

УДК. 547:284.312.362.384

**Солиев Махаммаджон Исматуллаевич**

Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси ўқитувчиси

**Нурмонов Сувонқул Эрхонович**

ЎзМУ Умумий ва ноорганик кимё кафедраси мудир, техника фанлари  
доктори, профессор

**Абидов Иброҳимжон**

Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси доценти

## **1-ФЕНИЛ-2-ГЕПТИЛОКСИЭТИЛЕН СИНТЕЗИ ЖАРАЁНИНИ МАТЕМАТИК МОДЕЛЛАШТИРИШ**

### **Аннотация**

*Ушбу ишда гептил спиртининг фенилацетилен билан виниллаш реакциясига ҳароратнинг таъсири амалий ва назарий йўллар билан ўрганилган, натижалар таққосланган ҳамда жараённинг оптимал шароитлари аниқланган.*

***Таянч сўзлар:** гептил спирти, фенилацетилен, виниллаш реакцияси, эритувчи, катализатор, винил эфирлари, юқори асосли система, 1-фенил-2-гептилоксиэтилен, диметилсульфоксид, диметилформамид.*

## **МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА 1- ФЕНИЛ-2-ГЕПТИЛОКСИЭТИЛЕНА**

### **Аннотация**

*В работе исследовано влияние температуры при реакциях винилирования гептилового спиртов с фенилацетиленами, с*

экспериментальными и теоретическими путями, полученные результаты сопоставлено. Найдено оптимальное условие процесса.

**Ключевые слова:** гептиловый спирт, фенилацетилен, реакция винилирования, растворитель, катализатор, виниловые эфиры, высокоосновная система, 1-фенил-2-гептилоксиэтилен, диметилсульфоксид (ДМСО), диметилформамид (ДМФА).

## MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESSES OF SYNTHESIS OF 1-PHENYL-2-HEPTYLOXYETILENE

### Abstract

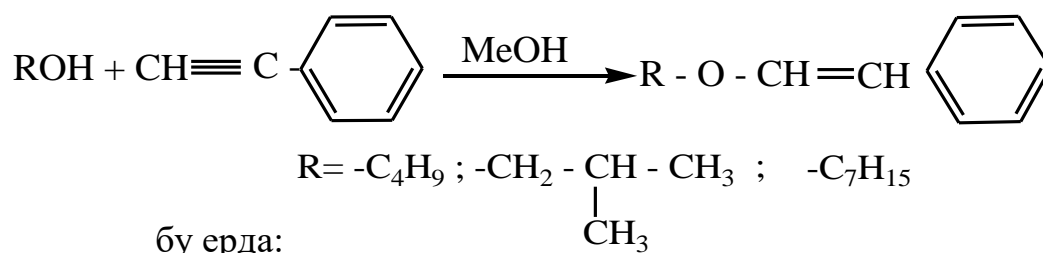
*The influence of temperature in the reactions of vinylation of heptyl alcohols with phenylacetylenes, with experimental and theoretical paths, was compared. The optimum condition of the process is found.*

**Key words:** *heptyl alcohol, phenylacetylene, vinylation reaction, solvent, catalyst, vinyl ethers, highly basic system, 1-phenyl-2-heptyloxyethylene, dimethylsulfoxide (DMSO), dimethylformamide (DMF).*

Жараёнлар, жумладан кимёвий жараёнлар ҳам маълум бир қонуният асосида кетади. Жараённинг моҳиятини чуқур таҳлил қилган ҳолда, тажриба олиб бормасдан ҳам маълум ҳисоблашлар ёрдамида тажриба натижаларининг таҳминий натижаларига эришиш мумкин. Бунинг учун жараённи аниқ математик ифодасини тузиш керак бўлади ва бу математик тенгламанинг ечими эса тажриба натижаларига мос келиши лозим. Буни фан тилида *математик моделлаштириш* дейилади [1].

Фенилацетилен ацетиленнинг энг етарли ҳосиласи ҳисобланади. Уни нефтнинг каталитик дегидрирлаш компоненти бўлган этилбензолдан синтезлаш мумкин. Шунингдек, уни стиролни бромлаб, сўнгра дегидробромлаб ҳам катта миқдорда олиш мумкин [2]. Шундан келиб чиқиб, айрим алифатик спиртларни гомоген-каталитик усулда юқори асосли система

(MeOH-DMCO, MeOH-DMФА) иштирокида фенилацетилен билан виниллаш тадқиқ қилинган [3]. Бунда тегишли спиртдан 2-фенилвинил эфир қуйидаги схема бўйича ҳосил бўлади:



Катализатор сифатида Li, Na ва K гидроксидларидан фойдаланилади. Ушбу системанинг танланишига сабаб – спиртларнинг винилланиши учун ишқорий муҳит талаб этилади. DMCO, DMФА ва бошқа кутбли эритувчилар эритмаларида ишқорлар юқори асосли системани ҳосил қилади ва ишқорнинг асослилиги бир неча марта (7 мартагача) ортади [4].

Ҳозирда кимёвий жараёнларни математик моделлаштиришда компютер технологиялари дастурларидан кенг фойдаланилиб келинмоқда. Биз тажриба жараёнларини математик моделлаштиришда MathCad дастуридан фойдаландик.

Ҳисоблашлар чизиқли регрессия усули билан тажрибавий-статистик моделлаштириш асосида амалга оширилди. Бунда регрессия эгри чизиғи кўринишига қараб боғлиқлик тенгламаси танланди ва тенглама коэффицентини топиш учун «энг кичик квадратлар усули» қўлланди [1].

Виниллаш жараёнидан олинган натижаларни таҳлил қилиб, математик кўринишини қуйидагича ифодалаш мумкин.

$$y = A \cdot t^3 + b \cdot t^2 + c \cdot t + d \quad (1)$$

Бу ерда: y- маҳсулот унуми; t- температура; a, b, c, d- аналитик боғлиқликда иштирок этувчи аниқловчи коэффицентлар.

Бу тенгламани келтириб чиқариш эса қуйидагича амалга оширилади;

$$\begin{aligned}
2\sum_{i=1}^{13}[y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i^3) &= 0 \\
2\sum_{i=1}^{13}[y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i^2) &= 0 \\
2\sum_{i=1}^{13}[y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i) &= 0 \\
2\sum_{i=1}^{13}[y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-1) &= 0
\end{aligned} \tag{2}$$

Бу тенгламани яна ҳам қулай кўринишга келтириш мумкин;

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{13} t_i^6 a + \sum_{i=1}^{13} t_i^5 b + \sum_{i=1}^{13} t_i^4 c + \sum_{i=1}^{13} t_i^3 d &= \sum_{i=1}^n y_i t_i^3 \\
\sum_{i=1}^{13} t_i^5 a + \sum_{i=1}^{13} t_i^4 b + \sum_{i=1}^{13} t_i^3 c + \sum_{i=1}^{13} t_i^2 d &= \sum_{i=1}^n y_i t_i^2 \\
\sum_{i=1}^{13} t_i^4 a + \sum_{i=1}^{13} t_i^3 b + \sum_{i=1}^{13} t_i^2 c + \sum_{i=1}^{13} t_i d &= \sum_{i=1}^n y_i t_i \\
\sum_{i=1}^{13} t_i^3 a + \sum_{i=1}^{13} t_i^2 b + \sum_{i=1}^{13} t_i c + nd &= \sum_{i=1}^{13} y_i
\end{aligned} \tag{3}$$

Бу ерда келтирилган  $n$  ўтказилган тажрибалар сони.

$$E(a, b, c, d) = \sum_{i=1}^{13} [y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]^2 = \min \tag{4}$$

$a, b, c, d$  лар бўйича  $E(a, b, c, d)$  ни хусусий тенгламасини келтириб чиқарамиз;

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial a} &= 2\sum_{i=1}^{13} [y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i^3) \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial b} &= 2\sum_{i=1}^{13} [y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i^2) \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial c} &= 2\sum_{i=1}^{13} [y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-t_i) \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial d} &= 2\sum_{i=1}^{13} [y_i - at_i^3 - bt_i^2 - ct_i - d]x(-1)
\end{aligned} \tag{5}$$

Бундан функцияни нолга тенг деб қабул қилинади.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial a} &= 0 \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial b} &= 0 \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial c} &= 0 \\
\frac{\partial E(a, b, c, d)}{\partial d} &= 0
\end{aligned} \tag{6}$$

Ҳисоблаш амалларини қулайликка келтириш учун  $i$ - тажрибалар сонига мос келувчи температураларни ( $t_i$ ) қуйидаги кўринишга олиб келамиз;

$$t_i^1 = \frac{t_i}{10} \quad (7)$$

Бундан эса юқоридаги (1) тенглама келиб чиқади;

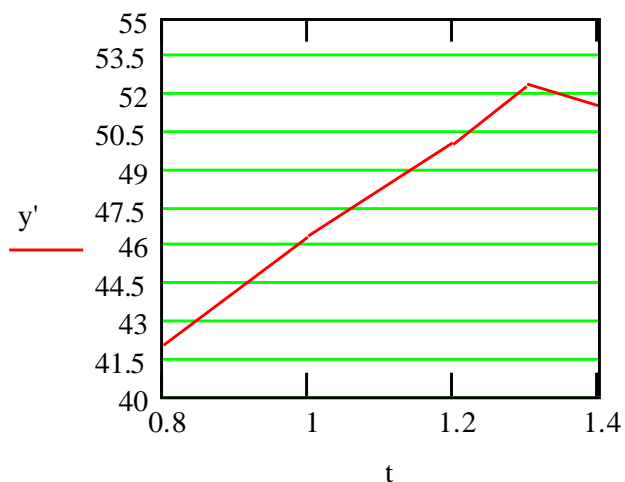
$$y = at^3 + bt^2 + ct + d \quad (1)$$

*1-жадвал*

**1-фенил-2-гептилоксиэтилен унумининг температурага боғлиқлиги  
(4 соатда)**

Температура, °С.	1-фенил-2-бутилоксиэтилен унуми %.
80	42,1
100	46,4
120	50,0
130	52,4
140	51,6

Унумнинг температурага боғлиқлиги эса қуйидаги графикда ўз аксини топган (1-расм).



1-Расм. Маҳсулот унумининг ҳароратга боғлиқлиги (тажриба).

Математик қайта ишлаш учун MathCad дастурининг ишчи майдонида куйидаги кетма-кетликда амалларни ёзиб оламиз:

$$\text{ORIGIN} := 1 \quad y(t) := A_1 \cdot t^3 + A_2 \cdot t^2 + A_3 \cdot t + A_4$$

Сўнгра тажрибада олинган қийматларни тегишлича киритамиз:

$$t := \begin{pmatrix} 8 \\ 10 \\ 12 \\ 13 \\ 14 \end{pmatrix} \quad y := \begin{pmatrix} 42.1 \\ 46.4 \\ 50.0 \\ 52.4 \\ 51.6 \end{pmatrix}$$

Ҳисоблашни осонлаштириш учун температуранинг қийматини куйидагича 10 га бўлиб оламиз:

$$t := \frac{t}{10} \quad t = \begin{pmatrix} 0.8 \\ 1 \\ 1.2 \\ 1.3 \\ 1.4 \end{pmatrix}$$

Шундан сўнг ушбу кўринишдаги тенгламани ишчи майдонда тузиб чиқамиз:

$$\begin{array}{cccc} u_{1,1} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^6 & u_{1,2} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^5 & u_{1,3} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^4 & u_{1,4} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^3 \\ u_{2,1} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^5 & u_{2,2} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^4 & u_{2,3} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^3 & u_{2,4} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^2 \\ u_{3,1} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^4 & u_{3,2} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^3 & u_{3,3} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^2 & u_{3,4} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^1 \\ u_{4,1} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^3 & u_{4,2} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^2 & u_{4,3} := \sum_{i=1}^5 (t_i)^1 & u_{4,4} := 5 \\ v_1 := \sum_{i=1}^5 y_i \cdot (t_i)^3 & v_2 := \sum_{i=1}^5 y_i \cdot (t_i)^2 & v_3 := \sum_{i=1}^5 y_i \cdot (t_i)^1 & v_4 := \sum_{i=1}^5 y_i \end{array}$$

Энди ҳисоблашни дастур автоматик равишда амалга оширади. Бунинг учун клавиатурадаги “=” (тенглик) белгиси тугмасидан фойдаланилади ва куйидаги қийматлар келиб чиқади:

$$v = \begin{pmatrix} 411.068 \\ 335.036 \\ 280.44 \\ 242.5 \end{pmatrix} \quad u^T = \begin{pmatrix} 16.604 & 12.907 & 10.181 & 8.181 \\ 12.907 & 10.181 & 8.181 & 6.73 \\ 10.181 & 8.181 & 6.73 & 5.7 \\ 8.181 & 6.73 & 5.7 & 5 \end{pmatrix}$$

Анинг қийматлари ҳам топилади:

$$A := u^{-1} \cdot v \quad y(t) := A_1 \cdot t^3 + A_2 \cdot t^2 + A_3 \cdot t + A_4 \quad A = \begin{pmatrix} -71.601 \\ 218.454 \\ -198.156 \\ 97.512 \end{pmatrix}$$

Тенглама бўйича  $t_i$  га мос келувчи  $y_i$  қийматлари қуйидагича бўлади (2-жадвал):

*2-жадвал*

**Мос температурадаги ҳисобланган маҳсулот унуми %.**

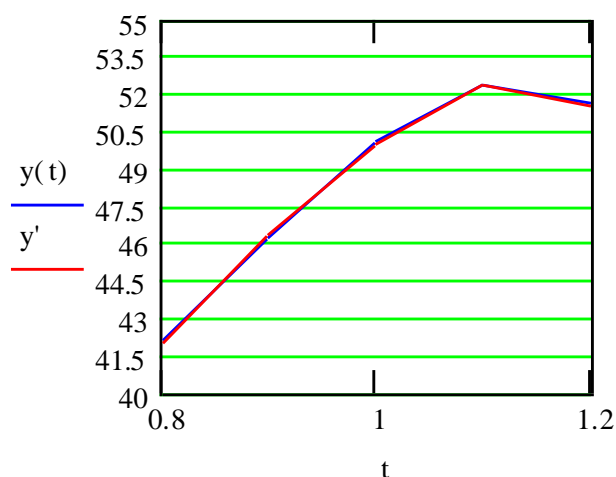
Температура, °С	Ҳисобланган маҳсулот унуми %.
80	42,1
100	46,4
120	50,0
130	52,4
140	51,6

*3-жадвал*

**Тажрибада ва математик ҳисоблаш натижалари.**

Температура, 0С.	Маҳсулот унуми , %	
	тажрибада	ҳисобланган
80	42,1	42,1
100	46,4	46,4
120	50,0	50,0
130	52,4	52,4
140	51,6	51,6

Бунинг графикдаги кўриниши қуйидагича (2-расм)\*:



2-расм. Маҳсулот унумининг ҳароратга боғлиқлиги:

қизил чизиқ – тажриба; кўк чизиқ – ҳисоблаш натижаси асосида.

Тажриба ва ҳисоблаш натижаларидан кўришиб турибдики, гептил спирти ва фенилацетилен асосида эфир синтез қилиш жараёнида реакция унумига ҳароратнинг таъсирини математик моделлаштириш орқали ишончли тарзда ҳисоблаб топиш мумкин.

Хулоса қилиб айтганда, математик моделлаштириш жараён олиб борилмасдан ҳам шу жараённинг натижаларини ҳисоблаб чиқиш имконини беради.

### Адабиётлар

1. Пушкарева Т.П., Перегудов А.В. Математическое моделирование химических процессов: учебное пособие / Краснояр. гос. пед. ун-т им. В.П. Астафьева. Изд. 2-е стереотип. – Красноярск, 2013. – 116 с.
2. Б. А. Трофимов [и др.]. Суперосновная система CsOH/DMCO как катализатор нуклеофильного присоединения ацетофенона к фенилацетилену.// Журнал общей химии. - 2010. - Т. 80, вып. 7. - С. 1219-1220. - Библиогр.: с. 1220 .
3. Сорока Л. С. Промышленная органическая химия. Основной органический синтез: учебное пособие для вузов / Л. С. Сорока, Т. Н. Волгина; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во ТПУ, 2006. – 163 с.



4. Трофимов Б. А. Суперосновные катализаторы и реагенты: концепция, применение, перспективы/ Б. А. Трофимов// Современные проблемы органической химии. – 2004. – вып. 14. – С. 131–175.

5. Солиев М.И. Винил эфирлар синтези жараёнини математик моделлаштириш. Магистр академик даражасини олиш учун ёзилган диссертация иши. ЎзМУ. Тошкент. 2014. -84 бет.

# 1-ФЕНИЛ-2-ГЕПТИЛОКСИЭТИЛЕН СИНТЕЗИ ЖАРАЁНИНИ МАТЕМАТИК МОДЕЛЛАШТИРИШ

**мавзусидаги мақола муаллифлари ҳақида маълумот:**

1. Солиев, Муҳаммаджон Исматуллаевич. Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси ассистенти.  
**Тел.:** 93-925 50 72. **e-mail:** muhammadbey@umail.uz.
2. Нурмонов, Сувонқул Эрхонович. Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети Умумий ва ноорганик кимё кафедраси мудири, техника фанлари доктори, профессор. **Тел.:** 93-552 15 68. **e-mail:** nurmonov\_se@mail.ru.
3. Абидов, Иброҳимжон. Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси доценти.