

НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКИЙ ПРОЄКТ «ІЗОМЕРНІ АЛКІЛБЕНЗЕНИ СКЛАДУ $C_{10}H_{14}$ » В ОСВІТНЬОМУ КОМПОНЕНТІ «ОРГАНІЧНА ХІМІЯ»

Карпенко Христина Андріївна

ORCID ID: 0000-0001-6625-4714

викладач кафедри хімії

Український державний університет імені Михайла Драгоманова, Україна

Храновська Тетяна Олександрівна

здобувач першого (бакалаврського) рівня вищої освіти

спеціальності «014.06 Середня освіта (Хімія)»

Український державний університет імені Михайла Драгоманова, Україна

Вдовенко Карина Андріївна

здобувач першого (бакалаврського) рівня вищої освіти

спеціальності «014.06 Середня освіта (Хімія)»

Український державний університет імені Михайла Драгоманова, Україна

Толмачова Валентина Сергіївна

ORCID ID: 0000-0002-4082-3381

кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії

Український державний університет імені Михайла Драгоманова, Україна

Підготовка майбутнього вчителя хімії в Українському державному університеті імені Михайла Драгоманова здійснюється з використанням сучасних інноваційних підходів. Серед них чільне місце належить методу проєктів, який забезпечує розуміння і вивчення хімічних концепцій шляхом виконання творчих, експериментальних завдань та їх практичного застосування у реальних ситуаціях. Метод проєктів спрямований на активне навчання та формування у здобувачів освіти критичного мислення.

Вивчення органічної хімії поєднує теоретичну і практичну складові. Цей освітній компонент представлений аудиторною частиною: лекційними і лабораторними заняттями та самостійною роботою у вигляді виконання індивідуальних завдань комплексного характеру. Проміжний і підсумковий контролю здійснюються у формі модульних контрольних робіт, заліку, екзаменів відповідно. Для самостійного дослідження та вирішення хімічних проблем запропоновано сучасний підхід – метод проєктів.

Під час вивчення модуля «Ароматичні вуглеводні» здобувачам вищої освіти необхідно виконати три індивідуальні проєктні завдання: гомологи бензену, конденсовані ацени, трифенілметанові барвники. Кожне завдання включає наступні етапи: формулювання проблеми, пошук інформації, планування дослідження, проведення експерименту або аналізу наукових літературних джерел та їх поєднання, висновки. Таким чином, для проєкту «Гомологи бензену» була вибрана тема, яка пов'язана з вивченням сполук складу $C_{10}H_{14}$. Обґрунтуванням такого вибору

є широкий спектр їхнього використання.

Сферами застосування ізомерних C_4H_9 -бензенів є використання їх як розчинників для лаків, фарб, клеїв, добавок до палива, пластифікаторів, поверхнево-активних речовин, сировини для виробництва синтетичних каучуків, смол, барвників. Вони містяться в асфальті та нафті. Ізобутилбензен використовують у промисловому виробництві лікарського засобу ібупрофену.

Для алкілбензенів складу $C_{10}H_{14}$ можливі структурні статичні ізомери, будова яких обумовлена конституцією алкільного замісника C_4H_9 (бутилбензен, ізобутилбензен, *втор*-бутилбензен, *трет*-бутилбензен), а також різним взаємним розташуванням алкільних замісників з меншою кількістю атомів Карбону (1-метил-2-пропілбензен, 1-метил-3-пропілбензен, 1-метил-4-пропілбензен; 1-ізопропіл-2-метилбензен, 1-ізопропіл-3-метилбензен, 1-ізопропіл-4-метилбензен; 1,2-діетилбензен, 1,3-діетилбензен, 1,4-діетилбензен; 1-етил-2,3-диметилбензен, 4-етил-1,2-диметилбензен, 1-етил-2,4-диметилбензен, 1-етил-3,4-диметилбензен, 1-етил-3,5-диметилбензен, 2-етил-1,3-диметилбензен, 2-етил-1,4-диметилбензен; 1,2,3,4-тетраметилбензен, 1,2,4,5-тетраметилбензен, 1,2,3,5-тетраметилбензен). Варто зауважити, що *втор*-бутилбензен існує у вигляді двох просторових (конфігураційних) ізомерів *R*- і *S*-енантіомерів.

У контексті дослідження було розглянуто властивості ізомерів на прикладі бутил-, ізобутил-, *втор*-бутил, *трет*-бутилбензенів. Ці сполуки відрізняються за фізичними константами і токсикологічними особливостями, але характеризуються подібними хімічними властивостями. Всі ізомерні сполуки є рідинами з різними запахами. Зазначимо, що в багатьох літературних джерелах наводиться недостовірна інформація щодо деяких фізичних констант цих речовин. Тому, під час виконання проекту використано дані сучасних інформаційних баз PubChem і GESTIS-Stoffdatenbank [1,2].

Згідно з вищенаведеними літературними джерелами в межах ряду ізомерних сполук складу $C_{10}H_{14}$ фізичні властивості змінюються наступним чином:

Таблиця 1.

Фізичні характеристики ізомерних C_4H_9 -бензенів

	$T_{\text{кип.}}, ^\circ\text{C}$	$T_{\text{плав.}}, ^\circ\text{C}$	$T_{\text{самозаймання}}, ^\circ\text{C}$	$\rho, \text{г/см}^3$ (20°C)	Розчинність у воді, г/л (25°C)	Нижня/ верхня межа вибуховості
Бутилбензен	183,3	-87,9	410	0,8601	0,0118	44 г/м ³ ; 0,8 % за об'ємом / 330 г/м ³ ; 5,8 % за об'ємом
Ізобутилбензен	173	-51	425	0,8530	0,01	44 г/м ³ ; 0,8 % за об'ємом / 335 г/м ³ ; 6 % за об'ємом
<i>втор</i> - Бутилбензен	173,5	-82,7	415	0,8580	0,0176	44 г/м ³ ; 0,8 % за об'ємом / 385 г/м ³ ; 6,9 % за об'ємом
<i>трет</i> - Бутилбензен	169,1	-57,8	450	0,8669	0,0295	44 г/м ³ ; 0,8 % за об'ємом / 310 г/м ³ ; 5,6 % за об'ємом

На сьогодні описано токсикологічні та екотоксикологічні характеристики ізомерних C_4H_9 -бензенів. Ці сполуки спричиняють подразнення слизових оболонок і шкіри, а їхні високі концентрації призводять до розладів центральної нервової

системи. Одержано результати про їхню гостру і хронічну токсичність, але, на жаль, відсутня інформація про репродуктивну токсичність, мутагенність і канцерогенність [3]. Так відомо, що для *втор*-бутилбензену LD_{50} (орально, щур) = 1930 мг/кг; LD_{50} (дермально, кролик) > 13800 мг/кг. Для ізобутилбензену LD_{50} (дермально, щур) > 2000 мг/кг; LD_{50} (інгалаційно, щур) = 4600 мг/кг; LD_{50} (перорально, щур) = 3321 мг/кг. Для *трет*-бутилбензену LD_{50} (орально, щур) = 3050 мг/кг; LD_{50} (інгалаційно, щур) = 4600 мг/кг. Для бутилбензену LD_{50} (перорально, щур) = 5000 мг/кг.

Вивчався вплив вуглеводнів, в тому числі, гомологів бензену на прикладі бутилбензену, на утворення активних форм кисню у нейтрофільних гранулоцитах людини *in vitro* [4]. Встановлено, що вуглеводні індукують утворення активних форм кисню в залежності від концентрації і збільшення числа атомів Карбону у структурі молекули. Виявлено, що ароматичні вуглеводні є менш потужними індукторами активних форм кисню.

Дослідження метаболізму ізомерних алкілбензенів свідчить про те, що вони метаболізуються переважно через окиснювальні реакції бічного ланцюга до спиртів і кетонів та реакції кон'югації [5]. Продукти метаболізму виводяться із сечею. Так, для бутилбензену 40-60% введеної дози було виявлено у сечі у вигляді глюкуронідних кон'югатів спиртів, 15-25% у вигляді фенілацетилгліцину, 2% – гіпурової кислоти [6]. Також можливе гідроксилювання ароматичного кільця.

Зазначається, що для алкілбензенів небезпечними хімічними реакціями є взаємодія із окисниками, озоном, нітрувальною сумішшю, олеумом. Клас зберігання цих речовин – 3 (займисті рідкі речовини). Забороняється розміщувати їх поруч з ліками, харчовими продуктами, кормами, інфекційними, радіоактивними та вибуховими речовинами, газами, вибуховими речовинами (клас зберігання 4.1A), легкозаймистими твердими речовинами або десенсибілізованими речовинами (клас зберігання 4.1B), пірофорними речовинами, речовинами, що виділяють легкозаймисті гази під час контакту з водою, речовинами з сильним окиснювальним ефектом (клас зберігання 5.1A і 5.1B), амоніачною селітрою, органічними пероксидами та самореактивними речовинами, горючими твердими речовинами (клас зберігання 11) [2].

Згідно з системою GHS (Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals, Узгоджена на глобальному рівні система класифікації та маркування хімічних речовин (УГС)) для всіх ізомерних C_4H_9 -бензенів характерні піктограми, які означають належність до легкозаймистих рідин; вони є небезпечними для довкілля, а також для здоров'я людини, за винятком, ізобутилбутилбензену.

Таблиця 2.

Піктограми за GHS-системою ізомерних C_4H_9 -бензенів

Легкозаймисті речовини	Небезпечно для навколишнього середовища та водних організмів	Небезпечно, обережно	Небезпечно для здоров'я людини
			
Бутилбензен Ізобутилбензен <i>втор</i> -Бутилбензен <i>трет</i> -Бутилбензен	Бутилбензен Ізобутилбензен <i>втор</i> -Бутилбензен <i>трет</i> -Бутилбензен	Бутилбензен Ізобутилбензен <i>втор</i> -Бутилбензен <i>трет</i> -Бутилбензен	Бутилбензен <i>втор</i> -Бутилбензен <i>трет</i> -Бутилбензен

Таблиця 3.

Н-фрази за GHS-системою ізомерних C₄H₉-бензенів

Бутилбензен	H226, H304, H315, H319, H400, H410
Ізобутилбензен	H226, H315, H319, H335, H336, H400, H410
втор-Бутилбензен	H226, H304, H315, H319, H411
трет-Бутилбензен	H226, H304, H315, H319, H332, H411

Таблиця 4.

Н-фрази небезпек за GHS-системою ізомерних C₄H₉-бензенів

H226	Легкозаймиста рідина та її пара
H304	Може бути смертельним у разі проковтування та потрапляння в дихальні шляхи
H315	Викликає подразнення шкіри
H319	Викликає серйозне подразнення очей
H332	Шкідливий під вдихання
H335	Може викликати подразнення дихальних шляхів
H336	Може викликати сонливість або запаморочення
H400	Дуже токсичний для водних організмів
H410	Дуже токсичний для водних організмів з довготривалими наслідками
H411	Токсичний для водних організмів з довгостроковими наслідками

Важливо вказати, що такі сполуки стійкі до розкладу у ґрунтах, не піддаються гідролізу у навколишньому середовищі через відсутність гідролізованих характеристичних груп, здатні адсорбуватися на твердих речовинах і осадах у водному середовищі, мають високий потенціал біоконцентрації у водних організмах. У атмосфері ізомери здатні розкладатися шляхом реакції з фотохімічно утвореними гідроксильними радикалами.

Виробництво та використання ізомерних C₄H₉-бензенів призводить до їх викидів у навколишнє середовище. Встановлено, що ці сполуки можуть потрапляти до деяких продуктів харчування і спричиняти їхнє забруднення [1].

Таким чином, виконання науково-дослідницького проєкту дозволило більш детально ознайомитися з характеристиками ізомерних C₄H₉-бензенів та порівняти їх. Показано, що особливої уваги на сьогодні потребує досконале вивчення їх токсикологічних властивостей.

Список використаних джерел:

1. PubChem. National library of medicine <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.
2. GESTIS-Stoffdatenbank <https://gestis.dguv.de/data?name=020300>.
3. ChemSpider Search and share chemistry <https://www.chemspider.com/Chemical-Structure.10410.html>.
4. Dreiem A et al; Toxicol Appl Pharmacol 190 (2): 102-10 (2003).
5. Bingham, E.; Cohrssen, B.; Powell, C.H.; Patty's Toxicology Volumes 1-9 5th ed. John Wiley & Sons. New York, N.Y. (2001)., p. V4 287.
6. DFG German Research Foundation: The MAK Collection for Occupational Health and Safety <https://series.publisso.de/en/pgseries/overview/mak/dam/allContents/alphabetical>.