

компонентный состав позволяет сделать вывод о возможности переработки данной смеси с це-

лью получения моторных топлив.

Список литературы

1. Яворовский Н.А., Пустовалов А.В. Выбор параметров электрического взрыва алюминиевых и железных проводников в атмосфере аргона // Известия вузов. Физика, 2013.– Т.56.– №7/2.– С. 164–169.
2. Popok E.V., Levashova A.I., Chekantsev N.V., Kirgina M.V., Rafegerst K.V. *Ultradispersed Hydrocarbon Synthesis Catalyst from CO and H₂ Based on Electroexplosion of Iron Powder // Procedia Chemistry 10 (2014) 20–24.*

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ОКСИДА УГЛЕРОДА И ВОДОРОДА

А.В. Максимова, Д.В. Зайцев
 Научный руководитель – к.х.н., доцент Н.В. Ушева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, anastasiya-maksimova-93@mail.ru

В настоящее время, в связи с потребностью поиска альтернативных источников углеводородов для топливной и нефтехимической промышленности, все больше внимания уделяется изучению синтезов на основе оксида углерода и водорода.

Исследование процесса синтеза из СО и Н₂ на математической модели, адекватно описывающей реальный процесс, позволит подобрать оптимальные режимы работы промышленных установок, оперативно изучить поведение процесса при изменении технологических параметров.

Целью работы является анализ экспериментальных данных по кинетике синтеза из оксида углерода и водорода и построение кинетической модели процесса.

Исследования проводились на лабораторной каталитической установке, разработанной в институте катализа им. Г.К. Борескова, на ультрадисперсном железосодержащем катализаторе (УДП), который был получен в Институте физики высоких технологий Томского политехнического университета, на основе электровзрывных порошков. Условия проведения исследования: соотношение Н₂:СО=2:1, температура на входе в реактор 260 °С, температура слоя катализатора 283 °С, давление в реакторе 1,1 МПа, время проведения – 94 часа, объем катализатора 8,3 см³ (масса 12,09 гр).

Анализ продуктов синте-

за осуществлялся на газовом хроматографе «Хроматэк-Кристалл 5000.1» и на хромато-масс-спектрометре «Кристалл 5000» с масс-спектрометрическим детектором хроматэк.

Распределение компонентов жидкого продукта синтеза по числу атомов углерода в молекуле представлено на рис. 1, на котором показано, что в продуктах синтеза значительно преобладают алканы нормального строения. Выход углеводородов уменьшается в ряду: изоалканы, алкены, арены, циклоалканы.

С использованием литературных данных [1] и с применением программ расчёта HyperChem, ChemCraft, Gaussian были проведены термодинамические расчёты. Так как энергии Гиббса имеют отрицательные значения, протекание реакций образования углеводородов из оксида углерода и водорода является возможным. Были произведены расчёты констант равновесия (Кр).

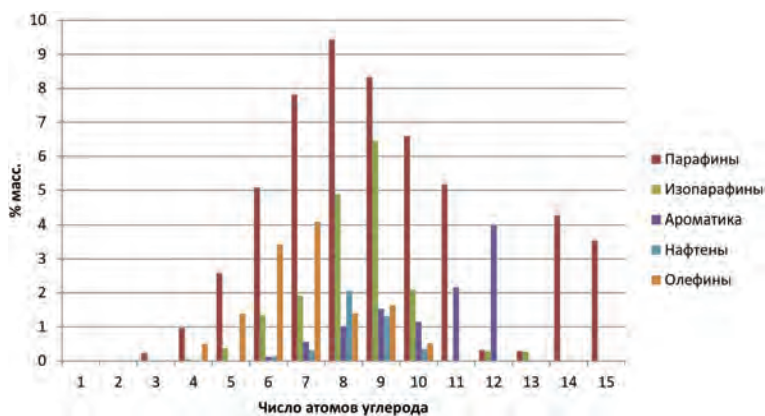


Рис. 1. Выход жидкого продукта в результате экспериментального исследования

Так как $K_p \gg 1$, следовательно, в синтезе преобладают необратимые реакции.

На основании полученных экспериментальных данных по исследованию кинетики синтеза, результатов термодинамических расчётов и с использованием разработанной на кафедре кинетической модели синтеза Фишера-Тропша на модифицированном катализаторе [2], была

сформирована кинетическая модель процесса на ультрадисперсном катализаторе.

Таким образом, анализ полученных результатов показал, что на данном катализаторе состав жидких продуктов сильно отличается по сравнению с ранее применяемыми катализаторами высоким содержанием изо-парафинов, нафтенов и ароматических углеводородов.

Список литературы

1. Ю.М. Жоров «Термодинамика химических процессов. Нефтехимический синтез, переработка нефти, угля и природного газа». – Москва: Химия, 1995. – 466с.
2. Кравцов А.В., Левашова А.И., Ушева Н.В.,

Мойзес О.Е. Проблемы комплексного исследования синтеза Фишера-Тропша // Химия и химическая технология на рубеже тысячелетий: Матер. научно-практ. конф. – Томск, 2002. – Т.2. – С.65–67.

АНАЛИЗ МНОЖЕСТВЕННОСТИ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ВЫХОДА КОЛОННЫ РЕАКЦИОННОЙ РЕКТИФИКАЦИИ СИНТЕЗА МЕТИЛ-ТРЕТ-БУТИЛОВОГО ЭФИРА

О.Е. Митянина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, oem@tpu.ru

В настоящее время реакционная ректификация, совмещающая в одном аппарате процессы реакционного синтеза и разделения, представляет повышенный интерес для промышленности. Благодаря ее существенным экономическим, технологическим и термодинамическим преимуществам, реакционная ректификация используется в различных областях органического синтеза, в частности в производстве топливных добавок и присадок, к которым относятся метилтретбутиловый эфир (МТБЭ), этилтретбутиловый эфир (ЭТБЭ), третамилбутиловый эфир (ТАБЭ), получаемых в результате реакции изоолефинов со спиртами [1].

В то же время, комбинирование химической реакции и разделения в одном аппарате порождает высокую нелинейность процесса, что существенно осложняет управление и может привести к множественным стационарным состояниям [2]. В частности, множественные значения выходных параметров при неизменных входных показателях (множественность выхода) могут привести к нестабильной работе аппарата.

Таким образом, целью данной работы является анализ множественности стационарных состояний выхода реакционной колонны синтеза

МТБЭ.

Рассмотрим возможность возникновения множественности стационарных состояний выхода в реакционной зоне колонны. Для этого целесообразно представить уравнение материального баланса [3] как функции подвода и отвода вещества во всем диапазоне возможных концентраций, выраженные через единицы расхода.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_{\text{подвод}} = \frac{L_d}{R} + \frac{L_d}{R} \cdot \frac{L_d}{k_i} + \left[\frac{L_d}{R} \right] \cdot \frac{L_d^2}{k_i \cdot k_{i-1}} + \dots \\ \dots + \frac{L_d^i}{\prod_{i=1}^M k_i} + k_f \frac{x^{\text{i-but}} \cdot \gamma^{\text{i-but}}}{x^{\text{MeOH}} \cdot \gamma^{\text{MeOH}}} \\ \Gamma_{\text{подвод}} = L_d \frac{x_i}{x_d} + k_f \frac{x^{\text{MTBE}} \cdot \gamma^{\text{MTBE}}}{K_{\text{eq}} (x^{\text{MeOH}} \cdot \gamma^{\text{MeOH}})^2} \end{array} \right.$$

$i = 1, 2, \dots, s'$; s' – количество ступеней в реакционной зоне колонны.

На рисунках 1–2 представлены зависимости функций подвода и отвода вещества на тарелках реакционной зоны от концентрации метанола и МТБЭ.

Согласно рисунку 1, точки пересечения графиков подвода и отвода вещества соответствуют стационарным состояниям. При этом в реакци-