**Секция «Синтез органических и неорганических веществ, композиций, полимерных материалов и математическое моделирование процессов и аппаратов для их получения»,
научный руководитель – Иванкина О.М., канд. хим. наук**

ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОТЫ РЕКТИФИКАЦИОННОЙ КОЛОННЫ

Баскаков А.В., Лапшина С.В.

*Волжский политехнический институт, Волгоград,
e-mail: hollow-ichigo@mail.ru*

Метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) – один из главных кислородосодержащих высокооктановых компонентов, используемых при получении неэтилированных автомобильных бензинов. МТБЭ применяется в качестве добавки к моторным топливам, повышающей октановое число бензинов (антидетонатор). МТБЭ широко применяется в производстве высокооктановых бензинов, при этом выступает как нетоксичный, высокооктановый компонент и как оксигенат (носитель кислорода), способствующий более полному сгоранию топлива и предотвращению коррозии металлов.

Исследуемая ректификационная колонна стоит на линии производства МТБЭ – метил-трет-бутилового эфира (структурная формула $(\text{CH}_3)_3\text{COCCH}_3$) – используемого в качестве добавки к моторным топливам, повышающей октановое число бензинов [1].

Для оптимизации процесса разработана математическая модель. Данная модель включает в себя систему уравнений для расчета: количества образующегося МТБЭ; выхода изобутана; скорость пара; диаметр колонны; гидравлическое сопротивление тарелок; количества тарелок; высоты колонны; тепловой расчет установки.

В результате анализа полученных результатов предложено заменить колпачковую тарелку на клапанную. Что приводит к уменьшению гидравлического сопротивления и энергозатрат. Повышает устойчивость колонны к перепаду нагрузок. Уменьшает чувствительность к загрязнению и общий объем ремонтно-восстановительных работ.

Разработанную математическую модель можно использовать в качестве обучающего модуля.

В сложившейся экологической обстановке необходимо уменьшать использование свинцесодержащих добавок и переходить на более экологически чистые добавки, к примеру, МТБЭ и ЭТБЭ.

Список литературы

1. Айнштейн В.Г., Общий курс процессов и аппаратов химической технологии / В.Г. Айнштейн, М. Г. Захаров – М.: Химия, 2008. – 437.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ЖИДКОФАЗНОГО ГИДРИРОВАНИЯ НИТРОБЕНЗОЛА НА НОВЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Безбабных М.В., Курунина Г.М.

*Волжский политехнический институт, филиал
ГОУ ВПО ВолгГТУ, Волжский, e-mail: galinal@mail.ru*

Учитывая чрезвычайно большие объемы промышленного выпуска анилина и его производных, проблему совершенствования технологии получения производных этих соединений в настоящее время можно считать актуальной [1]. В работе изучается реакция гидрирования нитробензола, при этом получается анилин, который применяется в производстве анилино-замещенных и лекарственных веществ, фото-материалов, анилиноформальдегидных смол, а также в качестве ускорителей вулканизации.

Работа является продолжением ряда работ проводимых на кафедре по изучению гидрирования органических нитросоединений на новых каталитических системах, содержащих платину и оксиды редкоземельных элементов [2-5].

Изучение реакции жидкофазного гидрирования нитробензола на новых каталитических системах проводили на установке [6], позволяющей измерять объем поглощенного водорода с течением времени. О полноте процесса гидрирования судили по объему поглощенного водорода. Реакцию считали законченной, если происходило прекращение поглощения водорода. Объем поглощенного водорода соответствует теоретическому, что предполагает количественное гидрирование. Каталитические системы готовили путем нанесения соли платины на оксид редкоземельного элемента с последующей сушкой при $T = 105 \pm 1^\circ\text{C}$ и измельчением [6]. Условия гидрирования: P_{H_2} = атмосферное, $T = 20 \pm 5^\circ\text{C}$. Продукты реакции анализировали хроматографическим методом.

Был определен порядок реакции гидрирования нитробензола методом подстановки и подтвержден графическим методом. Порядок – псевдопервый по нитробензолу. Каталитические системы, содержащие в своем составе оксиды редкоземельных элементов, показали активность выше, по-сравнению, с 1%Pt/Al₂O₃ катализатором, который использовался в качестве катализатора сравнения.

Оксиды редкоземельных элементов могут быть рекомендованы как составная часть катализаторов гидрирования ароматических нитросоединений.

Список литературы

1. Клюев М.В., Кочетова Л.Б. Восстановительное ацилирование нитроаренов // Известия высших учебных заведений. – С. 2-8, Т. 57. Вып.10. – 2014.
2. Костенко Н.В., Гладких Б.П., Курунина Г.М., Зорина Г.И. Гидрирование N-хлор-нитробензола на платиновых катализаторах, нанесенных на оксиды гадолиния и алюминия / Современные наукоемкие технологии. – 2013. – № 9. – С. 80-81.
3. Осипова Е.С., Курунина Г.М., Зорина Г.И., Бутов Г.М. Гидрирование p-нитрофенола на Pt катализаторах, нанесенных на оксиды РЗЭ иттриевой группы / Современные наукоемкие технологии. – 2014. – № 7-2. – С. 109.
4. Бутов Г.М., Зорина Г.И., Курунина Г.М. Жидкофазное гидрирование бенальдегида на 1% платиновых катализаторах, нанесенных на оксиды редкоземельных элементов // Ж. Хим. пром. сегодня. – № 2. – 2009. – С.3-6.
5. Бутов Г.М., Зорина Г.И., Курунина Г.М. Изучение влияния концентрации этилового спирта на скорость гидрирования p-нитротолуола на платиновых катализаторах, нанесенных на оксид гадолиния // Известия Волгоградского государственного технического университета (Сер. Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов): Межвуз. сб. науч. ст. – Волгоград: ВолгГТУ, 2009. – Вып. 6. – № 2 (50). – С. 87-90.
6. Курунина Г.М. Жидкофазное гидрирование ароматических нитросоединений на каталитических системах, содержащих Pd (Pt) и оксиды редкоземельных элементов: дис. ... канд. хим. наук. – Волгоград, 2014.

ИЗОМОРФИЗМ В КОМПЛЕКСНЫХ КРИСТАЛЛАХ А.ЛЮМОКА.НИЕВЫХ И ХРОМОКА.НИЕВЫХ КВАСЦОВ

Булкин С.И., Бобков Г.С., Шарифуллина Л.Р.

*Московский городской педагогический университет,
Москва, e-mail: aleshinaagz@yandex.ru*

Целью исследовательской работы стало изучение явления изоморфизма замещения в структуре кристалла квасцов иона Cr^{3+} на ион Al^{3+} , а также иона Al^{3+} на ион Cr^{3+} . Для визуального наблюдения

явления замещения ионов было взято три системы с разным процентным составом по массе кристаллов и 2 контрольных образца с чистыми квасцами. По выросшим кристаллам было произведено сравнение, в котором оказалось, что данные три системы не похожи на контрольные образцы. Изменение произошло в цвете всех трех систем, цвет кристаллов изменился на сине-голубой. При этом форма самих кристаллов в двух системах с соотношением Cr^{3+} к Al^{3+} равное 1:3 и 3:1 показало схожесть структур на неправильный шестиугольник. Система с соотношением Cr^{3+} к Al^{3+} , равным 1:1, дало кристаллы приблизительно ромбоикосододекаэдрической структуры. Проведенные исследования полученных комплексов методом ИК-спектрии показало наличие характеристических полос, присущих как алюмокалиевому, так и хромокалиевому квасцам, что свидетельствует о наличии ионов хрома и алюминия в структуре изучаемого комплекса.

МЕТОДИКА ПРОЧНОСТНОГО РАСЧЁТА ЭЛЕМЕНТОВ МАССООБМЕННОГО ОБОРУДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММЫ APM WINMACHINE

Ем А.Э., Харитонов В.Н.

*Волжский политехнический институт, филиал
Волгоградского государственного технического
университета, Волжский, e-mail: h-v-n@rambler.ru*

Ручное проектирование химического оборудования очень сложный и продолжительный процесс, поэтому для более точного и быстрого расчёта оборудования широко применяются различные вычислительные программы, используемые на ПК. Современные условия требуют использования ЭВМ потому что при этом значительно сокращается время расчета, появляется возможность получить гораздо больший объем информации, при наличии эффекта визуализации результатов, позволяет добиться сокращения расходов при проектировании за счет оптимизации

конструкции деталей, а следовательно, снижения их стоимости, уменьшение сложности расчетов, и снижение количества ошибок. Анализ программного обеспечения, представленный на рынке, показал, что в наибольшей степени решению таких задач удовлетворяет российский программный комплекс APM WinMachine.

Перед тем как приступить к процессу расчёта объектов, следует нарисовать их 3D-модели. Удобнее это сделать с помощью программы «Компас-3D» (рисунок), т.к. параметрический чертёжно-графический редактор «APM Win Machine» достаточно сложен в использовании. Затем, чтобы проанализировать их напряженное состояние, нужно переместить нарисованные 3D-модели в программу «APM Win Machine». Построив модель и произведя расчёт, можно наглядно увидеть на объёмных графиках, что происходит с деталью во время её работы, напряжения и деформацию в каждой её точке и др., что даст инженеру более полную информацию и позволит сделать соответствующие выводы.

Весь прочностной анализ, производимый с помощью программы «APM Win Machine», основан на полной системе уравнений теории упругости, которую составляют: уравнения равновесия Навье, закон Гука в прямой и обратной формах, а также геометрические уравнения Коши или эквивалентные им уравнения совместности деформаций Сен-Венана. Но при этом решение каждой конкретной задачи невозможно без задания некоторых дополнительных (т.н. граничных) условий определяющих конкретные режимы нагружения и закрепления тела определенной формы и размеров.

Обязательным условием, прежде чем приступать к расчёту, является установка опор и рабочей нагрузки. Для этого необходимо, с помощью функций «Установить закрепление» и «Приложить давление» в модуле APM Studio, выбрать нужные поверхности и указать нужную грань для закрепления (фиксируем перемещения по оси X, Y или Z) и аналогичным образом прикладываем давление.

Модель массообменной колонны и контактного устройства