

## ФЕНОЛ ВА УНИ ҲОСИЛАЛАРИНИ ВИНИЛЛАШ ЖАРАЁНИНИ МАТЕМАТИК МОДЕЛЛАШТИРИШ

**О.Х.Касимова**

*Самарқанд давлат ветеринария медицинаси, чорвачилик ва биотехнологиялари  
университети Тошкент филиали*

**Д.Х.Мирхамитова**

*Тошкент давлат техника университети Олмалик филиали*

**Калит сўзлар:** фенол, *n*-бромфенол, винил эфирлар, квант-кимёвий ҳисоблашлар, математик моделлаштириш, юқори асосли система, жараён механизми.

**Аннотация:** Фенол ва уни ҳосилалари асосида олинган винилэфирларнинг квант-кимёвий ва молекуляр-динамик ҳисоблашлари амалга оширилди. Виниллаш жараёни натижалари математик қайта ишланиб математик моделлаштирилди, винилэфирнинг ҳосил бўлиш механизми изоҳланди.

Фенол ва уни ҳосилаларини виниллаш натижаларини амалиётда таҳлил қилишда уни математик моделлаштириш катта аҳамиятга эга. Бундан келиб чиқиб, ацетиленни қўллаб танланган фенол ва уни винил эфирлари синтезини математик моделлаштириш тадқиқ этилган [1]. Намуна сифатида *n*- бромфенолни каталитик виниллаш жараёнини математик моделлаштириш натижалари келтирилди. *n*-Бромфенолни ацетилен асосида таклиф этилган виниллаш усули формализация бўйича уч фазали тизимда ўтадиган мураккаб стехиометрияси ва иссиқлик алмашиниш кўриниши бўйича фарқланади. Математик моделни тузишда адабиётлардаги маълум қонуниятларни қўллаш билан реакцияларнинг асосий схемасини ажратиш йўли бўлиши мумкин. Лаборатория қурилмасида олинган натижалар асосида келтирилган. Бунда мақсадли функция сифатида *n*- бромфенолни чиқиш унуми ва реакция тезлиги қўлланилган. Қуйидаги расмларда *n*- бромфенолни виниллаш жараёнини моделлашнинг визуал иконограммалари келтирилган, бу ерда реакция давомийлиги ва унинг ҳарорати ишчи функциялардир.

*n*- Бромфенол винил эфирининг унуми ҳарорат ва вақтга боғлиқлиги мўлжалланганидек экстремал характерга эга, бу эса экспериментда ўрнатилган диапазонларнинг таъсирлигини тасдиқлайди. Ўрнатилган боғлиқлик тенглама билан аппроксимланади:

$$y = -133,34 + 4,15x_1 - 0,028x_1^2 + 2,78x_2 - 0,47x_2^2 \quad (1)$$

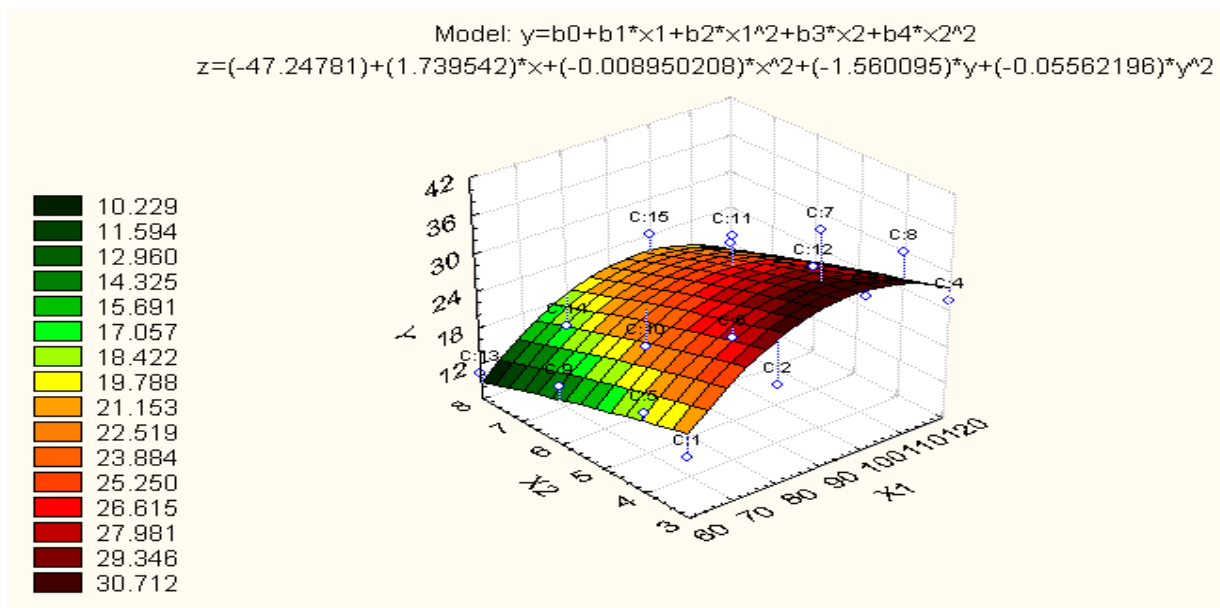
бунда *y*- *n*-бромфенол винил эфири унуми (%);

$x_1$ - ҳарорат (°C);

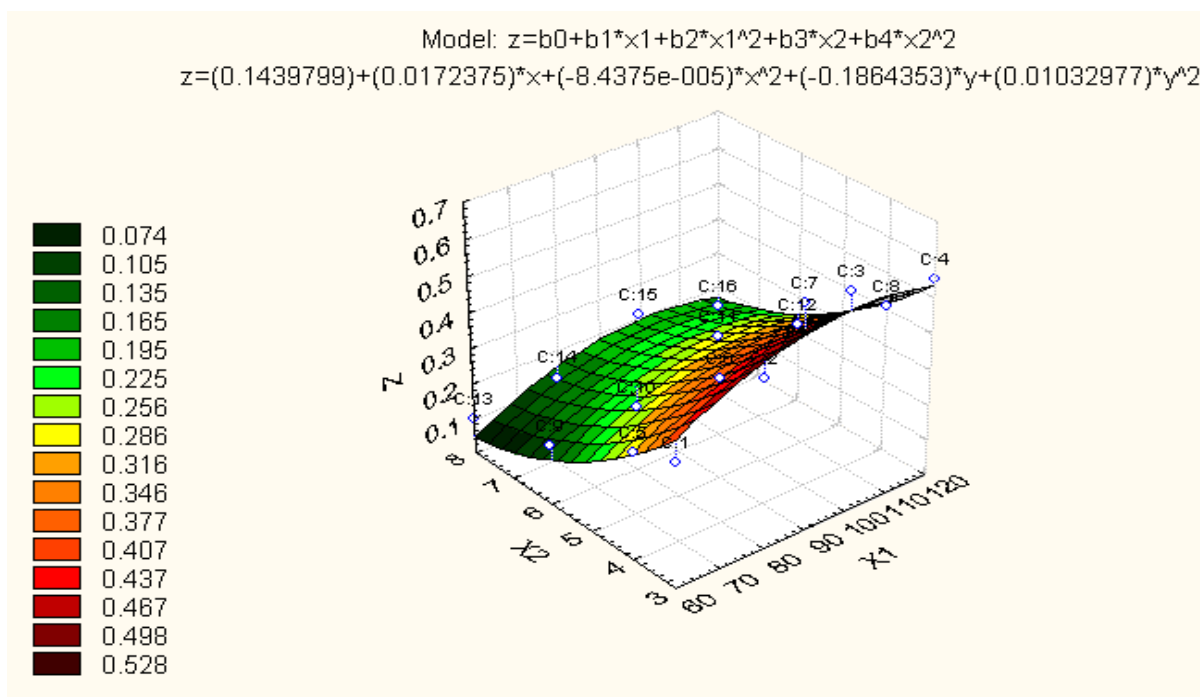
$x_2$ - вақт давомийлиги (соат).

Виниллаш жараёни шароитини оптималлаштиришнинг технологик шарти маҳсулот унумини ошириш ҳисобланади:

$$y(x_1, x_2) \rightarrow \max \quad (2)$$



**1- Расм. n- Бромфенол винил эфири синтези жараёнини математик моделлаштириш иконограммаси**



**2-Расм. n-Бромфенолни виниллаш реакциясида реакция тезлигига харорат ва реакция давомийлигининг биргаликдаги таъсири иконограммаси.**

Бу эса юқорида таъкидланганидек, маҳсулот унумини аниқлаш орқали амалга оширилади. Муқобил ҳолатни ифодалаш учун жараён математик моделланади ва умумий кўриниш:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_1^2 + b_3x_2 + b_4x_2^2 \quad (3)$$

ҳолда ифодаланади. Ҳар бир  $x_1$  ва  $x_2$  ўзгарувчилари орқали «у» ни дифференциялаб қуйидаги тенглама ҳосил қилинади:

$$\begin{cases} \frac{\partial y}{\partial x_1} = b_1 + 2b_2x_1 = 0 \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} = b_3 + 2b_4x_2 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Тенгламалар системаси ечилиб  $x_1$  ва  $x_2$  топилади:

$$x_1 = -\frac{b_1}{2b_2} \quad \text{ва} \quad x_2 = -\frac{b_3}{2b_4} \quad (5)$$

$b_1, b_2, b_3$  ва  $b_4$  қийматлари ўрнига қўйилиб  $x_1$  ва  $x_2$  учун оптимал топилади:  
 $x_1 = 122,7^\circ\text{C}$ ;  $x_2 = 7,6$  соат,  $y = 35,2\%$ ;  $z = 2,68 \cdot 10^{-4}$  мол/л.соат.

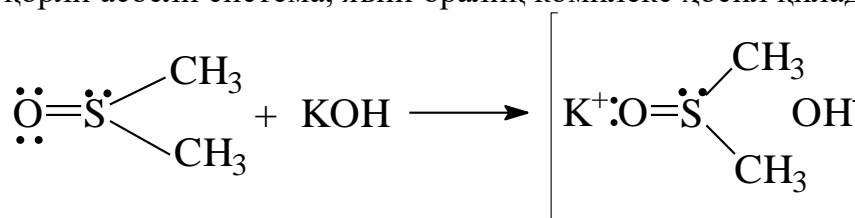
Фенол ва унинг ҳосилаларини винил эфирлари ҳосил бўлишининг механизми таклиф этилган. Фенол ва унинг ҳосилаларини муҳим хусусиятларидан бири уларнинг молекуласида реакцион қобилияти юқори бўлган гидроксил гуруҳи ва ароматик ҳалқа мавжудлигидир. Шунинг учун бу туркум моддалардан турли хил бирикмаларни синтез қилиш имконияти юқори ҳисобланади [2-4].

Адабиётларда ацетилен спиртлари, феноллар ва уларнинг ҳосилалари, карбон кислоталар, ҳамда углеводларнинг ацетилен билан таъсири ва реакция натижада уларнинг винил ҳосилалар ҳосил бўлиш механизмлари тўғрисида Трофимов Б.А., Новокшонов В.В., Поткин В.И., Дикусар Е.А. ва уларнинг шогирдлари Опарина Л.А., Лавров В.И., Паршина Л.Н. томонларидан бир қанча фикрлар билдирилган. Улар бир-бирини тўлдирсада, лекин турли нуқтаи назардан ёндашилган [3].

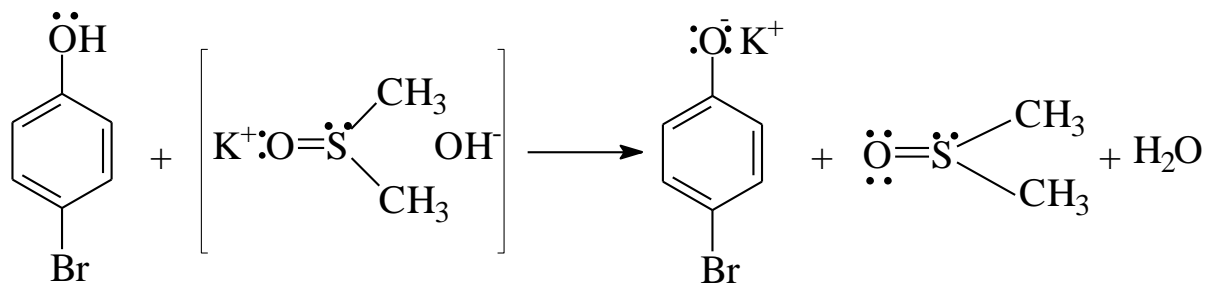
п-Бромфенолни гомоген фазада КОН-ДМСО юқори асосли системасида ацетилен билан нуклеофил бирикиш реакцияси кетиши натижасида п-бромфенолнинг винил эфири ҳосил бўлади.

Адабиёт манбаларига таянган ҳолда п-бромфенолнинг винил эфири синтези реакцияси меҳазми қуйидагича таклиф этилди.

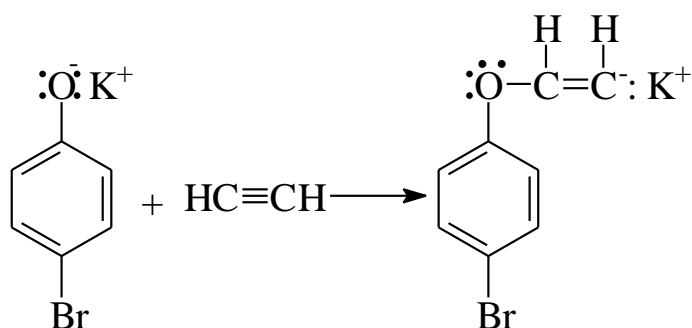
Реакциянинг дастлабки босқичида эритувчи ДМСО ва калий ишқори ўзаро таъсирлашиб юқорли асосли система, яъни оралик комплекс ҳосил қилади:



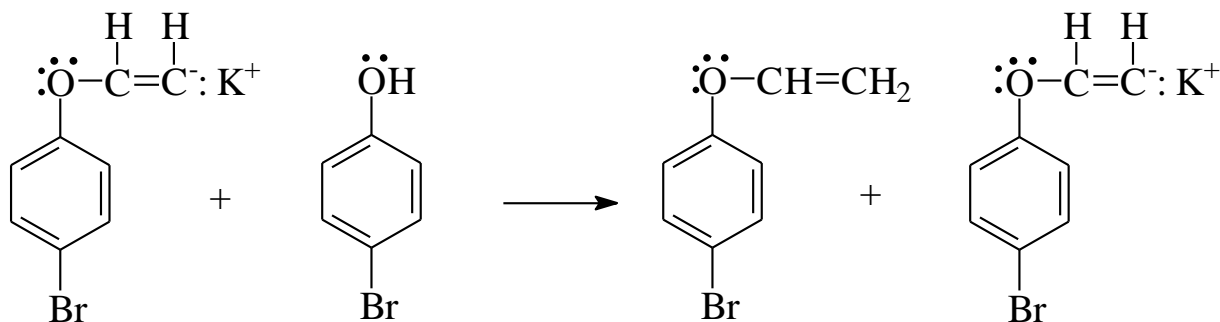
Ҳосил қилинган оралик комплекс п-бромфенол билан реакцияга киришади ва п-бромфенолнинг калийли тузи, яъни калий п-бромфенольят ҳосил қилади [3,4].



Реакциянинг кейинги босқичида ҳосил бўлган *p*-бромфенолнинг калийли тузи ацетилендаги учбоғга “нуклеофил бирикиш” содир бўлади ва оралиқ металл комплекс ҳосил бўлади.



Оралиқ металл комплекс *n*-бромфенол билан таъсирлашиб *p*-бромфенолнинг винил эфирини ҳосил қилади [5-6].



Фенол ва унинг ҳосилаларини виниллаш жараёнида келтирилган юқори асослиликнинг моҳияти шундаки, икки ёки бир неча асоснинг синергизми асосида металл иони делокалланган зарядли комплекс катион ҳосил қилади ва анионнинг фаоллигини кескин оширади.

---

**Фойдаланилган адабиётлар:**

1. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул : учебное пособие / И. Майер ; под ред. А. Л. Чугреева. - 4-е изд. Москва, 2021. - 387 с
2. Викторова Н. Б. Основы математического моделирования квантовых вычислительных процессов / Санкт-Петербург “Лань”, 2023, -120 с.
3. Л.А.Юсупова, С.Э.Нурманов, Д.Х.Мирхамитова, А.Икромов, Ш.Б.Мамаризаев, Х.М.Вапаев, Моделирования процесса винилирования бутин-2-диола-1,4 // Журнал “Химия и химическая технология”, Ташкент, 2015, №3. С.56-60.
4. Нурманов С.Э., Солиев М.И., Мирхамитова Д.Х., Электронная структура ароматических ацетиленовых спиртов и моделирование их винилирования // Журнал “Современные научные исследования и инновации”, Россия, 2015, С.78-81.
5. Козинская Л.К. Механизм и квантово-химический расчет синтеза 4', 4'' (5'')-ди-(метилэтилоксиметил)-добензо-18-краун-6 // Universum: химия и биология электронный научный журнал, Россия, 2021, №3(81).
6. Нурманов С.Э., Геворгян А.М., Матмуратов Ш.А., Касимова О., Сирлибаев Т.С., Калядин В.В. Синтез винилфенилового эфира и применение его в качестве аналитического реагента // Журн. прикладной химии., Россия, 2002. Т.75. Вып.3. с. 491 – 495.