

Alifás diizocianátok és butan-1-ol reakcióinak kinetikai vizsgálata

Kinetic study of the reactions between aliphatic diisocyanates and butan-1-ol

VADKERTI Bence^{1,2}, LAKATOS Csilla¹, ÜNERI Haymana Serra¹,
RÁGYANSZKI Anita³, FARKAS Ödön⁴, JUHÁSZ Anett^{2,5}, ZSUGA Miklós¹,
KÉKI Sándor¹, NAGY Lajos¹

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar Alkalmazott Kémiai
Tanszék, 14032 Debrecen, Egyetem tér 1

²Debreceni Egyetem, Kémia Tudományok Doktori Iskola, 24032, Debrecen, Egyetem tér 1.

³Zuse Institute Berlin, Takustraße 7, 14195 Berlin, Germany

⁴Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémia Intézet, Szerves Kémiai Tanszék, 1518 Budapest

⁵BorsodChem Zrt, 3700 Kazincbarcika, Bolyai tér 1,

ABSTRACT

In this research, the kinetics of reactions between hexamethylene diisocyanate (HDI), 4,4'-dicyclohexyl-methane-diisocyanate (HMDI), and isophorone isocyanate and butan-1-ol were studied by ESI-MS. The reactions were carried in the temperature range of 50 to 80 °C, and 1-butan-d₉-ol was applied as a quenching agent. In order to have a pseudo-first order kinetics, the alcohol component was used in high excess to isocyanate, then pseudo-first order rate constants were determined. The results showed us that reactivity of diisocyanates decreased in the order of HDI > IPDI > HMDI. It was found that the second isocyanate group in HDI reacts faster than the first one, which was explained by formation of intramolecular hydrogen bonds. In the case of HMDI, there was no significant difference between the first and second reacting isocyanate groups.

Keywords: isocyanate, kinetics, urethane, rate constant

ÖSSZEFOGLALÓ

A kutatásban hexametilén-diizocianát (HDI), 4,4'-diciklohexil-metán-diizocianát (HMDI) és izoforon-diizocianát (IPDI) butan-1-ollal történő reakcióinak kinetikai vizsgálatát végeztük el ESI-MS segítségével. A reakciókat 50 és 80 °C között végeztük el, a minták kvencselésére pedig 1-bután-d₉-olt alkalmaztunk. Pseudo-elsőrendű kinetika megteremtése céljából a reakciókban az alkohol komponenst nagy feleslegben használtuk az izocianáthoz képest, ezt követően pedig meghatároztuk a reakciókra jellemző sebességi együtthatókat. A sebességi együtthatók ismeretében felállítottuk a vizsgált izocianát reaktivitási sorát: HDI > IPDI > HMDI. Az eredmények kimutatták, hogy a HDI második izocianátocsoportja reaktívabb volt, mint az első, ami intramolekuláris hidrogénkötéseknek köszönhető. A HMDI esetében a két izocianátocsoport reaktivitása között nem volt számottevő különbség.

Kulcsszavak: izocianát, kinetika, uretán, sebességi együttható

Köszönetnyilvánítás: A tanulmány alapjául szolgáló kutatás a **TKP2021-EGA-20** számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a **TKP2021-EGA** pályázati program finanszírozásában és az **FK 128783** és **FK 132385** pályázatok keretében valósult meg. Továbbá köszönjük a MOL Petrolkémia Zrt. által biztosított anyagi segítséget.