

UOT 547.56:541.64

2-PROPENİLFENOLUN HEKSEN-1-LƏ ALKİLLƏŞMƏ PROSESİNİN OPTİMALLAŞDIRILMASI

**M.R.BAYRAMOV, V.M.FƏRZƏLİYEV, F.V.YUSUBOV,
M.Ə.CAVADOV, N.Y.ZEYNALOV, Z.M.CAVADOVA**
Bakı Dövlət Universiteti
bayramov@mail.ru

Müxtəlif çeşidli sənaye yağlarının oksidləşməyə qarşı davamlılığının artırılması məqsədilə aşqar kimi istifadə oluna biləcək alkilfenol tipli birləşmələr sintez edilmiş və prosesin optimallaşdırılması aparılmışdır. Proses 2-propenilfenolun geniş sənaye ehtiyatına malik heksen-1-lə alkilləşməsi reaksiyası əsasında reallaşdırılmışdır.

Təcrübənin planlaşdırılması metodu əsasında məqsədli məhsulun alınması üçün optimal şərait (temperatur-120°C, reaksiya müddəti-1,5 saat, komponentlərin mol nisbəti-1,0 katalizatorun kütlə payı-0,5 %) müəyyənləşdirilmişdir.

Açar sözlər: alkilləşmə prosesi, “student” kriteriyası, məhsulun çıxımı, özlülük indeksi.

Geniş sənaye ehtiyatına malik olefin sıra karbohidrogenləri - oliqomer və sooliqomerlər müxtəlif çeşidli sürtkü yağlarının, hidravlik mayelərin, aşqarların və s. sənaye məhsullarının istehsalında əsas baza məhsulu kimi geniş istifadə olunur [1,2]. Bunlar arasında sürtkü materiallarının əsasını təşkil edən α -olefin oliqomerləri termiki sabilliyinə, müqavimət təsirinə qarşı dayanıqlılığına və s. xassələrinə görə, xüsusilə fərqlənir. Lakin bu sıradan olan məhsulların oksidləşməyə qarşı davamlılığının artırılmasına böyük ehtiyac vardır. Bu məqsədlə fenollar və onların törəmələri əsasında alınmış aşqarlar xüsusi maraq kəsb edir [3]. Bunu nəzərə alaraq, tərəfimizdən propenilfenolun heksen-1-lə alkilləşmə prosesi öyrənilmişdir. Proses qarışdırıcı reaktorda $AlCl_3$, toluol və etilxlorid əsasında hazırlanmış kompleks katalizatoru iştirakında aparılmışdır. Prosesdə parametrlərin təsirinin vahid sistemdə öyrənilməsi əsasında alınmış təcrübə nəticələrin (cədvəl 1) uyğun riyazi-statistik metodların tətbiqi ilə işlənməsi vasitəsilə propenilfenolun heksen-1-lə alkilləşməsi reaksiyasının optimal şəraiti müəyyənləşdirilmişdir. Proses zamanı alınan nəticələri təsdiq etmək üçün təcrübə nəticələrinə əsaslanan reqresiya tənliyindən istifadə edilmişdir.

Aparılmış ilkin tədqiqatlar göstərmişdir ki, alkilləşmə prosesinin əsas

funksiyasının Y_i (məhsulun çıxımı və özlülük indeksi) təsir parametrlərinə (x_i) görə paylanmasını ümumi şəkildə aşağıdakı kimi ifadə etmək olar [4].

$$Y_i = f(x_1, x_2, x_3, \dots) \quad (1)$$

Məhsulun çıxımına (Y_1) və özlülük indeksinə (Y_2) alkəlləşmə reaksiyasının əsas parametrlərin: temperaturun- x_1 ($^{\circ}\text{C}$), reaksiya müddətinin- x_2 (saat), propenilfenolun α -olefinə olan mol nisbətini- x_3 , katalizatorun miqdarının- x_4 (%) təsiri təcrübənin aktiv planlaşdırılması metodu əsasında araşdırılmışdır.

Nəticələrə “tam amilli təcrübə üsulunun” tətbiqi əsasında belə qənaətə gəlmək olar ki, prosesin planlaşdırılması üçün ilkin olaraq $2^x=16$ təcrübə tələb olunur. Bu təcrübələrin nəticələrini (1)-ə tətbiq etməklə aşağıdakı reqresiya tənliyini almaq olar:

$$Y_J = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 \quad (2)$$

Burada: Y_J – optimallaşma parametrlərinin qiyməti;

$x_1, x_2 \dots x_n$ – model faktorlarının kodlaşdırılmış göstəriciləri;

J – uyğun təcrübəni göstərir.

Cədvəl 1

**Propenilfenolun heksen-1-lə alkəlləşməsi prosesinin
təcrübi nəticələri və planlaşdırma matrisası**

Faktorların təsir səviyyəsi	Temperatur, $^{\circ}\text{C}$, x_1	Reaksiya müddəti, x_2 , saat	$n_{\text{pr. fen.}}$	Katalizatorun miqdarı, %	Əsas məhsulun çıxımı, % Y_1	Məhsulun özlülük indeksi, Y_2
			$n_{\alpha\text{-olefin } X_3}$			
Baza səviyyəsi	90	1,0	3,0	0,3		
Dəyişmə intervalı	30	0,5	2,0	0,2		
Aşağı səviyyə	6 (-1)	0,5 (-1)	1,0 (-1)	0,1 (-1)		
Yuxarı səviyyə	120 (+1)	1,5(+1)	5,0 (+1)	0,5 (+1)		
Təcrübələr:						
1	-	-	-	-	21	32
2	+	-	-	-	62	68
3	-	+	-	-	46	57
4	+	+	-	-	64	74
5	-	-	+	-	33	41
6	+	-	+	-	60	73
7	-	+	+	-	43	65
8	+	+	+	-	29	81
9	-	-	-	+	48	44
10	+	-	-	+	70	86
11	-	+	-	+	51	63
12	+	+	-	+	72	90
13	-	-	+	+	46	52
14	+	-	+	+	64	78
15	-	+	+	+	52	67
16	+	+	+	+	74	82

Propenilfenolun heksen-1-lə alkilləşməsi reaksiyasının optimallaşdırılması əməliyyatında xarici parametrlərin təsirini minimuma endirmək və idarəedici funksiyanın aşkarlanması məqsədilə təcrübə mərkəzi və faktorların dəyişmə intervalı arasındakı əlaqə müəyyən olunmuşdur (cədvəl 2)

Təsir parametrlərinin kodlaşdırılmış və natural qiymətləri arasındakı əlaqə aşağıdakı ifadələrlə müəyyən olunur:

$$\begin{aligned}x_1 &= (t-90)/30 \\x_2 &= (\tau-1,0)/0,5 \\x_3 &= (n-3,0)/2,0 \\x_4 &= (C_k-0,3)/0,2\end{aligned}\quad (3)$$

Cədvəl 2

Təcrübə mərkəzi və faktorların dəyişmə intervalı

Faktorlar	Təsvir		Dəyişmə intervalı	Təcrübə mərkəzi		
	Natural	Kodlaşdırılmış		-1	0	+1
Temperatur, °C	t	x_1	30	60	90	120
Reaksiya müddəti, saat	τ	x_2	0,5	0,5	1,0	1,5
Propenilfenol: α -olefin	n	x_3	2	1:1	3:1	5:1
Katalizatorun miqdarı,%	C_k	x_4	0,2	0,1	0,3	0,5

Regressiya tənliyinin əmsallarını təyin etmək üçün təsiri öyrənilən parametrlərin analizi əsasında “S-plus 2000” proqramından istifadə olunmuş, optimallaşdırma əməliyyatı isə “Matlab-6” hesablama sistemində həyata keçirilmişdir [5].

Regressiya əmsallarının qiymətləri “student” kriteriyası və həmçinin təcrübənin aproksimasiya xətaləri (T_i) əsasında aşağıdakı kimi təyin edilmişdir:

$$t_i = \frac{|b_i|}{\sqrt{S_b^2}} \quad (4)$$

Burada: S_b^2 - təcrübənin orta kvadratik xətasıdır.

b_i -regressiya əmsalları.

Regressiya tənliyindəki (2) əmsalların hesablanmış qiymətləri cədvəl 3-də verilmişdir:

Cədvəl 3

Regressiya tənliyinin əmsallarının və aproksimasiya xətalərinin qiymətləri

Y_i	Regressiya tənliyinin əmsalları					Aproksimasiya xətaləri				
	b_0	b_1	b_2	b_3	b_4	t_0	t_1	t_2	t_3	t_4
Y_1	69,427	0,0002	1,403	0,828	0,786	2314,23	0,066	46,766	27,500	26,200
Y_2	86,028	0,001	2,1468	0,458	0,694	2150,7	0,025	53,65	11,45	17,35

Nəticələri (2) ifadəsində nəzərə alsaq alkilləşmə prosesinin əsas funksiyalarını (Y_i) aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$Y_1 = 69,427 + 0,002x_1 + 1,403x_2 + 0,825x_3 + 0,786x_4 \quad (5)$$

$$Y_2 = 86,028 + 0,001x_1 + 2,146x_2 + 0,458x_3 + 0,694x_4$$

Hər iki funksional təyinat izlənərkən $t_1 < t_{\text{cəd.}}$ halı müşahidə olunur. Ona görə də təcrübə hesablamalar üçün (5) ifadəsini aşağıdakı kimi qəbul etmək olar:

$$Y_1 = 69,427 + 1,403x_2 + 0,825x_3 + 0,786x_4 \quad (6)$$

$$Y_2 = 86,028 + 2,146x_2 + 0,458x_3 + 0,694x_4$$

Riyazi modelin adekvatlığı Y_1 və Y_2 funksiyalarına (6) Fişer kriteriyasının tətbiqi ilə yoxlanılmışdır. Nəticələrin analizi göstərir ki, hər iki halda uyğun olaraq Fişer kriteriyasının hesablanmış və cədvəl qiymətlərinin $F'_{\text{hes}} = 4,8$, $F'_c = 8,7$ və $F_{\text{hes}}^2 = 5,2$, $F_c^2 = 8,7$ olduğu təyin olunub. Göründüyü kimi, hər iki halda $F_{\text{hes}} < F_c$ halı müşahidə olunur. Buradan belə qənaətə gəlmək olar ki, Y_1 və Y_2 funksiyalarının riyazi modelləri obyektə oxşardır. (6)-sistemi bazasında optimallaşdırma əməliyyatı aparılmış y_1 və y_2 funksiyalarının maksimum göstəricilərini təmin edən texnoloji şərait müəyyən olunmuşdur. Belə ki, texnoloji parametrlərin araşdırılan intervalda $x_1=120$, $x_2=1,5$, $x_3=1,0$ və $x_4=0,5$ şəraiti məqsədli məhsulun maksimum çıxımını $(Y_1)_{\text{max.}}=71,348\%$ təmin edir. Bu halda məhsulun özlülük indeksinin maksimum qiyməti $(Y_2)_{\text{max.}}=87,906$ olur.

ƏDƏBİYYAT

1. Высшие олефины: производство и применение /под. ред. М.А.Далина, Л.: Химия, 1984, 254 с.
2. Котов С.В., Маисеев И.К., Шабанова А.В. Олигомеры олефинов: Способы получения и применение в качестве компонентов топлив и масел (обзор) // Нефтехимия, 2003, т.43, №5, с.329-333.
3. Bayramov M.R., Cavadov M.Ə., İbrahimov Ç.Ş., Mirkərim Banihaşimi Gərgəri. Fenolun butadienstirool sooliqomeri ilə alkillaşması prosesinin modelləşdirilməsi və optimallaşdırılması. Препринт 11 № 2, (10), АЕТЕТİ-дә 1.05.95, Е 2257-Аз.с.6.
4. ЭВМ помогает химии / под. ред. Вернена Г., Шапопа М., Л.: Химия, 1990, 384 с.
5. Мустафина С.А., Валиева Ю.А., Давлетшин Р.С. и др. Оптимальные технологические решения для каталитических процессов и реакторов // Кинетика и катализ, 2005, т. 46, №5, с.749.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ 2-ПРОПЕНИЛФЕНОЛА ГЕКСЕНОМ-1

**М.Р.БАЙРАМОВ, В.М.ФАРЗАЛИЕВ, Ф.В.ЮСУБОВ,
М.А.ДЖАВADOV, Н.Я.ЗЕЙНАЛОВ, З.М.ДЖАВADOVA**

РЕЗЮМЕ

Алкилированием 2-пропенилфенола гексенom-1 в присутствии комплекса ($AlCl_3$ -толуол-этилхлорид) получены алкилзамещенные 2-пропенилфенола. Были выявлены оптимальные условия их синтеза (температура $-120^{\circ}C$, продолжительность реакции $-1,5$

ч., мольное соотношение компонентов -1,0, количество катализатора-0,5%) обеспечивающие максимальный выход (72 %) целевого продукта, могущего найти применение в качестве антиокислительных присадок к смазочным маслам .

Ключевые слова: процесс алкилирования, критерия “студент», выход продукта, индекс вязкости.

OPTIMIZATION OF PROCESS ALKYLATION OF 2-PROPENYLPHENOL BY 1-HEXENE

M.R.BAYRAMOV, V.M.FARZALIYEV, F.V.YUSUBOV, M.A.JAVADOV,
N.Y.ZEYNALOV, Z.M.JAVADOVA

SUMMARY

Alkylsubstituted 2-propenylphenols have been obtained as a result of alkylation of 2-propenylphenol by 1-hexene in the presence of a complex ($AlCl_3$ -toluene-chloroethane). Optimal conditions of their synthesis (temperature-120⁰C, duration of reaction-1,5 h, molar ratio of components-1,0, the quantity of the catalyst-0,5 %) providing the maximum exit of the target product (72 %) that is able to find application as oxidative additives to lubricant oils have been revealed.

Key words: process of alkylation, a”student” criterion, yield of product, index of viscosity.

Redaksiyaya daxil oldu: 13.09.2011-ci il

Çapa imzalandı: 02.11.2011-ci il