## Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования



# «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Направление подготовки/профиль 18.06.01 — «Химическая технология» / 05.17.07 — «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ» Инженерная школа природных ресурсов Отделение Химической инженерии

## Научный доклад об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы

УДК 665.383.4:547.27

#### Аспирант

| Группа | ФИО                        | Подпись | Дата |
|--------|----------------------------|---------|------|
| A5-51  | Юдаев Сергей Александрович |         |      |

#### Руководитель профиля подготовки

| T JROBOANTOND INPOPENDED | одгоговии      |                 |         |      |
|--------------------------|----------------|-----------------|---------|------|
| Должность                | ФИО            | Ученая степень, | Подпись | Дата |
|                          |                | звание          |         |      |
| доцент ОХИ ИШПР          | Белинская Н.С. | к.т.н.          |         |      |

### Руководитель отделения

| т уководитель отделения |                |                 |         |      |
|-------------------------|----------------|-----------------|---------|------|
| Должность               | ФИО            | Ученая степень, | Подпись | Дата |
|                         |                | звание          |         |      |
| профессор ОХИ ИШПР      | Короткова Е.И. | д.т.н.          |         |      |

#### Научный руковолитель

| Должность          | ФИО           | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|--------------------|---------------|---------------------------|---------|------|
| Профессор ОХИ ИШПР | Ивашкина Е.Н. | д.т.н.                    |         |      |

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В мире растет потребность в получении продуктов из возобновляемого сырья. Одним из основных источников сырья являются жиры природного происхождения. Из растительных жиров получают полупродукты и продукты, который востребованы как на энергетическом рынке, так и на рынке сырья и реагентов для химической технологии продуктов органической химии (пластификаторы, стабилизаторы, ингибиторы коррозии и др.). Таким продуктом являются метиловые эфиры жирных кислот (МЭЖК) или биодизель (БД).

Основным направлением использования МЭЖК является топливное направление. В странах Европейского Союза и США МЭЖК используют как экологически чистую добавку к дизельному топливу. Но существует ряд способов получения модифицированных МЭЖК. Модификация МЭЖК подразумевает введение функциональных групп в жирнокислотный остаток. В основном модификацию проводят через несколько стадий, первая из которых образование эпоксидного цикла на месте расположения двойной связи в жирнокислотном остатке. Последующие стадии могут заключаться в раскрытии эпоксидного цикла с получением основных функциональных групп, таких как –ОН, –NН<sub>2</sub>.

Несмотря на то, что в России при получении эпоксидированных МЭЖК пользуются технологией надкислотного эпоксидирования, существует высокая актуальность в разработке новых, более дешевых и простых способов получения эпоксидированных МЭЖК.

<u>Цель работы</u> состояла в разработке новой, принципиально отличающейся, отечественной технологии получения эпоксидированных МЭЖК, позволяющей осуществить процесс эпоксидирования, используя в качестве эпоксидирующего агента кислород воздуха, что позволит снизить себестоимость получаемой продукции.

<u>Объекты исследования.</u> В работе исследовались закономерности процесса эпоксидирования МЭЖК кислородом воздуха при использовании гомогенного катализатора содержащего молибден.

Методы исследования. В работе использовались: анализы на функциональные числа, газовая хроматография, газовая хроматография масс-спектрометрия, ИК- и ЯМР-спектроскопия, химические методы анализа.

<u>Научная новизна.</u> В работе впервые было установлено, что в процесс эпоксидирования МЭЖК кислородом воздуха, проводимый в барботажном реакторе, протекает в переходной области. Установлены основные компоненты участвующие и образующиеся в ходе проведения процесса эпоксидирования МЭЖК, что позволило установить схему химических превращений. Рассчитаны значения кинетических и диффузионных параметров, а так же построена математическая модель процесса, адекватно описывающая полученные экспериментальные данные.

Впервые было выяснено, что диффузия кислорода в реакционную массу влияет на селективность процесса и установлено, что для повышения селективности процесса необходимо проводить в диффузионной области.

## На защиту выносятся следующие положения:

- закономерности образования продуктов реакции эпоксидирования МЭЖК кислородом воздуха при гомогенном катализе Мо-содержащим комплексом;
- процесс эпоксидирования МЭЖК кислородом воздуха при гомогенном катализе Мо-содержащим комплексом, проводимый в барботажном реакторе протекает в переходной области при оптимальных значениях входных параметрах ведения процесса;
- определение оптимальных значений параметров ведения процесса эпоксидирования в барботажном реакторе и установление математической модели протекания процесса.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, выводов, списка литературы, включающего 120 библиографические ссылки. Диссертация изложена на 135 страницах машинописного текста, содержит 47 рисунков, 11 таблиц и 2 приложения.

<u>Личный вклад автора.</u> Диссертант участвовал в создании лабораторных установок, отработке методик физико-химических методов исследования

процессов эпоксидирования МЭЖК кислородом воздуха. Постановка и проведение экспериментальных исследований, а также систематизация, обработка и интерпретация полученных данных осуществлены непосредственно самим диссертантом.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** показана актуальность темы диссертации, приведено обоснование цели работы и определены основные задачи, обоснованы научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе диссертации представлен критический анализ литературных данных по способам проведения реакции эпоксидирования соединений содержащих одну или несколько двойных связей, а также катализаторов для проведения данного процесса. Так же в литературном обзоре рассмотрены возможные пути превращения основных компонентов и механизмы превращения. На основании проведенного анализа сделаны выводы и поставлены цели и задачи научного исследования.

**<u>Во второй главе</u>** описаны схемы и принцип действия лабораторных установок для проведения процесса эпоксидирования метиловых эфиров жирных кислот, а также методики приготовления катализатора и синтеза эпоксидированных МЭЖК.

В третьей главе диссертации представлено подробное исследование влияния различных технологических параметров на процесс эпоксидирования метиловых эфиров жирных кислот, составлена схема протекания процесса и определены наблюдаемые константы скорости всех реакций эпоксидирования. А так же в третьей главе диссертации обосновано влияние диффузии на процесс эпоксидирования МЭЖК и были уточнены численные коэффициента диффузии значения И кинетической константы расходования исходных компонентов на примере метилового эфира линолевой кислоты (МЭЛК).

## ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

- 1. Определено, что в процессе эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мо-содержащим комплексом образуется целевой продукт эпоксидированные МЭЖК. Также в данном процессе образуются продукты деструктивного окисления МЭЖК и продукты уплотнения.
- 2. Установлена схема протекания процесса эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мо-содержащим комплексом, в которой присутствуют реакции образования основных и побочных продуктов реакции из ненасыщенных компонентов МЭЖК, таких как  $C_{18/1}$  и  $C_{18/2}$ .
- 3. Предложена математическая модель протекания процесса эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мо-содержащим комплексом.
- 4. Установлены кинетические и термодинамические параметры процесса эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мосодержащим комплексом. Основной вклад в тепловой эффект процесса вносят реакции деструктивного окисления с разрывом двойной связи в непредельных соединениях МЭЖК.
- 5. Определены диффузионные параметры процесса эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мо-содержащим комплексом. Установлено, что данный процесс протекает в переходной области и для увеличения селективности процесса необходимо избегать локальных перегревов в ходе проведения процесса, в связи с чем, предпочтительней проводить процесс в диффузионной области.
- 6. На основании, полученных в результате исследования данных предложена технологическая схема процесса эпоксидирования МЭЖК в барботажном реакторе при катализе Мо-содержащим комплексом.