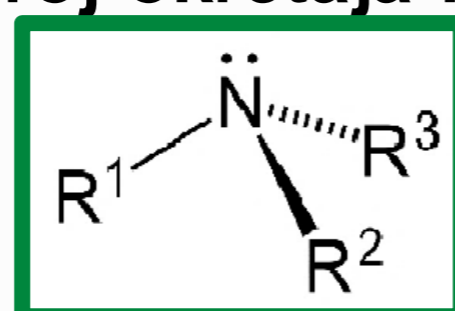


Studentica: Dženita Šola; voditelj rada na fakultetu: prof. dr. sc. Vesna Tomašić; voditelj rada u industriji: dipl. ing. kem. Vitomir Vušak
Naziv industrije: Pliva Hrvatska d.o.o., TAPI Istraživanje i razvoj

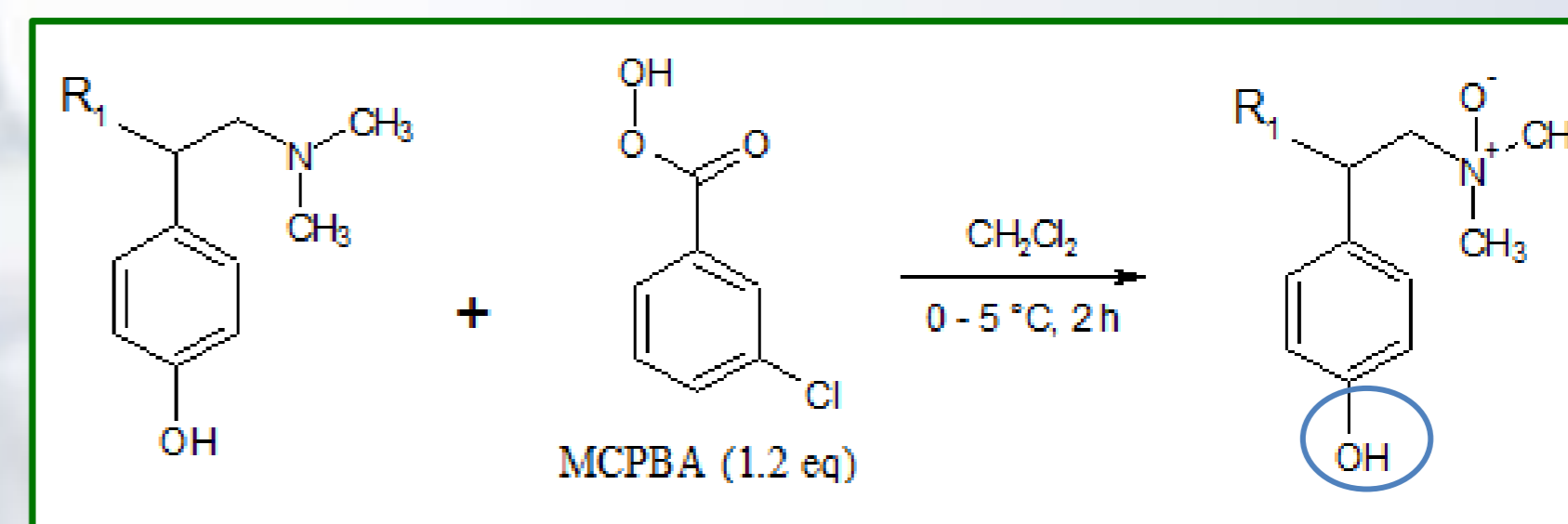
UVOD

Amini se ubrajaju u najvažnije skupine organskih spojeva koji pokazuju bazična svojstva. Rasprostranjeni su u prirodi i zahvaljujući tome imaju važnu ulogu u modernim tehnologijama. Ukoliko zamijenimo vodikove atome s jednom, dvije ili tri ugljikovodične skupine, dobivamo primarne, sekundarne ili tercijarne amine. U ovom radu provedene su sinteze aromatskih N-oksida te je određena kinetika njihove razgradnje. Na stupanj razgradnje utječu različiti čimbenici, kao što su reakcijski medij, temperatura, broj okretaja miješala i sl. Cilj ovog rada bilo je istraživanje termičke razgradnje N-oksida tercijarnog amina u temperaturnom području od 60 do 65°C.

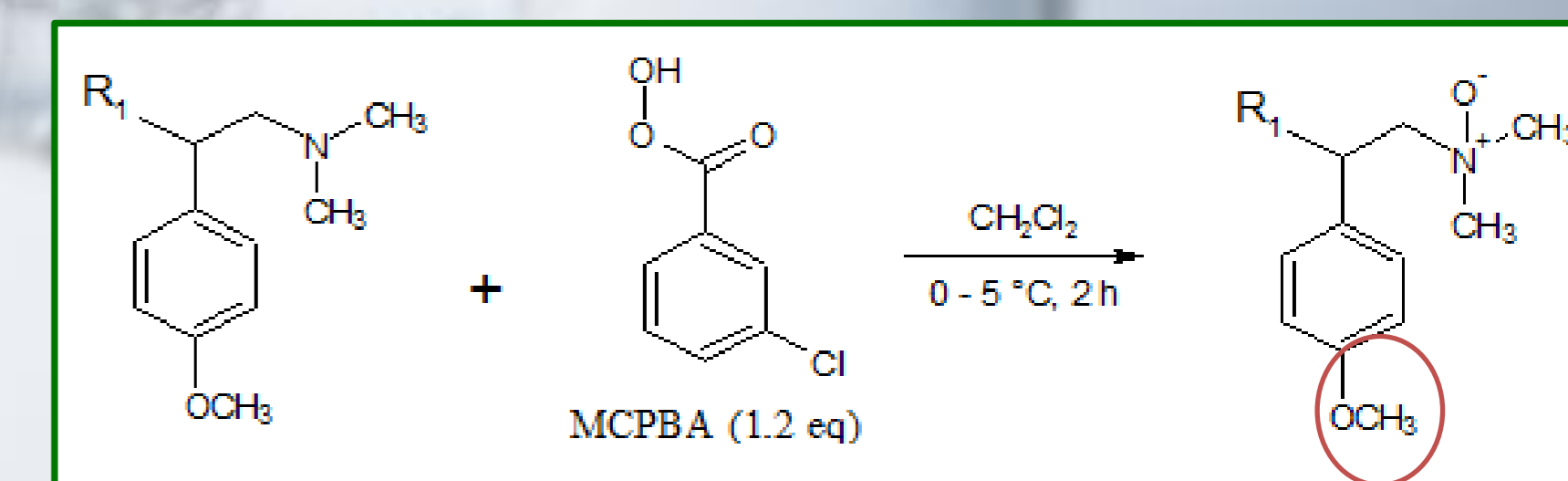


EKSPERIMENTALNI DIO

Nakon prvobitne sinteze dvaju različitih aromatskih N-oksida tercijarnih amina, provedeni su pokusi njihove razgradnje. Razgradnja prvog aromatskog N-oksida tercijarnog amina A praćena je uz konstantno propuhivanje dušikom pri protoku od 10 mL/min uz primjenu četiri različita otapala metanol, 2-propanol, metil-etil-keton i voda pri istoj temperaturi razgradnje i broju okretaja miješala. Razgradnja drugog aromatskog N-oksida tercijarnog amina B praćena je također uz konstantno propuhivanje dušikom u istim otapalima te pri istim radnim uvjetima, međutim u cilju usporedbe provedena je i razgradnja u atmosferi zraka.



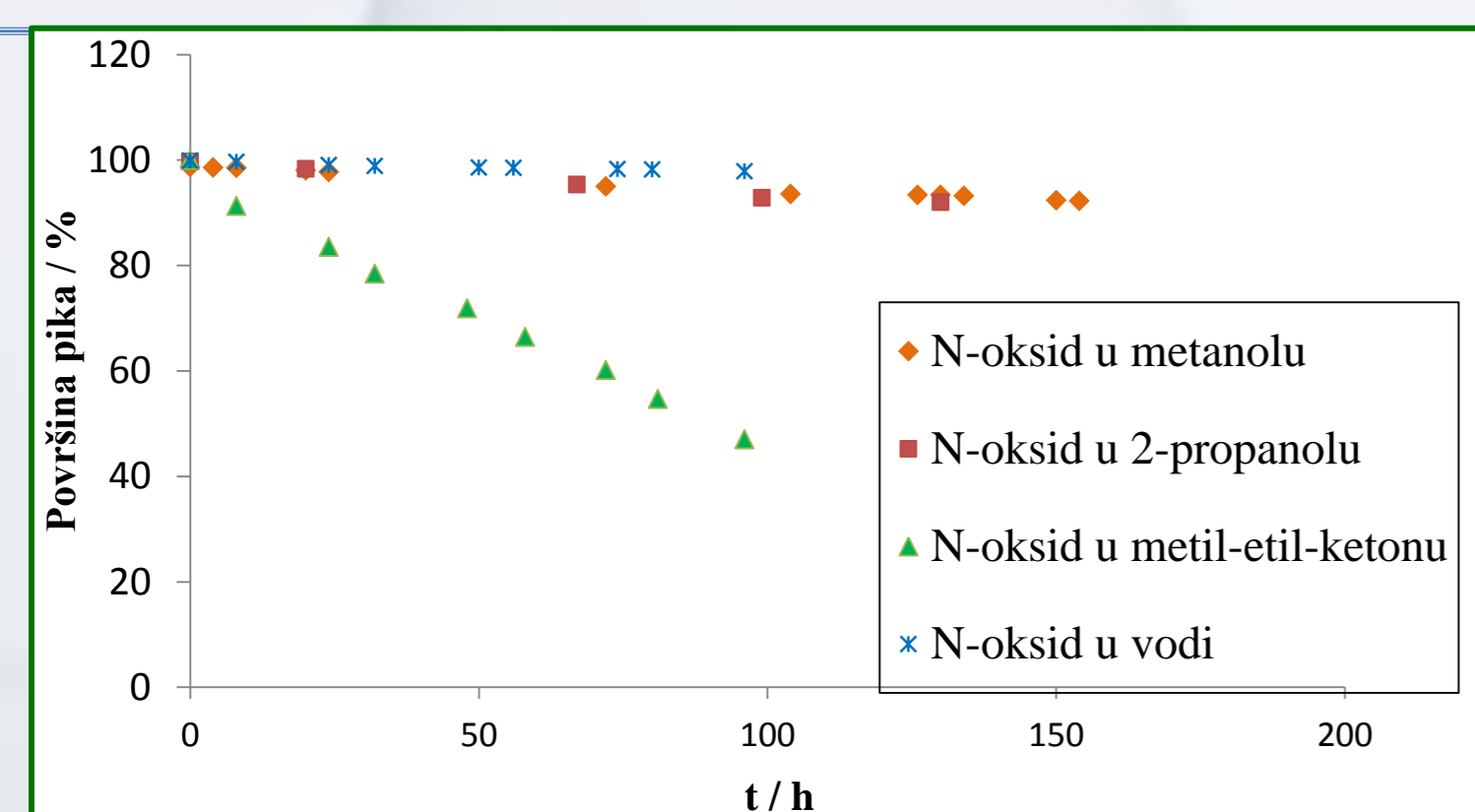
Slika 1. Sinteza aromatskog N-oksida tercijarnog amina A



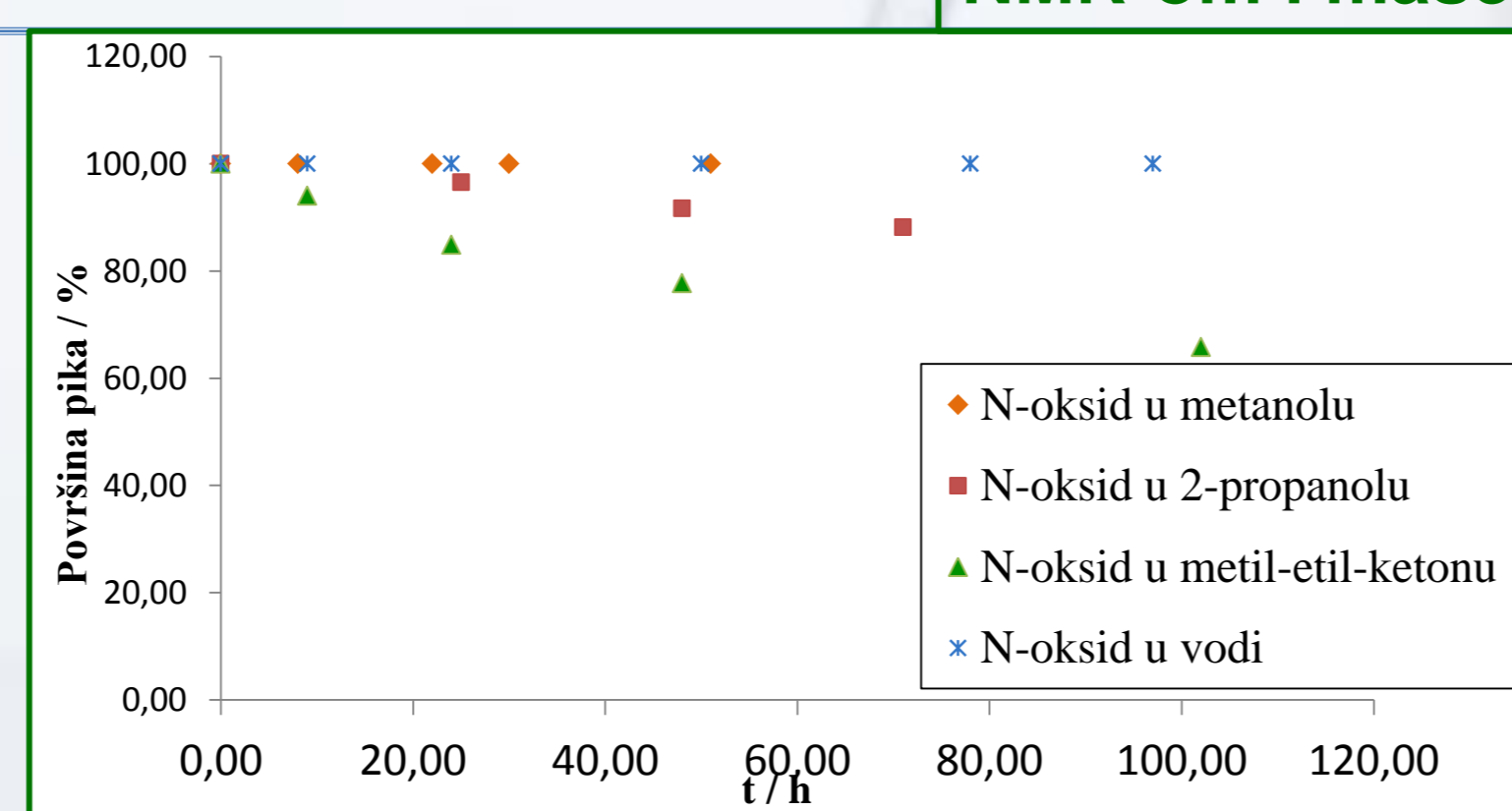
Slika 2. Sinteza aromatskog N-oksida tercijarnog amina B

REZULTATI

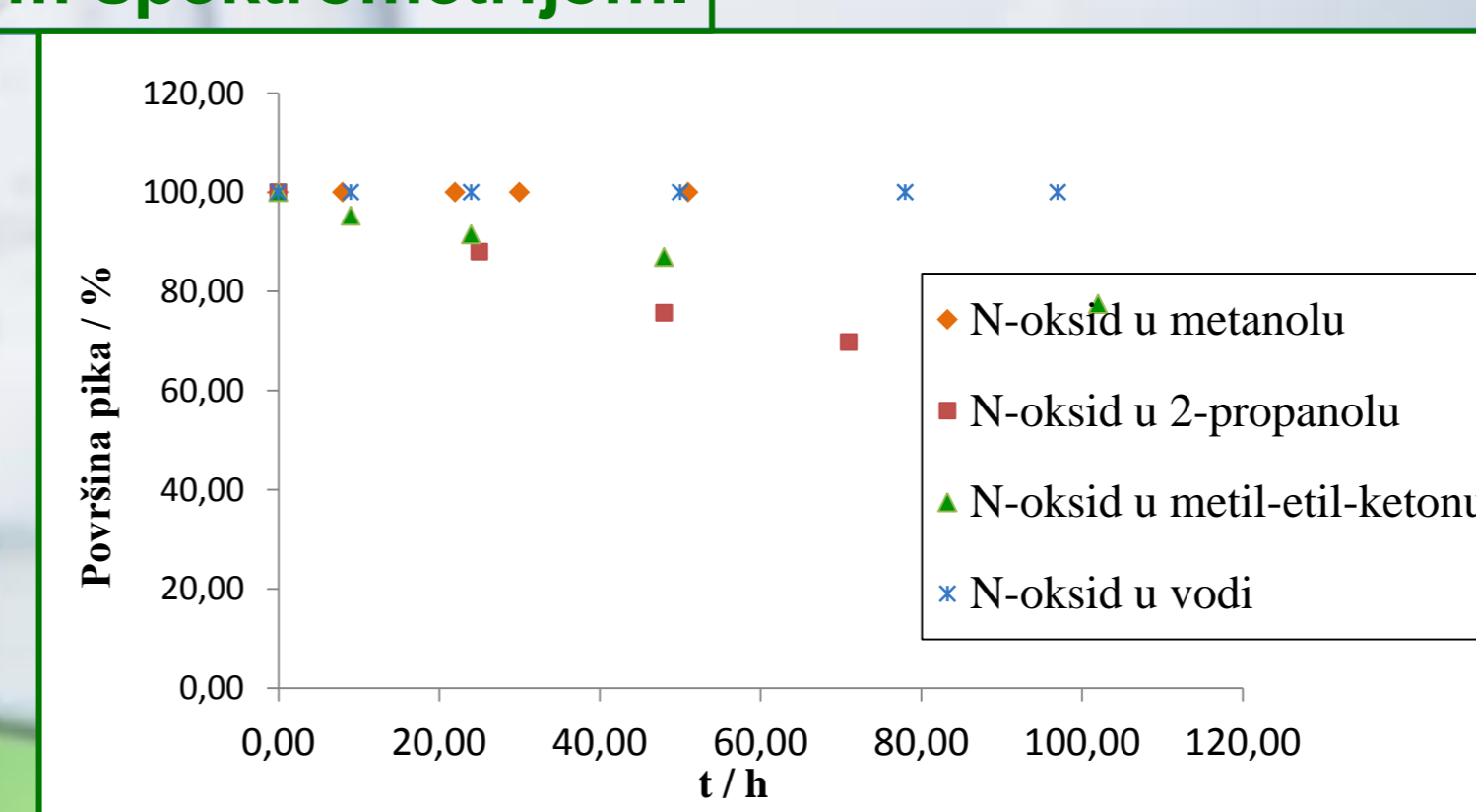
Struktura amina A i B je potvrđena NMR-om i masenom spektrometrijom.



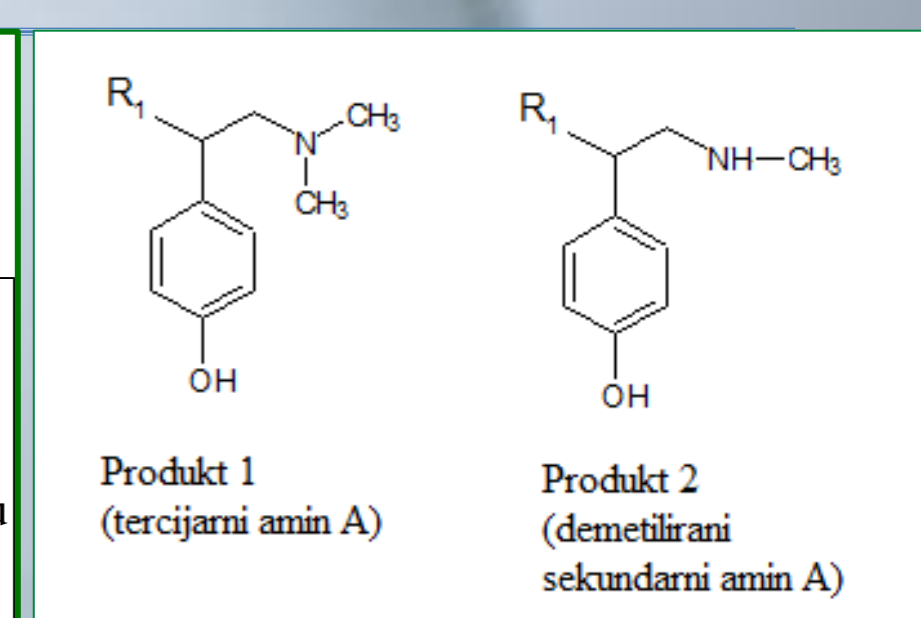
Slika 3. Razgradnja aromatskog N-oksida tercijarnog amina A u različitim otapalima pri 65 °C uz propuhivanje dušikom



Slika 4. Razgradnja aromatskog N-oksida tercijarnog amina B u različitim otapalima pri 65 °C uz propuhivanje dušikom



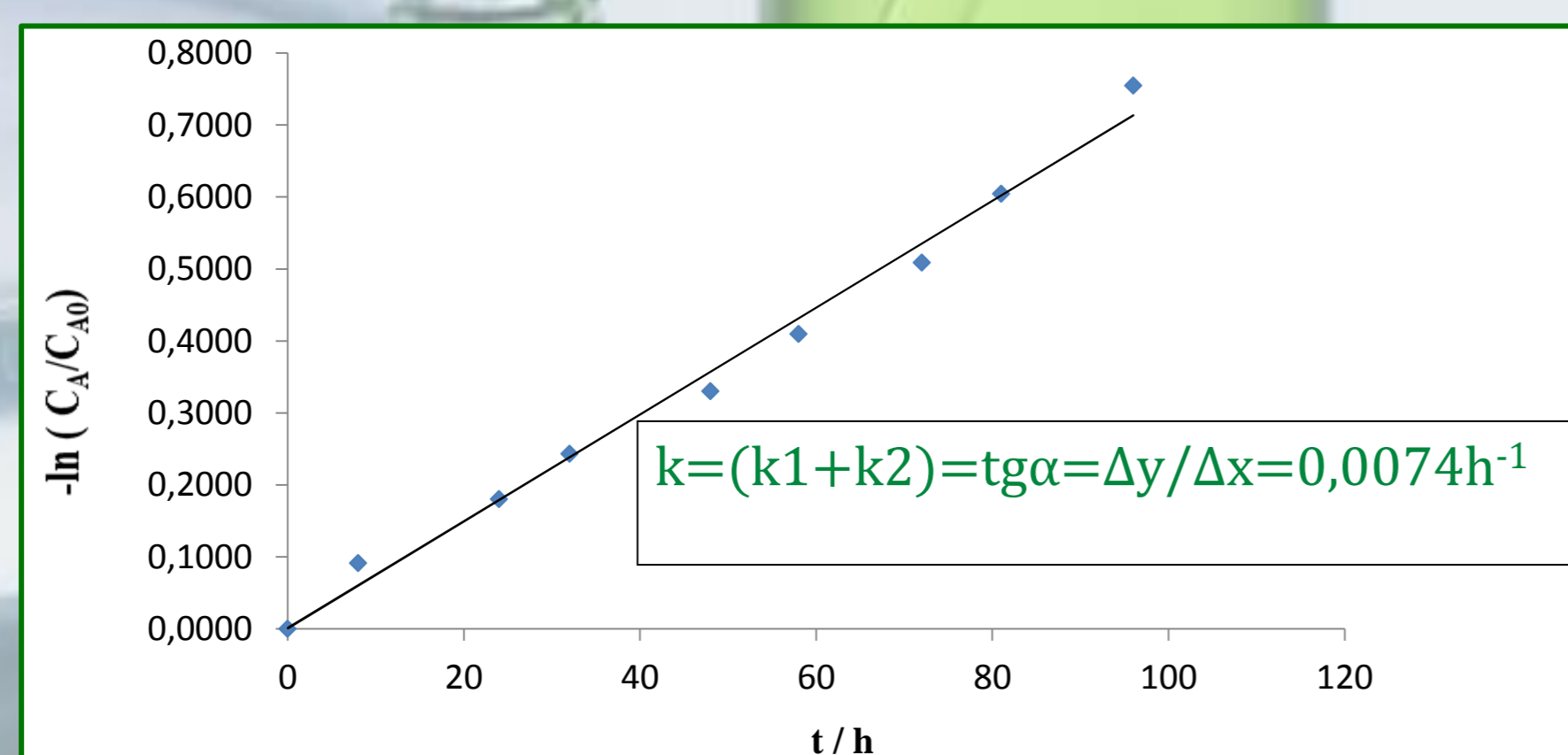
Slika 5. Razgradnja aromatskog N-oksida tercijarnog amina B u različitim otapalima pri 65 °C u atmosferi zraka



Slika 6. Produkti razgradnje N-oksida tercijarnog amina A

Primjenom integralne metode analize testiran kinetički model za usporedne/paralelne reakcije u kotlastom reaktoru, koji se svodi na jednostavan model za reakciju prvog reda s obzirom na polazni reaktant, pri čemu je ukupna konstanta brzine dana sumom pojedinačnih konstanti brzina usporednih/paralelnih reakcija (k_1+k_2).

Slika 7. Testiranje eksperimentalnih rezultata na pretpostavljeni model za usporedne/paralelne reakcije u kotlastom reaktoru primjenom integralne metode kinetičke analize (za metil-etil-keton)



Tablica 1. Procijenjene vrijednosti kinetičkih parametara, k dobivene primjenom integralne metode kinetičke analize uz pretpostavku pojednostavljenog kinetičkog modela uz primjenu različitih otapala

otapalo	k/ h ⁻¹	k ₁ / h ⁻¹	k ₂ / h ⁻¹	SD
metanol	0,0004	0,00025	0,00015	0,0795
2-propanol	0,0007	0,00037	0,00033	0,0358
metil-etil-keton	0,0074	0,00733	0,00007	0,0261

ZAKLJUČCI

Na stupanj razgradnje utječu različiti čimbenici, kao što su reakcijski medij, različiti mehanizmi razgradnje uz propuhivanje dušikom odnosno u atmosferi zbog različitih supstituentima na dva izučavana aromatska N-oksida tercijarnih amina, tj. -OH (na aminu A) i -OCH₃ (na aminu B), produkti razgradnje su aromatskih N-oksida odgovarajući tercijarni amini i demetilirani sekundarni amini, dobro slaganje između eksperimentalno izmjerenih vrijednosti i pretpostavljenog modela paralelnih reakcija u kotlastom reaktoru, procijenjene su vrijednosti kinetičkih parametara predloženog modela (k , k_1 i k_2) te je s obzirom na dobivene vrijednosti srednjeg kvadratnog odstupanja (SD) potvrđeno da je metil-etil-keton najprikladnije otapalo za razgradnju aromatskog N-oksida tercijarnog amina A.