

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ФОСФОРИЛИРОВАНИЯ ПИЗОПРОПЕНИЛФЕНОЛА С ДИМЕТИЛФОСФИТОМ

**А.М.Магеррамов, М.Р.Байрамов, Ф.М.Велиева, Г.М.Мехтиева,
Г.М.Гасанова, М.А.Джавадов, О.Н.Джавадова**

Бакинский Государственный Университет

AZ 1148, г.Баку ул.З.Халилова 23, e-mail: firuza1@aport2000.ru

С целью синтеза новых фосфорсодержащих производных фенолов проведена реакция фосфорилирования алкенилфенолов диалкилфосфитами по кратной связи в присутствии инициатора третбутилпербензоата.

Для выявления влияния различных факторов на выход реакции присоединения диалкилфосфитов к алкенилфенолам было проведено математическое исследование при различных условиях проведения процесса с использованием различных инициаторов и катализаторов. В качестве входных параметров процесса было взято: X_1 – температура °С, X_2 - продолжительность процесса час, X_3 - концентрация инициатора, а выходным параметром - выход целевого фосфоната %. Учитывая, что количество опытов $m = 8$ и факторов $n = 3$, выходную функцию можно представить в виде линейного полинома.

Расчет коэффициентов уравнения регрессии и парной корреляции для указанных выборок проводился с использованием программы Matlab-6.5. Получена статистическая модель процесса, имеющая вид:

$$Y = 1.2 + 0.058 \cdot X_1 + 6.796 \cdot X_2 - 222.9 \cdot X_3 - 0.0136 \cdot X_1 \cdot X_2 + 2.525 \cdot X_1 \cdot X_3 - 2.96 \cdot X_2 \cdot X_3 - 0.069 \cdot X_2^2 - 34.667 \cdot X_3^2$$

Оценка значимости коэффициентов регрессии подтверждена критерием Стьюдента, ошибкой аппроксимации опыта, а адекватность модели критерием Фишера при уровне значимости 5%.

Полученная модель была использована для решения задачи оптимизации, обеспечивающий максимум выхода продукта. Для нахождения оптимальной точки была решена система уравнений в частных производных.

Решение данной задачи показало, что максимальный выход целевого фосфоната 96,925% можно достичь при температуре 130°С, продолжительности реакции 20 час и концентрации инициатора 0,665 масс %.

Дальнейшее повышение температуры приводит к уменьшению выхода продукта. Полученные расчетные данные хорошо согласуются с экспериментальными значениями.