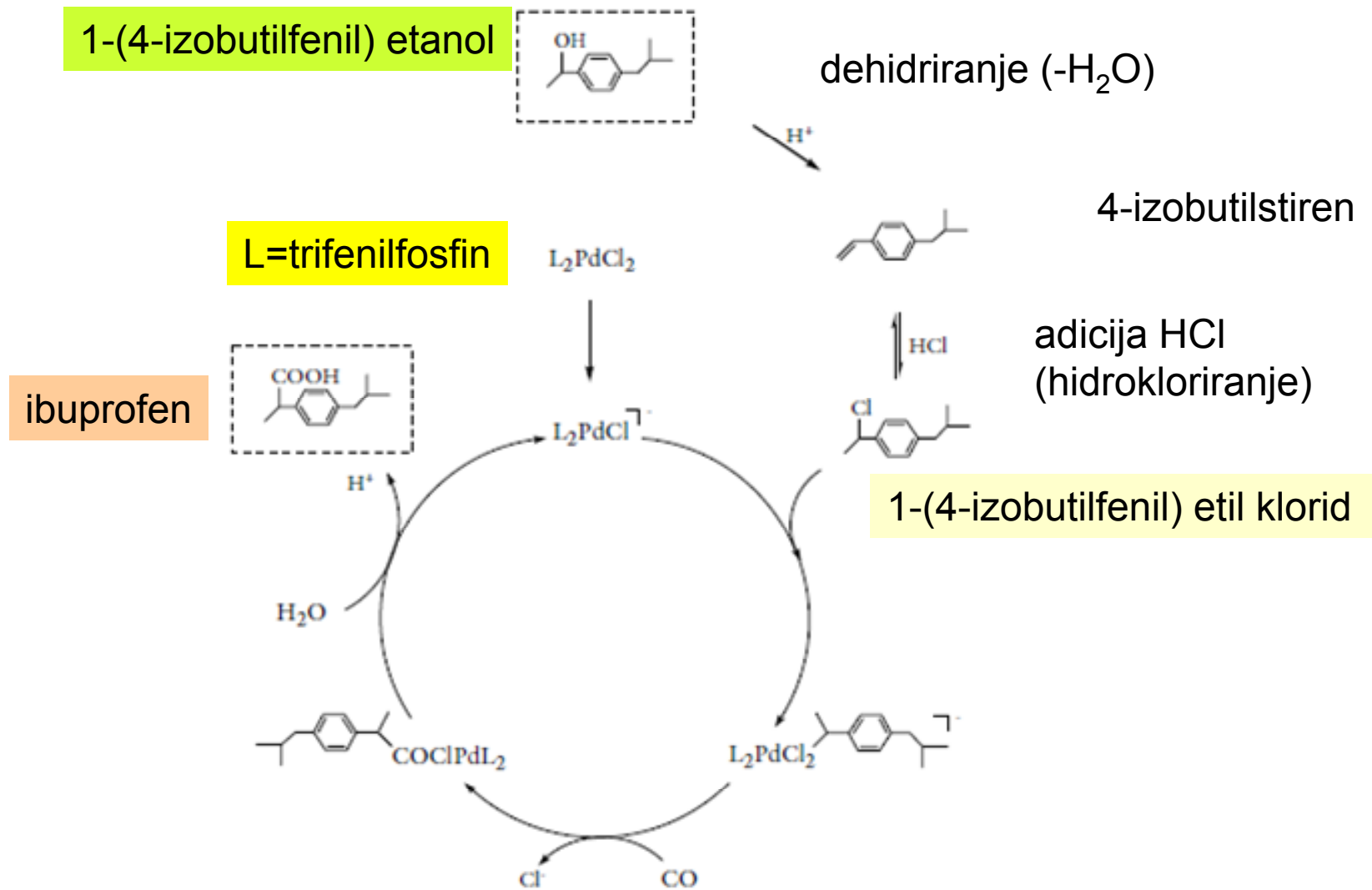


Primjer 3- Sinteza ibuprofena

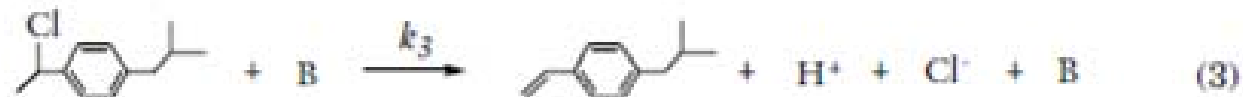
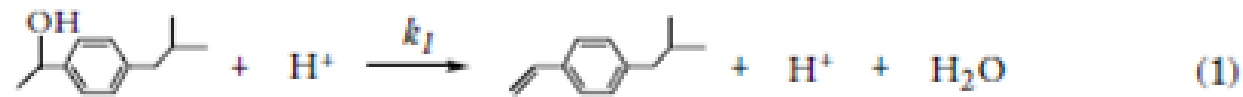
Homogeno katalitički proces- katalizator i reaktant su u istoj fazi, npr. kapljevita reakcijska smjesa sadrži topljiv metaloorganski kompleks koji djeluje kao katalizator

Modeliranje procesa u kotlastom reaktoru s idealnim miješanjem koji uključuje složeni mehanizam



Slika 1. Shematski prikaz sinteze ibuprofena polazeći od 1-(4-izobutilfenil) etanola; katalizator prolazi transformaciju iz L₂PdCl₂ (L= trifenilfosfin) do anionskog oblika L₂PdCl⁻; aktivirani katalizator sudjeluje u karbonilaciji i hidrolizi 1-(4-izobutilfenil) etil klorida pri čemu nastaje ibuprofen

Ukupan proces uključuje niz reakcija:



- 1- dehidratacija alkohola u odgovarajući alken
- 2- hidrokloriranje alkena
- 3- dehidrokloriranje aktivne supstance uz djelovanje baze B
- 4- transformacija polaznog oblika katalizatora u aktivan aninonski tip katalizatora



5- aktivan supstrat sudjeluje u oksidativnoj adiciji na L_2PdCl

6- karbonilacija

7- hidroliza organometalnog spoja, nastajanje ifuprofena i regeneracija katalizatora

Spojevi i pripadajuće oznake- pojednostavljenje

spoj

oznaka

spoj

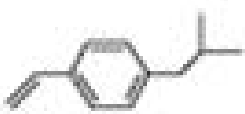
oznaka



rox



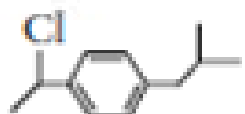
pd1



ren



pd2



rhcl



pd3



ibu



pd4

Kinetički izrazi kojima se opisuju reakcije 1-7

$$r_1 = k_1 c_{\text{roh}} c_{\text{h}} \quad (8)$$

$$r_2 = k_2 c_{\text{ren}} c_{\text{h}} c_{\text{cl}} \quad (9)$$

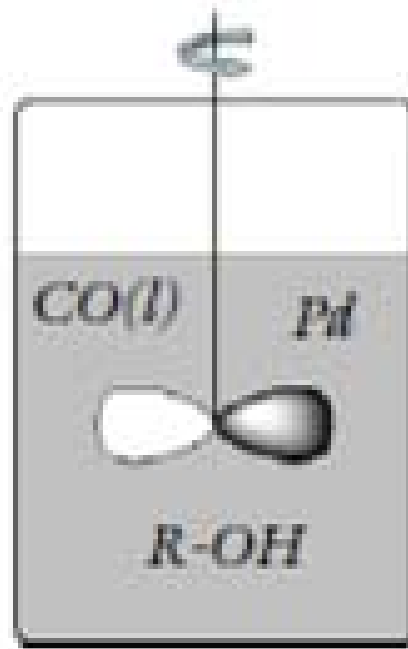
$$r_3 = k_3 c_{\text{rhcl}} c_{\text{b}} \quad (10)$$

$$r_4 = k_4 c_{\text{pd1}} c_{\text{co}} c_{\text{h2o}} \quad (11)$$

$$r_5 = k_5 c_{\text{pd2}} c_{\text{rhcl}} \quad (12)$$

$$r_6 = k_6 c_{\text{pd3}} c_{\text{co}} \quad (13)$$

$$r_7 = k_7 c_{\text{pd4}} c_{\text{h2o}} \quad (14)$$



Slika 2. Shematski prikaz kotlastog reaktora s idealnim miješanjem u kojem se reaktant (alkohol) karbonilira do ibuprofena pomoću paladijevog katalizatora; pretpostavke: idealno miješanje, izotermni uvjeti

Jednadžbe modela -1

$$\frac{dc_{roh}}{dt} = r_1 \quad (15)$$

$$\frac{dc_{ren}}{dt} = r_1 - r_2 + r_3 \quad (16)$$

$$\frac{dc_{rbel}}{dt} = r_2 - r_3 - r_5 \quad (17)$$

$$\frac{dc_{ibu}}{dt} = r_7 \quad (18)$$

Jednadžbe modela -2

$$\frac{dc_{pd1}}{dt} = -r_4 \quad (19)$$

$$\frac{dc_{pd2}}{dt} = r_4 - r_5 + r_7 \quad (20)$$

$$\frac{dc_{pd3}}{dt} = r_5 - r_6 \quad (21)$$

$$\frac{dc_{pd4}}{dt} = r_6 - r_7 \quad (22)$$

Jednadžbe modela -3

$$\frac{dc_h}{dt} = -r_2 + r_3 + 2r_4 + r_7 \quad (23)$$

$$\frac{dc_{cl}}{dt} = -r_2 + r_3 + r_4 + r_6 \quad (24)$$

$$\frac{dc_{h2o}}{dt} = r_1 - r_4 - r_7 \quad (25)$$

- Ispitana su dva slučaja:

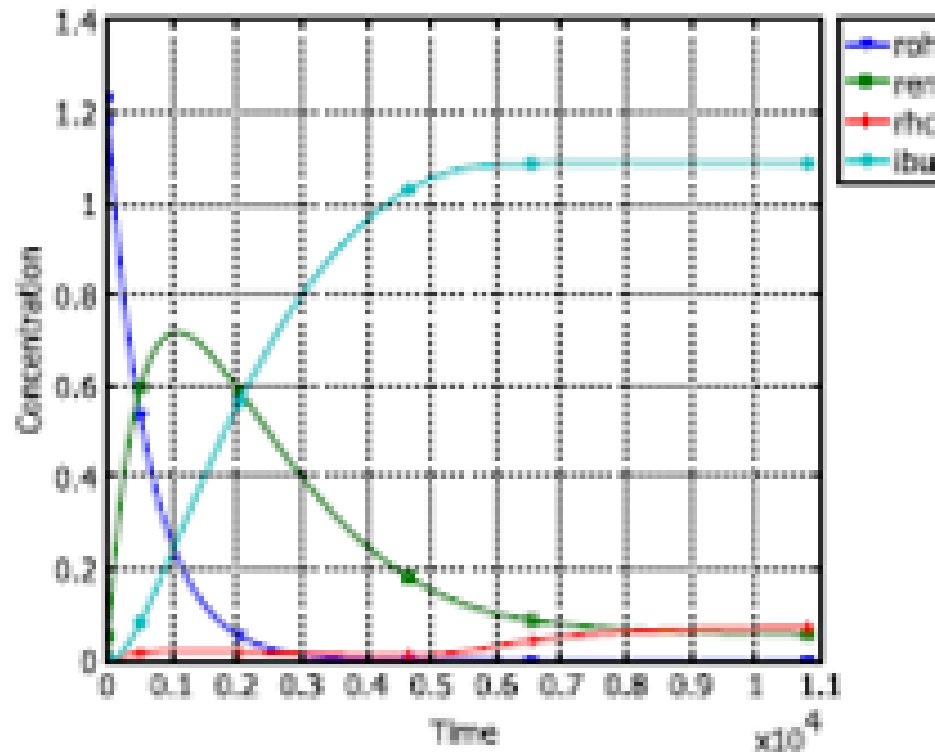
slučaj 1 - uključuje rješavanje diferencijalnih jednačbi 15-25

slučaj 2 – modifikacija pretpostavljenog mehanizma uvođenjem dodatnih reakcija: pretpostavka da reaktant (alkohol) i produkt ibuprofen (karboksilna kiselina) reagiraju reverzibilno pri čemu nastaje odgovarajući ester



Rezultati

Slučaj 1- Koncentracijski profili izabranih reaktanata i produkata s vremenom

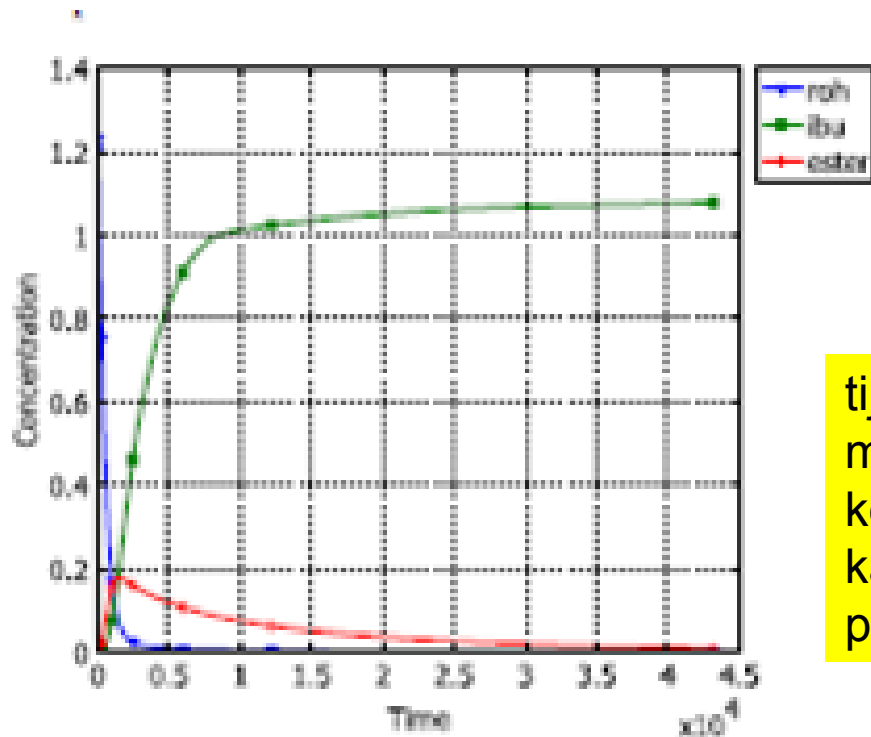


nakon približno 2 sata proces je završen

Slika 3. Koncentracije izabranih komponenata (mol/m³) kao funkcija vremena (s)

Rezultati

Slučaj 2- Koncentracijski profili ibuprofena i estera s vremenom



tijekom reakcije ester nastaje kao međuprodukt; da bi se postigla ista konačna koncentracija ibuprofena kao u slučaju 1 proces se treba provoditi najmanje 12 sati

Slika 4. Koncentracije izabranih komponenata (mol/m^3) kao funkcija vremena (s)