

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА БЕНЗИЛИДЕНБЕНЗИЛАМИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

И.М. Булатов ¹, С.А. Мустафина ²

¹ Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа

² Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, г. Стерлитамак

Целью работы является создание физико-химической модели синтеза бензилиденбензиламина реакцией бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и проведение ее формализации, т. е. составление математической модели, которая представляет собой систему соотношений, отражающих основные законы сохранения (массы, энергии, импульса и т.д.), и на её основе решение задачи определения оптимальных составов бензиламина и четыреххлористого углерода.

Ключевые слова: синтез, система дифференциальных уравнений, численные методы, оптимальный состав.

Введение

Каталитические реакции синтеза ароматических и гетероциклических соединений, таких как N-бензилиденбензиламин и метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты обладают широким спектром применения. N-бензилиденбензиламин известен как индикатор количественного определения литийорганических соединений титриметрическим методом и является исходным соединением для синтеза ряда гетероциклов. Метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты представляет большой интерес для получения порфиринов и лекарственных препаратов [1].

Рассмотрим механизм химической реакции синтеза бензилиденбензиламина:

1. $A_1 + A_2 \rightarrow A_3 + A_4$
2. $A_3 \rightarrow A_5 + A_6$
3. $A_5 + A_1 \rightarrow A_7 + A_8$
4. $A_8 + A_6 \rightarrow A_9$

Здесь введены обозначения для веществ: $A_1 = \text{C}_7\text{H}_9\text{N}$ – бензиламин, $A_2 = \text{CCl}_4$ – четыреххлористый углерод, $A_3 = \text{C}_7\text{H}_8\text{NCl}$ – хлорбензиламин, $A_4 = \text{CHCl}_3$ – хлороформ, $A_5 = \text{C}_7\text{H}_7\text{N}$ – 1-фенилметанимин, $A_6 = \text{HCl}$ – хлористый водород, $A_7 = \text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}$ – бензилиденбензиламин, $A_8 = \text{NH}_3$ – аммиак, $A_9 = \text{NH}_4\text{Cl}$ – хлористый аммоний. Первыми в реакцию вступают бензиламин и четыреххлористый углерод, в зависимости от их концентраций синтезируется определенное количество бензилиденбензиламина.

Составим матрицу стехиометрических коэффициентов данной химической реакции. Матрица имеет вид:

$$\nu = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где i -ой строке соответствует вещество A_i , j -ый столбец соответствует номеру реакции.

Скорость j -ой реакции r_j определяется по формуле:

$$r = k^+ \prod_{i=1}^{N_A} C_{A_i}^{\alpha_i} - k^- \prod_{i=1}^{N_B} C_{B_i}^{\beta_i} \quad (1)$$

где N_A , N_B - число исходных веществ и продуктов реакции соответственно, α_i и β_i - элементы матрицы стехиометрических коэффициентов ν , k^+ и k^- - константы скорости. Тогда в соответствии с (1) для реакции синтеза бензилиденбензиламина скорости стадий имеют вид (здесь и далее под C_i понимаются концентрации реагирующих веществ A_i):

$$r_1 = k_1 C_1 C_2$$

$$r_2 = k_2 C_3$$

$$r_3 = k_3 C_5 C_1$$

$$r_4 = k_4 C_8 C_6$$

Согласно закону действующих масс [2] суммарный материальный баланс для варианта, ко-

гда суммарная концентрация $C = \sum_{i=1}^m C_i$ изменяется во времени, имеет вид:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{d(Cx_i)}{dt} = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} r_j, \quad i = \overline{1, m} \quad (2)$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad x_i(0) = x_i^0. \quad (3)$$

В соответствии с (2) и (3) получим систему дифференциальных уравнений, являющейся математической моделью реакции синтеза бензилиденбензиламина:

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = -K_1 C_1 C_2 - K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_2}{dt} = -K_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_3}{dt} = K_1 C_1 C_2 - K_2 C_3 \\ \frac{dC_4}{dt} = K_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_5}{dt} = K_2 C_3 - K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_6}{dt} = K_2 C_3 - K_4 C_8 C_6 \\ \frac{dC_7}{dt} = K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_8}{dt} = K_3 C_5 C_1 - K_4 C_8 C_6 \\ \frac{dC_9}{dt} = K_4 C_8 C_6 \end{cases}$$

с начальными условиями (3).

Построенная математическая модель синтеза бензилиденбензиламина позволяет получить информацию о динамике образования веществ и о степени влияния каждого вещества на ход реакции.

Данная модель представляет собой систему дифференциальных уравнений с начальными условиями (3). При её решении был применен классический метод Рунге-Кутты и реализована программа на языке программирования Delphi 7.

На рисунке 1 изображена зависимость образования бензилиденбензиламина от мольной доли содержания бензиламина и четыреххлористого углерода.

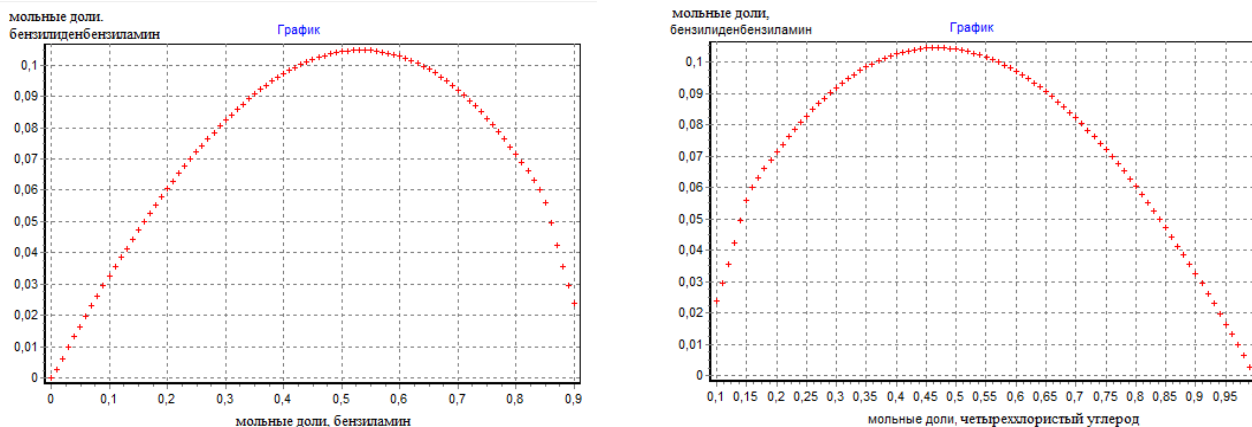


Рис. 1. Графики зависимости составов веществ

Полученные результаты показывают, что для максимального получения бензилиденбензиламина состав реагирующих веществ должен выглядеть следующим образом: 54% бензиламина и 46% четыреххлористого углерода.

Литература

1. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Аминов Р.И. Синтез N-бензилиденбензиламина из бензиламина при действии железосодержащих катализаторов в CCl₄ // Журнал органической химии. 2012. С. 1063-1065.
2. Спивак С. И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. - Уфа: РИО БашГУ, 2003, 110 с.