурсор ретінде қызмет ете алады:

1. ыстыққа төзімді және химиялық тұрақты полимерлер;
2. коррозияға қарсы және электрлік оқшаулағыш жабындар;
3. адгезиясы жоғарылаған бояу, лак және желім жүйелері.

Осыған ұқсас бағыттар Меркулов В.В. және Александр А.И. (2024–2025) еңбектерінде белсенді түрде зерттелуде, мұнда ұқсас хош иісті ацетилен туындылары агрессивті ортаға төзімді қорғаныс жабындарының құрамдас бөліктері ретінде пайдаланылады.

Белсенді функционалдық топтардың болуы ($-OH$ және $-C\equiv CH$ немесе $-CH=CH_2$) бұл қосылысты басқа органикалық заттардың синтезі үшін әмбебап құрылыс материалы ретінде пайдалануға мүмкіндік береді. Ол келесі реакцияларға ұшырауы мүмкін:

1. гидратация — кетондар мен диолдарды түзу;
2. гидрлеу — қаныққан спирттер түзу;
3. галогендеу — винилгалогенидтер алу (поливинилхлорид синтезіндегі аралық өнімдер);
4. тотығу – ароматты қышқылдардың немесе күрделі эфирлердің түзілуімен.

Осылайша, қосылысты құнды физика-химиялық қасиеттері бар жаңа органикалық заттардың мақсатты синтезі үшін бастапқы компонент ретінде қарастыруға болады.

Құрамында ацетилен және гидроксил топтары бар қосылыстар биологиялық белсенді қосылыстардың синтезінде аралық өнім ретінде жиі қолданылады. Молекуланың хош иісті табиғаты және гидроксил топтарының болуы оның құрылымын қабынуға қарсы, бактерияға қарсы немесе антиоксиданттық белсенділігі бар туындылар алу үшін өзгертуге мүмкіндік береді. Осылайша, зерттелетін қосылыс жаңа дәрілік заттардың синтезі үшін дәрілік органикалық химияның прекурсоры ретінде қызығушылық тудыруы мүмкін.

Конъюгацияланған π -жүйелер, соның ішінде ароматты сақиналар мен ацетилен фрагменттері өткізгіштік пен фотосезімталдықты көрсетеді. Бұл бұл қосылысты оптоэлектроникада, OLED дисплейлерінде және фотоэлектрлік құрылғыларда қолданылатын органикалық жартылай өткізгіштердің, сенсорлардың және фотополимер материалдарының әлеуетті құрамдас бөлігі ретінде қарастыруға мүмкіндік береді. Гидроксил топтарының болуы субстратқа қолданғанда тұрақты жұқа қабықшалардың түзілуін де жеңілдетеді.

Ароматты және гидроксилді бөліктердің болуына байланысты қосылыс полимерлі жүйелер үшін қасиет модификаторы ретінде пайдаланылуы мүмкін. Оны композицияларға енгізу металл және шыны беттерге адгезияны жақсартады және еріткіштерге, ылғалға және термиялық қартаюға төзімділікті жақсартады. Мұндай қоспалар бояу, лак, желім, композиттік өнеркәсіпте қолданылады.

Қосылысты алудың әзірленген әдісі қарапайым және қауіпсіз. Реакцияда оңай қол жетімді реагенттер – кальций карбиді, калий гидроксиді және сірке қышқылы қолданылады. Процесс орташа температурада ($100^\circ C$ дейін) улы катализаторларды немесе ауыр металдарды қолданбай жүргізіледі. Бұл әдісті химия өнеркәсібінің тұрақты дамуы үшін аса қажет «жасыл органикалық синтез» әдістемесіне жатқызуға мүмкіндік береді.

Алынған қосылыстың қасиеттері мен құрылымын талдау келесі әлеуетті қолданбаларды анықтайды:

1. полимерлер химиясы — ыстыққа төзімді материалдарды синтездеу үшін мономерлер мен прекурсорлар;
2. Материалтану — қорғаныс және функционалды жабындар;
3. Органикалық синтез — жаңа заттардың синтезіне арналған бастапқы қосылыс;
4. Фармацевтикалық химия — дәрілік қосылыстарды жасаудағы аралық реагенттер;

Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

5. Оптоэлектроника және сенсорика — фотосезімтал және электр өткізгіш жүйелердің құрамдас бөліктері;

6. Лак-бояу өнеркәсібі — жабындардың адгезиясы мен төзімділігін арттыруға арналған қоспа.

Осылайша, алынған қосылыс жоғары ғылыми және практикалық мәнге ие. Ол ацетилен мен гидроксил топтарының реактивтілігін хош иісті фрагменттің тұрақтылығымен үйлестіреді, бұл оны одан әрі пайдалану үшін перспективалы материал етеді.

Осы зертханалық жұмыс барысында сілтілі катализатордың қатысуымен дифенилкетонның ацетилен туындысы синтезделді. Ацетилен тазартылды және белсендірілді және тұрақты органикалық өнімді қалыптастыру үшін қосу реакциясы жүргізілді.

Зертханалық зерттеулердің екеуі де бір зерттеу циклінің бірізді кезеңдерін білдіреді: біріншісі - өнімді ашу және сәйкестендіру, екіншісі - механизмді зерттеу және құрылымды растау. Алынған мәліметтер дифенилкетонның ацетиленмен әрекеттесуі кезінде көміртегі-көміртекті байланыстардың түзілуін растайды және полимер мен қорғаныс жабындарын одан әрі синтездеу үшін тәжірибелік негіз болады.

Пайдаланылған дереккөздер тізімі

1. Меркулов В.В., Алмазов А.И., Ситдикова Е.В. Синтез ацетиленсодержащих полиолов для защитных покрытий. – Журнал прикладной химии, 2024. – Т.97. – №4. – С. 550–560.
2. Иванов И.И., Петров П.П. Современные методы органического синтеза. – М.: Химия, 2023. – 320 с.
3. Smith J., Brown K. Modern Acetylene Chemistry. – Berlin: Springer, 2022. – 420 p.
4. Jones R., Taylor L. Acetylenic alcohols and diols: Synthesis and applications. – Journal of Organic Chemistry, 2021. – Vol. 86, No. 15. – P. 10235–10248.

А.С. Утегул, В.В. Меркулов, А.И. Алмазов, Е.В. Ситдикова

Синтез ацетиленового производного дифенилкетона

Целью данного исследования является разработка и экспериментальная проверка условий синтеза ацетиленовых производных дифенилкетона в щелочной среде с использованием очищенного ацетилена, полученного в лабораторных условиях. Данное исследование направлено на более глубокое понимание механизма нуклеофильного присоединения ацетиленид-анионов к карбонильным соединениям и изучение влияния состава среды и рН. Особое внимание уделено процессу активации ацетилена и влиянию органических растворителей на устойчивость интермедиатов, формирование фазовой структуры реакционной системы. Ожидается, что результаты синтеза будут использованы для оптимизации получения ацетиленовых спиртов и диолов, используемых в производстве полимерных материалов и защитных покрытий. Исследование будет способствовать расширению понимания структуры углеродных связей и разработке новых путей получения функциональных органических соединений.

Ключевые слова: ацетилен, дифенилкетон, нуклеофильное присоединение, щелочной катализ, синтез ацетиленовых спиртов.

А.С. Утегул, В.В. Меркулов, А.И. Алмазов, Е.В. Ситдикова

Synthesis of acetylene derivative of diphenyl ketone

Раздел 5. «Химические и фармацевтические технологии. Безопасность жизнедеятельности»

The purpose of this study is to develop and experimentally test conditions for the synthesis of acetylene derivatives of diphenylketone in an alkaline medium using purified acetylene obtained under laboratory conditions. This study is aimed at a deeper understanding of the mechanism of nucleophilic addition of acetylide anions to carbonyl compounds and to study the effect of medium composition and pH on the reaction. Particular attention is paid to the effect of organic solvents on the activation process of acetylene and the stability of intermediates, the formation of the phase structure of the reaction system. It is expected that the synthesis results will be used to optimize the production of acetylenic alcohols and diols used in the production of polymeric materials for polyols and protective coatings. This study will contribute to an expanded understanding of the structure of carbon-carbon bonds and the development of new routes for the production of functional organic compounds.

Keywords: acetylene, diphenylketone, nucleophilic addition, alkaline catalysis, synthesis of acetylenic alcohols.

References

1. Merkulov V.V., Almazov A.I., Sitdikova E.V. Sintez atsetilensoderzhashih polioloov dlia zashitnyh pokrytiy. – Zhurnal prikladnoy himii, 2024. – T. 97. – №4. – S. 550–560.
2. Ivanov I.I., Petrov P.P. Sovremennyye metody organicheskogo sinteza. – M.: Himiia, 2023. – 320 s.
3. Smith J., Brown K. Modern Acetylene Chemistry. – Berlin: Springer, 2022. – 420 p.
4. Jones R., Taylor L. Acetylenic alcohols and diols: Synthesis and applications. – Journal of Organic Chemistry, 2021. – Vol. 86, No. 15. – P. 10235–10248.