ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

МОСКОВСКАЯ ГОСУДАРСТВЕННАЯ АКАДЕМИЯ ТОНКОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

им. М.В. ЛОМОНОСОВА

*На правах рукописи*

**ШАЛУНОВА СВЕТЛАНА ЮРЬЕВНА**

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОРГАНИЗАЦИИ
РЕАКЦИОННО-РЕКТИФИКАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С
НЕСКОЛЬКИМИ ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ**

05.17.04.

******Технология органических веществ**

диссертация

на соискание ученой степени
кандидата технических наук

**Научный руководитель**

**д.т.н., проф. Писаренко Ю.А.**

***Москва 2007***

***Содержание***

[*Введение* *4*](#bookmark3)

[*1 .Литературный обзор* *10*](#bookmark4)

1. [*Методы получения изучаемых промышленных систем* *10*](#bookmark5)
2. [*Методы получения этилацетата* *10*](#bookmark6)
3. *Реакция Тищенко* *11*
4. *Взаимодействие уксусной кислоты с этиленом* *12*
5. *Реакция этерификации* *13*
6. [*Получение окиси мезитила конденсацией ацетона* *20*](#bookmark10)
7. [*Методы полученш метилтретбутилового эфира* *26*](#bookmark11)
8. *Получение МТБЭ взаимодействием изобутилена и метанола* *26*
9. *Способ получения МТБЭ из смеси бутанов* *31*
10. *Реакционно-ректификационный процесс получения МТБЭ* *32*
11. [*Методы получения диизопропилового эфира* *35*](#bookmark12)
12. *Термодинамика гетерогенных систем с несколькими химическими реакциями* *41*
13. [*Статика реакционных систем, определяемая стехиометрией* *43*](#bookmark16)
14. [*Термодинамическое описание многофазных реакционных систем* *46*](#bookmark18)
15. [*Двухфазные реакционные системы* *51*](#bookmark24)
16. [*Азеотропия и безразличные состояния* *58*](#bookmark27)
17. [*Процессы открытого равновесного испарения с химическими реакциями* *61*](#bookmark28)
18. [*Некоторые понятия из области топологии* *65*](#bookmark29)
19. *Непрерывные совмещенные реакционно-ректификационные процессы. Методы*

*исследования и разработки* *75*

1. [*Анализ статики НСРРП с локализованной реакционной зоной* 77](#bookmark32)
2. *Совмещенные процессы с одной химической реакцией* *79*
3. *Совмещенные процессы с несколькими химическими реакциями* *83*
4. [*Анализ статики НСРРП с нелокализованнойреакционной зоной* *84*](#bookmark33)
5. *Совмещенные процессы с одной химической реакцией* *85*
6. *Совмещенные процессы с несколькими химическими реакциями* *87*
7. [*Математическое моделирование* *87*](#bookmark34)
8. [*Экспериментальный метод* *88*](#bookmark35)
9. [*Выводы литературного обзора* *90*](#bookmark36)

[*2. Основная часть* *91*](#bookmark37)

1. [*Вывод правила азеотропии для концентрационных п-уголъников* *94*](#bookmark38)
2. *Анализ возможных форм правила азеотропии для треугольных диаграмм*

*дистилляции* *114*

1. [*Синтез диаграмм равновесной дистилляции* *126*](#bookmark51)
2. [*Равновесие для различных систем* *151*](#bookmark52)
3. [*Система получения этилацетата* *151*](#bookmark53)
4. *Расчет положения и типа особых точек* *157*
5. [*Система получения окиси мезитила* *162*](#bookmark67)
6. *Расчет положения и типа особых точек* *166*
7. [*Система получения метилтретбутилового эфира* *169*](#bookmark76)
8. [*Система полученш диизопропилового эфира* *174*](#bookmark81)

[*2.5 Анализ статики промышленных систем* *180*](#bookmark84)

[*2.5.1 Система полученш этилацетата* *186*](#bookmark87)

1. *Первое заданное разделение* *186*
2. *Второе заданное разделение* *190*
3. [*Анализ статики процесса получения окиси мезитила* *191*](#bookmark92)
4. *Второе заданное разделение* *192*
5. [*Анализ статики процесса получения метштретбутилового эфира* *195*](#bookmark98)
6. *Первое заданное разделение* *196*
7. *Второе заданное разделение* *198*
8. [*Анализ статики процесса получения диизопропилового эфира* *200*](#bookmark108)
9. *Первое заданное разделение* *201*
10. *Второе заданное разделение* *202*

***3. Выводы* *205***

[***Список литературы* *206***](#bookmark114)

[***Приложение 1* *216***](#bookmark115)

1. *Программа синтеза фазовых диаграмм для четырехугольных симтициальных*

*комплексов:* *216*

1. *Программа синтеза внутренней структуры четырехугольного симплициального*

*комплекса при отсутствии внутренней точки* *219*

***Приложение 2. Синтезированные фазовые диаграммы для двумерного***

***четырехугольного симплициального комплекса* 222**

***Приложение 3. Диаграммы равновесия Жидкость -Пар для диметилового эфира***

***и метилтретбутилового эфира* *231***

***Приложение 4. Диаграммы ранвовесия Жидкость-Пар для диизопропилового***

***эфира* 237**

[***Приложение 5* *242***](#bookmark120)

[*Исходный файл для системы получения этилацетата* *242*](#bookmark121)

[*Исходный файл для системы получения окисимезитила* *243*](#bookmark122)

[*Исходный файл для системы получения МТБЭ* *244*](#bookmark126)

[*Исходный файл для системы получения диизопропилового эфира* *245*](#bookmark130)

1. **Выводы**

Таким образом, в настоящей работе:

1. Предложены алгоритм построения ©-многообразий и геометрическая интерпре­тация вывода правила азеотропии для двумерных «-угольных диаграмм (или фрагментов диаграмм) процессов реакционной дистилляции с несколькими химическими реакциями.

2.0босновано соотношение между числом вершин исходной диаграммы реакцион­ной дистилляции ***п*** и родом ©-многообразия, полученного отождествлением границ ука­занной диаграммы.

3.Обоснована справедливость соотношения между числом различных особых точек исходной диаграммы процесса реакционной дистилляции и топологическими свойствами соответствующих им ©-многообразий.

1. Получена обобщенная форма правила азеотропии для двумерных многообразий процессов равновесного открытого испарения с химическими реакциями, определен базо­вый набор уравнений, выражающих правило азеотропии. Показано, что в этом случае уравнение Гурикова и обобщенное уравнение Жарова являются независимыми и допол­няют друг друга.
2. Сформулирован научный подход и на его основе синтезировано полное множест­во двумерных диаграмм реакционной дистилляции с химическими реакциями. Получено 6 неизвестных ранее типов диаграмм. Алгоритм синтеза может быть распространен на диа­граммы с числом измерений, превышающих два.
3. Предложен принцип классификации и проведена классификация синтезирован­ных (см. п. 5) диаграмм.
4. Сформулированы правила построения многообразий химического равновесия, представляющих фазовые пространства реакционно-ректификационных процессов с не­сколькими химическими реакциями, протекающих в условиях химического равновесия.
5. Исходя из полученных многообразий, установлены закономерности протекания ряда технологических процессов, в частности, получения этилацетата, окиси мезитила, метилтретбутилового эфира, диизопропилового эфира.
6. Сформулирован принцип понижения размерности фазового пространства за счет достижения химического равновесия. На его основе предложены варианты организации реакционно-ректификационных процессов для систем получения этилацетата, окиси ме­зитила, метилтретбутилового эфира, диизопропилового эфира. Показано, что в случае системы получения окиси мезитила происходит существенное упрощение технологиче­ской схемы за счет использования указанного принципа.