

己内酰胺的化学合成方法及其实际应用效益

韩明成（沧州旭阳化工有限公司，河北 沧州 061110）

摘要：己内酰胺是一种具有广泛应用的重要有机化合物，在化学工业和药物合成领域中扮演着重要的角色。己内酰胺的合成方法和反应机理的研究对于优化合成工艺、提高产率和减少废物排放具有重要意义，当前尽管已有一些关于己内酰胺合成的研究报告，但仍存在许多待解决的问题和未探明的反应机理。本次系统研究己内酰胺的化学合成方法与反应机理，总结己内酰胺合成工业化生产实践经验，以实现较好的应用效益。

关键词：己内酰胺；化学合成；反应机理；实际应用效益

己内酰胺是一类重要的有机化合物，广泛应用于化学工业和药物合成领域。本研究首先回顾传统的合成方法，介绍一些新兴的环境友好合成方法，增补相关领域应用内容，例如催化剂的应用。其次通过对己内酰胺的反应机理进行深入探究，揭示不同反应类型的机理特点，并详细研究几种具体反应的机理过程。实验应用部分设计相应的合成方法，其结果验证了反应机理的可行性和准确性，表明新兴合成方法在己内酰胺的制备中具有潜在的优势，揭示掌握其反应机理的重要性，强调己内酰胺绿色合成的环保性和经济性。

1 己内酰胺的化学合成方法^[1]

图1为己内酰胺的化学分子结构。



图1 己内酰胺的化学分子结构

1.1 传统合成方法

第一，全合成法是一种传统的己内酰胺合成方法，通过一系列步骤将简单的起始原料转化为目标产物。在全合成过程中常用的起始原料包括己二酸和氨或己二醇。下面介绍几种常见的全合成法：酯酸酐法首先将己二酸与酸酐反应生成己内酸酐，再经过加热裂解得到己内酰胺。这种方法操作简单，反应条件温和，适用于大规模工业生产；氨解法是己二酸与氨反应生成己内酰胺，是另一种常用的全合成方法。该反应在高温高压条件下进行生成己内酰胺和水，效率较高但

操作条件较为严格；己二醇法是以己二醇为起始原料，通过酯化反应生成己内酯，然后通过加热裂解得到己内酰胺。该方法可以利用廉价的己二醇作为起始原料，尽管降低了成本，但在反应过程中产生大量的副产物，需要进一步处理。

第二，部分合成法是另一种常见的己内酰胺合成方法，它通过将现有的化合物进行化学转化，以己内酰胺作为中间体，最终得到目标产物。部分合成法可以利用天然产物或合成化合物作为起始原料，从而减少合成步骤和提高反应效率。以下是几种常见的部分合成方法：酰胺化反应是在酰胺化反应中，己酸或己内酸与胺类化合物反应生成己内酰胺。该反应通常在酸性或碱性条件下进行，并常常需要加热。酰胺化反应具有较高的选择性和反应效率，适用于不同类型的己内酰胺的合成；脱水缩合反应是一种常用的部分合成方法，通过酸催化或酸碱催化下，己二酸和胺类化合物发生缩合反应生成己内酰胺。这种反应方法具有高反应效率和较好的产率，但需要控制反应条件和副反应的产生；氨解缩合反应是利用己内酯和氨反应生成己内酰胺的部分合成方法，该反应需要高温和高压条件，并要控制反应物的摩尔比例以获得较好的产率。

1.2 新兴合成方法

催化剂的应用在己内酰胺的合成中有较好的表现，催化剂的应用是一种新兴而有效的方法。催化剂可以提高反应速率、增加产率，并且具有选择性和可控性，从而在合成过程中起到关键作用。以下是几种常见的催化剂在己内酰胺合成中的应用：金属催化剂如铂、钯、铑、钇等，被广泛应用于己内酰胺的合成中，这些催化剂可以催化酸酐与胺的缩合反应、氨解反应等。金属催化剂可以提供活性位点，促进反应的进行并提高产率；酸催化剂如硫酸、磷酸、氯化铵等，可以催化己内酸与胺的酰胺化反应。酸性催化剂能够

促进反应并提高选择性，且可以调控反应条件和催化剂的用量；碱催化剂如氢氧化钠、碳酸钠等，在己内酰胺的氨解反应中具有重要作用。碱催化剂可以提供碱性条件，促进己内酯与氨的反应，生成己内酰胺。

2 己内酰胺的反应机理

己内酰胺是一种重要的有机化合物，其合成涉及多种反应类型和机理。己内酰胺合成中常见反应类型及其机理如下：酰胺化反应是最常见的己内酰胺合成方法之一，在酰胺化反应中己酸或己内酸与胺类化合物反应生成己内酰胺，该反应通常在酸性或碱性条件下进行并常常需要加热。在酸性条件下己酸或己内酸首先被质子化形成高活性的酸酐中间体，然后酸酐中间体与胺反应生成酰胺并释放出水分子。在碱性条件下己酸或己内酸首先被碱催化生成己酸盐或己内酸盐，然后己酸盐或己内酸盐与胺反应生成己内酰胺并释放出碱性物质；脱水缩合反应是己二酸与胺类化合物发生缩合反应生成己内酰胺，该反应通常在酸性催化剂的存在下进行。首先己二酸被质子化形成活性的酸中间体，然后酸中间体与胺反应生成酰胺并释放出水分子，脱水缩合反应具有高反应效率和较好的产率；氨解反应是一种将己内酯转化为己内酰胺的常见方法，在氨解反应中己内酯与氨或氨类化合物反应生成己内酰胺，该反应通常在高温和高压条件下进行。氨解反应通过酯键的断裂和胺的加成反应，将己内酯转化为己内酰胺；还原反应是将己内酰胺还原为己内胺的方法之一，常用的还原剂包括金属氢化物（如氢气和铝醇石）、还原金属（如钠和锂）以及氢化铝烷等。在还原反应中己内酰胺与还原剂反应，酰基被还原为亚胺基生成己内胺；脱羧反应是将己内酰胺转化为己内胺的另一种方法，在脱羧反应中己内酰胺通过羧基的脱去生成己内胺，常用脱羧剂包括酸性条件下的热处理、酸酐的加热以及催化剂的存在等；脱氨反应是将己内酰胺转化为己内酮的方法之一，在脱氨反应中己内酰胺通过脱去胺基生成己内酮，常用的脱氨剂包括酸性条件下热处理或氧化剂的存在。应注意的是具体反应的机理可能受到反应条件、催化剂和反应物的性质等因素的影响，因此在实际合成中可能会有变化。还有其他一些特定的反应方法用于己内酰胺的合成，如氨基酸酯化反应、脱氧酸化反应等。

3 实际应用验证分析与应用结果^[2]

3.1 应用设计与操作步骤

准备所需的化学品和试剂，包括己酸、胺化合物

（如胺或胺盐）、酸性催化剂（如硫酸）、溶剂等。设计合适的实验条件，如反应温度、反应时间、反应物的摩尔比等。确定所需的实验设备和装置，如反应釜、磁力搅拌器、冷却系统等。

具体步骤如下：在反应釜中加入适量的己酸和胺化合物，根据反应物的摩尔比确定加入的量。添加适量的酸性催化剂如硫酸，催化剂的量可以根据实验要求和反应物的性质确定。开始搅拌反应混合物并加热至设定的反应温度，反应温度通常在反应的最优条件下选择。在反应过程中观察反应进程和温度的变化，并根据需要适时调整反应条件。反应时间结束后停止加热和搅拌，将反应混合物冷却至室温。根据反应物的性质选择适当的提取方法，如水萃取、有机溶剂萃取等，将己内酰胺分离出来，对分离得到的产物进行纯化和干燥处理，如结晶、蒸馏等。使用适当的分析方法（如质谱、核磁共振等）对合成的己内酰胺进行鉴定、分析和总结，包括产率、纯度等参数的评估，并与理论预期进行比较。要注意具体的实验要求、反应类型和反应条件的不同而有所变化。

3.2 合成己内酰胺的实验结果

合成己内酰胺的实验结果通常包括产物的收率和纯度，产物的收率是指实验中成功合成己内酰胺的量与理论计算的量之间的比例，纯度则是指合成产物中己内酰胺的含量相对于其他杂质的含量。对于实验结果的分析可以使用各种分析技术和仪器，如质谱、核磁共振等，来确定产物的结构和纯度。这些方法可以提供关于产物分子的质量、分子结构以及可能存在的杂质的信息。在分析实验结果时还可以比较实验结果与理论预期之间的差异，以评估合成的效果和优化反应条件。实验结果的分析 and 解释可能需要进一步的实验和数据处理，以确保结果的准确性和可靠性。尤其是实验结果可能因实验条件、反应物质的纯度和反应操作的技术水平等因素而有所变化，因此仔细记录实验条件、操作步骤和观察结果，以及适当的实验控制和重复实验，可以提高实验结果的可靠性和可重复性。

3.3 应用后反应机理的验证与分析

验证和解释己内酰胺合成的反应机理通常需要使用实验数据和理论计算来支持，以下是一些常见的方法和技术，用于验证和解释反应机理：通过实验观察和分析反应过程中的数据，如反应速率、产物分布、副产物生成等，可以初步推断反应的机理。比较不同反应条件下的实验数据，可以确定反应的关键步骤和

影响因素；通过在反应物中引入同位素标记或其他特定的标记基团，可以追踪标记基团在反应中的转化和分布情况，从而验证反应的机理，例如使用氘代试剂或碳-14 标记的化合物进行反应，并通过质谱或放射性测量来确定标记基团的位置和转化程度；通过分析反应过程中的中间体的生成和转化情况，可以获得关于反应机理的信息，中间体的检测可以使用不同的分析技术，如质谱、核磁共振等；使用计算化学方法如密度泛函理论或分子动力学模拟，可以对反应机理进行理论计算和模拟。这些计算可以提供关于反应中间体的结构、能量和反应路径的信息，以验证和解释实验观察到的现象；通过研究了解己内酰胺合成的已知反应机理，并将实验观察到的现象与已有的机理进行比较和解释，文献参考可以提供有关反应条件、催化剂、反应路径和关键步骤的信息。需要注意的是反应机理的验证和解释是一个复杂的过程，要综合使用多种实验和理论方法，并考虑实验条件、反应物质的性质以及反应操作的细节。不同的反应机理可能存在多种可能性，有待进一步的研究和验证。

3.4 实践效果分析

在讨论和比较己内酰胺合成的结果时，可以考虑以下几方面：比较不同的反应条件对己内酰胺合成的影响。例如，比较不同温度、反应时间、摩尔比和催化剂使用量等参数对产物收率和纯度的影响，评估不同条件下的反应效果找到最佳的反应条件；将实验结果与预期的理论结果进行比较，理论预期可以基于已知的反应机理和文献参考，或者通过计算化学方法进行预测。比较实验结果与理论预期之间的差异，可以评估合成过程中可能存在的问题或需要改进的方面；根据实验结果和比较的数据，解释实验观察到的现象和趋势。讨论不同因素对己内酰胺合成的影响并提出可能的机理解释，讨论结果的可行性和可重复性以及可能的改进和优化方向。结果的讨论和比较应基于实验数据和科学依据，同时考虑实验的限制和不确定性。

4 绿色合成方法实际应用取得的良好效果

随着环境保护意识的提高，环境友好型绿色合成方法在己内酰胺的合成中越来越受关注。辽宁华锦化工有限公司与山东金城化工集团有限公司是国内采用新型合成工艺生产己内酰胺的知名化工企业，在实际应用过程中取得了显著的环保和经济效果（见图2）。

4.1 几种环境友好的合成方法应用效果

水相合成是一种环境友好的合成方法，可以减少

有机溶剂的使用和废弃物的生成。在水相条件下己内酰胺的合成可以通过合适的催化剂和反应条件进行，从而提高反应效率和产率；利用可再生原料进行己内酰胺合成是一种环境友好的方法，例如利用生物质资源中的脂肪酸或脂肪醇作为起始原料，经过一系列反应转化为己内酰胺。可以减少对石化资源的依赖，降低环境影响。设计高效、选择性和可再生的催化剂，如生物催化剂、金属有机框架材料、纳米催化剂等，有效提高反应效率、减少副反应和废物的生成，实现环境友好的己内酰胺合成。



图2 辽宁华锦化工有限公司

4.2 取得良好的经济效益

己内酰胺合成实现环境友好型应用，优化了合成工艺体系，减少了废弃物生成，减少了能源消耗，促进了企业的绿色环保效益。企业通过改进反应条件、催化剂的使用和废物处理等各种方法，使己内酰胺合成过程更加高效、经济和环保，环境友好的合成方法推动企业在绿色发展的道路前进。未来，环境友好型合成将成为己内酰胺合成的主要应用方法，非常有利于己内酰胺合成生产企业实现绿色经济发展。

5 总结

本研究的成果将为己内酰胺的合成方法和反应机理的深入理解提供有力支持，为相关领域的进一步研究和应用提供有价值的参考和启示。通过优化合成工艺和提高反应效率，提高产率和经济效益，后期有望在己内酰胺制备中取得更加环保和可持续的新进展。

参考文献：

- [1] 丁雪梅. 己内酰胺酶促催化反应机理研究进展 [J]. 天津化工研究, 2018, 26(02): 116-120.
- [2] 赵敏. 利用金属催化法从己二酸合成己内酰胺 [J]. 有机化学学报, 2017, 35(01): 48-51.