

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СУЛЬФИРОВАНИЯ АЛКИЛБЕНЗОЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Зыкова А.А., Долганова И.О., Долганов И.М., Ивашкина Е. Н., Сладков Д.Ю.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Алкилбензолсульфонокислоты (АБСК) представляют собой ароматические сульфоновые кислоты, содержащие алкильные заместители при бензольном кольце. Они используются в качестве исходных материалов для производства различных продуктов, таких как моющие средства, пестициды, антиоксиданты и фармацевтические препараты [1]. Для получения АБСК применяется сульфирование алкилзамещенных бензолов реакцией взаимодействия алкилбензолов с серным ангидридом. В настоящее время данный процесс преимущественно проводят в реакторах пленочного типа. В данной работе рассматривается пленочный реактор, состоящий из нескольких 120 труб, расположенных вертикально. В верхней части реактора находится распределительное устройство, которое обеспечивает равномерное распределение исходного сырья по трубам. Сырье поступает в трубы в виде пленки, которая стекает вниз по трубе под действием силы тяжести и силой сопротивления, создаваемой серным ангидридом, который подается также сверху вниз. В связи с этим обеспечивается высокая эффективность использования площади поверхности и минимальное перемешивание, что способствует более эффективному использованию энергии и более высокой селективности процесса.

Математическое моделирование является важным инструментом для проектирования и оптимизации пленочных реакторов. Оно позволяет оценить различные параметры процесса, такие как температура, давление, состав сырья и катализатора, а также определить оптимальные условия для достижения максимальной эффективности и производительности. Это важный шаг в направлении оптимизации производства, улучшения качества и повышения эффективности в производстве алкилбензолсульфонокислоты.

Разработанная в данной работе математическая модель основана на физико-химических закономерностях и учитывает процесс массопереноса. Программная реализация данной модели позволяет проводить расчеты для исследования и оптимизации процесса.

Все операции моделировались математически, использовался современный язык программирования высокого уровня. Для определения термодинамических параметров химических реакций используются методы квантовой химии.

Результатом расчетов являются корреляции выходов целевого продукта, а также побочных продуктов процесса и серной кислоты при прерывистых циклах работы реактора.

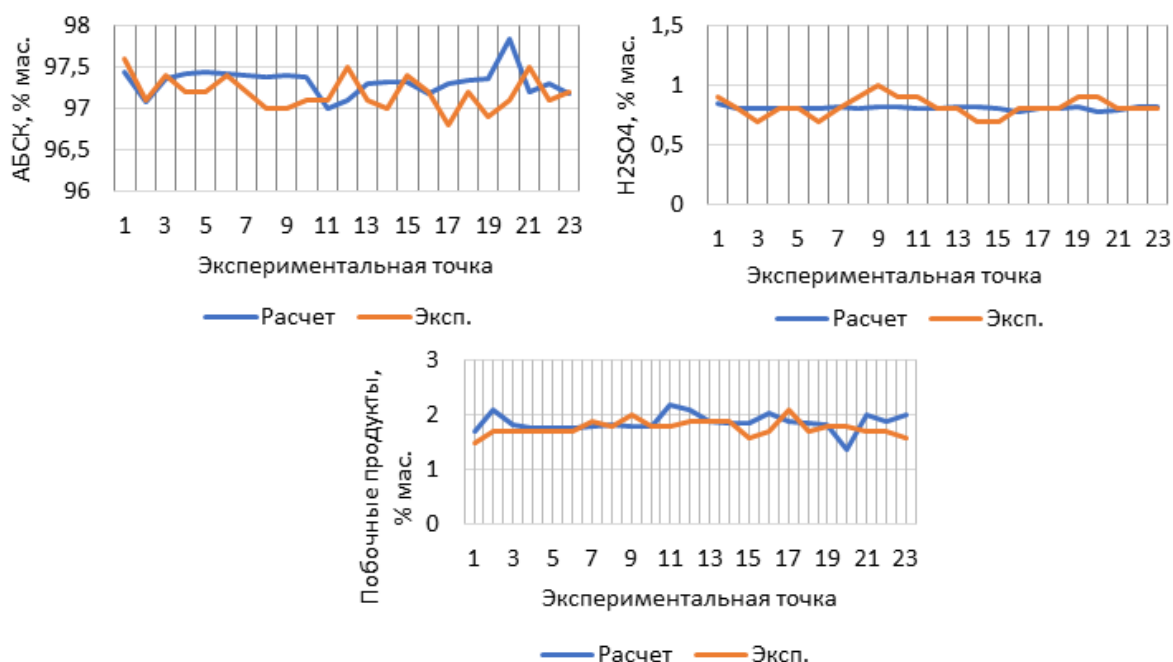


Рис. 1. Сравнение экспериментального и расчетного содержания АБСК, серной кислоты и побочных продуктов в выходном потоке

Математическая модель адекватно описывает процесс. Расчетные данные сравниваются с реальными данными действующей установки сульфирования алкилбензолов серным ангидридом. Среднее значение погрешности для всех приведенных показателей не составляет более 5 %, что означает, что дальнейшее использование данной модели целесообразно.

СЕКЦИЯ 8. ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ

На основании проведенных расчетов разработана система практических рекомендаций по повышению ресурсоэффективности сульфирования алкилбензолов.

Произведены расчеты влияния температуры сырья, концентрации серного ангидрида и мольного соотношения реагентов на массовый выход и содержание целевого продукта в выходном потоке (рис. 2-4)

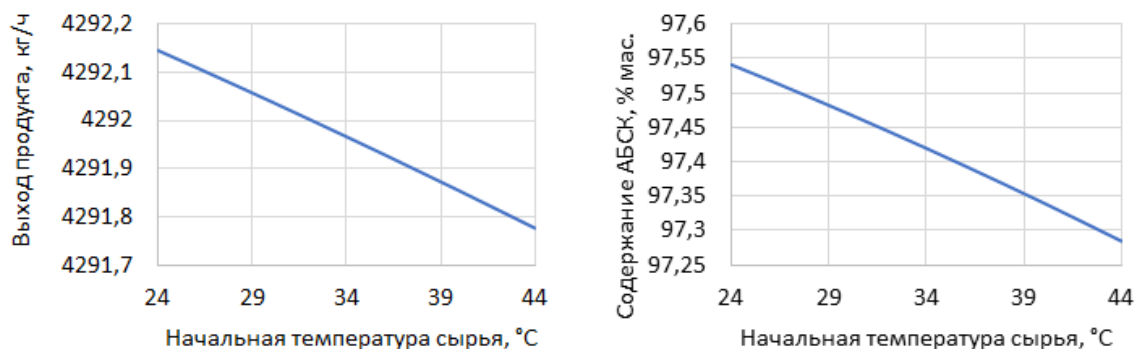


Рис. 2. Влияние температуры сырья на массовый выход и содержание целевого продукта в выходном потоке

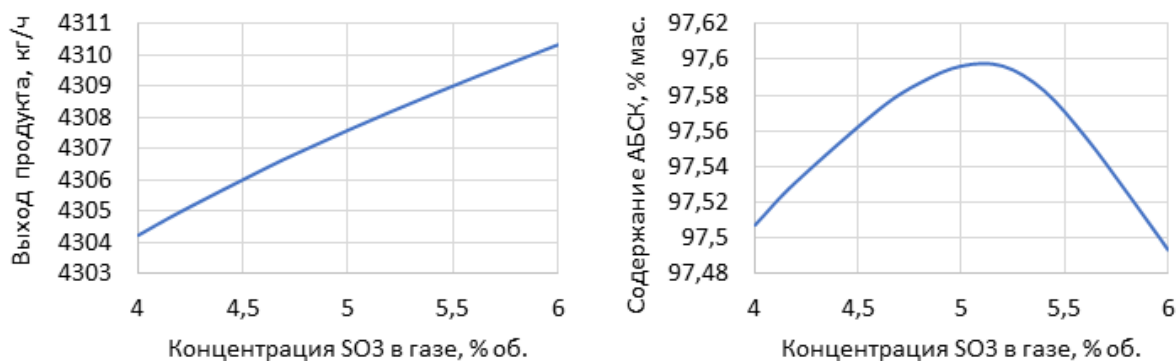


Рис. 3. Влияние концентрации серного ангидрида в исходной газовой смеси на массовый выход продукта и содержание АБСК

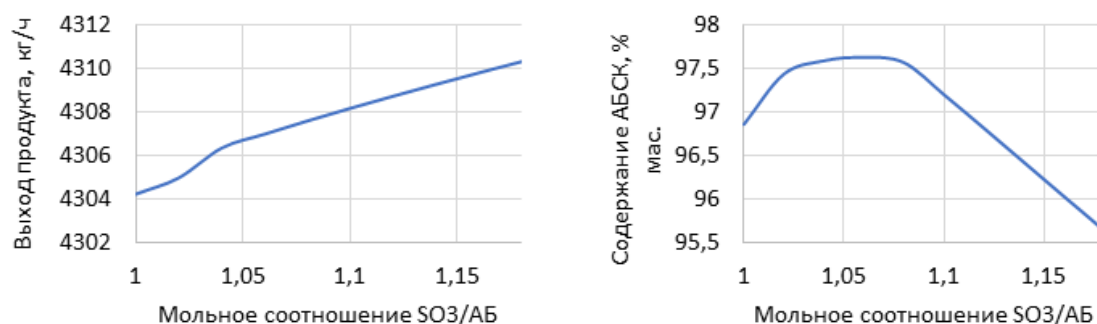


Рис. 4. Влияние мольного соотношения реагентов на массовый выход и содержание целевого продукта в выходном потоке

По результатам проведенных расчетов, при постоянных остальных технологических параметрах, оптимальный режим работы установки сульфирования алкилбензолов:

- концентрация сульфорирующего газа в газовой смеси, подаваемой в реактор – близкая к 5,2 % об.,
- температура смеси алкилбензолов на входе в реактор сульфирования – 25–28 °C,
- мольное соотношение сульфорирующего газа к сырью – 1,05–1,08.

При данных технологических параметрах работы реактора сульфирования происходит увеличение содержания целевого продукта в выходном потоке и, при этом, наибольший выход продукта.

Литература

1. Николаев П. В., Козлов Н. А., Петрова С. Н. Основы химии и технологии производства синтетических моющих средств // Иваново: Ивановский государственный химико-технологический университет. – 2007. – Т. 200. – С. 116.