УДК 661.4:54.06

СТВОРЕННЯ КОМП'ЮТЕРНОЇ МОДЕЛІ КАТАЛІТИЧНОГО ПРОЦЕСА ОКСИХЛОРУВАННЯ ЕТИЛЕНУ ЗА ДОПОМОГОЮ CHEMCAD

Адамян Д.Р., Глікіна І.М., Кудрявцев С.О., Глікін М.А.

CREATION OF THE COMPUTER MODEL OF THE CATALYTIC PROCESS OF OXIDATIVE CHLORINATION OF ETHYLENE WITH THE CHEMCAD SOFTWARE PACKAGE

Adamyan David R., Glikina Irene M., Kudryavtsev Sergey A., Glikin Marat A.

В статті построєна комп'ютерна модель процесу оксихлорування етилену. Проведені дослідження й розглянутий вплив співвідношення реагентів вихідної суміші на вихід 1,2-дихлоретану. Була запропонована схема використання процесу оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану у досконаленій схемі виробництва вінілхлориду в умовах технології аерозольного нанокаталіза.
Ключові слова: *оксихлорування, етилен, ChemCad, 1,2-дихлоретан, аерозольний нанокаталіз*

1. Вступ

Для побудови комп'ютерної моделі ми використовуємо програмний комплекс ChemCad.

ChemCad був створений для комп'ютерного моделювання хіміко-технологічних процесів при розробці, модернізації та оптимізації хімічних, нафтохімічних та нафтопереробних виробництв.

ChemCad дозволяє математично моделювати хіміко-технологічні процеси, вирішувати завдання дослідження і проектування.

Структура ChemCad - модульна. Це дозволяє складати хіміко-технологічну схему і здійснювати її розрахунок.

Найбільш поширеним продуктом у народному господарстві є хлорорганічні сполуки. Особливо широко розповсюджені вони у полімерній промисловості, як мономери чи розчинники, в сільському господарстві, як сировина для пестицидів та в інших галузях, у якості розчинників та холодоагентів. Різноманітність існування хлорорганічних сполук призводить до постійного створення унікальних технологій їх отримання. При цьому дотримують усі технологічні принципи побудови, які можуть бути поштовхом для створення безвідходних виробництв. Найбільш поширеною хлоровмісною сполукою є 1,2-дихлоретан. Він знайшов широке застосування в якості розчинника для більшості галузей промисловості та як напівпродукт в синтезі більш цінних хлорорганічних продуктів, наприклад вінілхлориду. [1].

Відомими у загальній хімії є три способи одержання 1,2-дихлоретану:

- хлорування етилену в газовій або рідкій фазі в присутності каталізатора;
- хлорування етану в газовій фазі;
- окисне хлорування етилену в газовій фазі на каталізаторі Дикона.

Однак у промисловості найбільш поширеними є тільки два метода за якими отримують 1,2-дихлоретан:

- пряме хлорування етилену в рідкій фазі в присутності каталізатора ($FeCl_3$);
- окисне хлорування етилену в паровій фазі на каталізаторі Дикона.

Перший з них є найбільш поширений в промисловості і відноситься до йонно-каталітичного галогенування. Раніше цей процес галогенування олефінів здійснювали в газовій фазі і механізм реакції був радикально-ланцюговий. Використання рідкої фази відзначили, що реакція різко прискорюється, перебігає в розчині й механізм реакції змінюється. Однак це не виключає утворення ряду побічних продуктів. Для їх зниження додатково вводять сполуки – інгібітори ланцюгових реакцій, зокрема кисень.

Окисне хлорування етилену є невід'ємною частиною схеми у виробництві вінілхлориду, який у свою чергу посідає місце одного з провідних цільових хлорорганічних продуктів [2]

Стаття спрямована на вивчення процесу окисного хлорування олефінів на прикладі етилену з одержанням 1,2-дихлоретану.

У теперешній використовують процес оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану, але при об'єднанні з процесом хлорування до однії схеми. Це дозволило у сучасних технологіях збалансувати витрати і викиди хлору на виробництвах.

У даній статті розглянемо умови перебігу процесу оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану та можливість включення цієї реакції до схеми отримання вінілхлориду за перспективною технологією аерозольного нанокаталізу.

2. Мета й задачи дослідження

Метою роботи є вивчення реакції оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану за допомогою комп'ютерної програми ChemCad з впровадженням його до технологічної схеми виробництва вінілхлориду в умовах аерозольного нанокаталізу.

Для досягнення цієї мети були поставлені наступні задачи:

- проаналізувати існуючи методи одержання 1,2-дихлоретану оксихлоруванням етилену;
- ознайомитись з програмним комплексом ChemCad, створити модель процесу дослідження та проаналізувати вихід цільового продукту;
- визначити вплив параметрів керування перебігом процесу (температура, співвідношення вихідних реагентів);
- припустити схему застосування процесу оксихлорування етилену з одержанням 1,2-дихлоретану.

3. Аналіз методів одержання 1,2-дихлоретану оксихлоруванням етилену

Відомим фактом є те, що процес оксихлорування вуглеводнів дозволяє утилізувати газоподібний хлороводень, як продукт процесів хлорування і дегідрохлорування при виробництві хлорорганічних продуктів.

При використанні комбінованої схеми виробництва вінілхлориду досягається повне використання хлору. При цьому в схемі одночасно поєднуються пряме хлорування і оксохлорування етилену та принципову схему можливо побачити на Рис. 1.

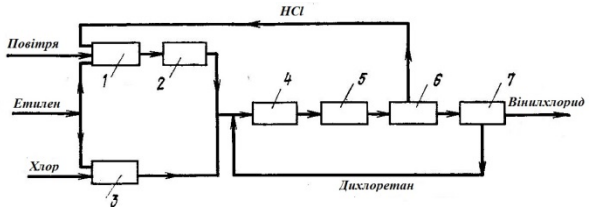

Рис. 1. Схема хлорування етилену з використанням відвода хлористого водню:
1 - реактор окисного хлорування; 2 - вузол виділення дихлоретану; 3 - реактор хлорування; 4 - агрегат очищення дихлоретану; 5 - реактор крекінгу дихлоретану; 6 - агрегат очищення хлористого водню; 7 - агрегат очищення вінілхлориду

За цією схемою етилен паралельно подають в реактор 3 прямого хлорування і в реактор 1 окисного хлорування. У реактор 1 також подають хлористий водень і повітря. Хлористий водень повертають зі стадії прямого хлорування етилену. Окисне хлорування проводять при 200-300 °С в присутності каталізатора. Агрегат 2 призначений для виділення дихлоретану, який разом з дихлоретаном із реактора 3 надходить на очистку в агрегат 4. Агрегат 5 призначений для крекінгу дихлоретану. Очищення хлористого водню проводять у вузлі 6, очищений газ повертають в процес. Очищення вінілхлориду проводять в вузлі 7, а відокремлений дихлоретан повертають у цикл [3].

У 1960-х рр. процес оксихлорування етилену в нерухомому шарі каталізатора розроблений компанією «Штауффер». Процес зазвичай багатостадійний, що полегшує управління сильноекзотермічною реакцією.

Принципова схема оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану у трубчатому реакторі з нерухомим шаром представлена на Рис. 2.

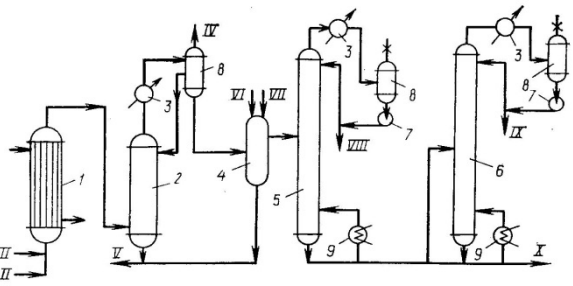

Рис. 2. Принципова схема отримання 1,2-дихлоретану окисним хлоруванням етилену:
1 - реактор; 2 - гартівна колона; 3 - холодильник; 4 - нейтралізатор; 5, 6 - ректифікаційні колони; 7 - насос; 8 - збірник; 9 - кип'ятильник; I - HCl; II - повітря; III - C2H4; IV - на абсорбцію; V - на очистку; VI - вода; VII - NaOH; VIII - легка фракція; IX - 1,2-дихлоретан; X - кубові залишки

При використанні цієї схеми в трубчастий реактор 1 подають етилен, HCl і повітря. Реакція відбувається при 210-260 °С в присутності каталізатора алюміній оксиду або алюмосилікату, покритого хлоридом міді. В процесі застосовують невеликий надлишок етилену. У гартівній колоні 2 відокремлюють HCl. Інертні гази відходять зверху збірника 8, верхній шар з якого надходить в колону 2, а хлоровмісний продукт нейтралізують і промивають в колоні 4, далі розділяють в секції ректифікації на легку фракцію і дихлоретан в колонах 5 і 6. Кубові залишки відводять. У колоні 5 також осушують вологий дихлоретан азеотропною перегонкою.

Питома витрата сировини і енергоресурсів у виробництві 1,2-дихлоретану хлоруванням етилену: етилен - 0,315 т; хлор - 0,72 т; електроенергія - 16,3 кВт·ч; водяна пара - 3 ГДж; вода - 55 м^3; холод - 2,9 ГДж [2].

Процес оксихлорування етилену проводили й у пседозрідженому шарі. Одна з таких схем представлена на Рис. 3. Це схема трьохстадійної установки оксихлорування з реактором для вилучення етилену.

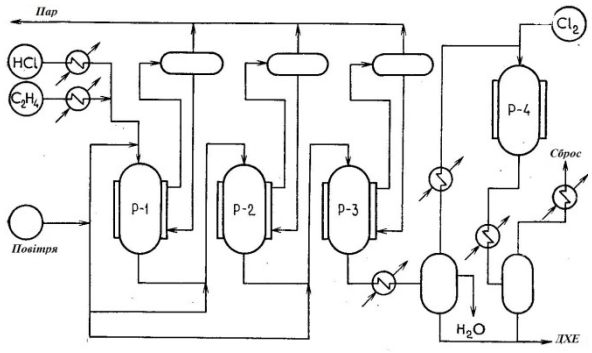

Рис. 3. Система оксихлорування етилену в нерухомому шарі каталізатора з реактором для вилучення етилену

Процес оксихлорування в реакторі з псевдозрідженим шаром проводять на каталізаторі, який створенний за схемою Б.Ф. Гудріча. Процес був відкрит в 1960-х роках. Киплячий шар є ізотермічним процесом, температура по всьому реактору однакова в межах 220-225 °С. Для збільшення ефективності процесу і полегшення конденсації дихлоретану підтримують тиск в реакторі трохи вище атмосферного (1,7-2,5 атм). У процесі використовують каталізатор Дикона, у якому активним компонентом є дихлорид міді. При цьому Б.Ф. Гудріч вказав, що переважно використовувати 3,5-7% мас. міді і 7,4-14,8% мас - $CuCl_2$. Якщо вміст міді перевищує 12%, то швидкість реакції не підвищується і виникає небезпека спікання каталізатора.

На Рис. 4 показана ще одна система оксихлорування етилену в киплячому шарі каталізатора.

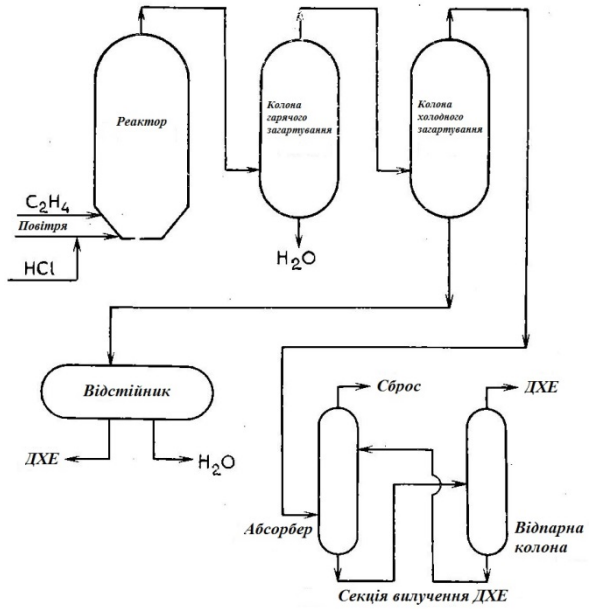

Рис. 4. Система оксихлорування етилену в киплячому шарі каталізатора

Більшість цієї системи зайнята процесами очищення дихлоретану від інших продуктів. Система очищення складається з декількох складних апаратів [4].

При розгляді існуючих методів перебігу процесу оксихлорування етилену з отриманням 1,2-дихлоретану було виявлено, що даний процес, за роки свого існування постійно вдосконалювався. Відзначимо, що навіть за невисокої температури в реакторах можуть виникнути «гарячі» зони, які призводять до втрати селективності. Вияснено, що при використанні реактора з нерухомим шаром каталізатора, останній має складну трубчасту конструкцію.

В ході процесу виникають труднощі з регулюванням температури через виділення великої кількості теплоти. Існують проблеми з використанням багатокомпонентного каталізатора та складність його приготування. В процесі з нерухомим шаром ще можуть паралельно утворюватися й інші сполуки, що містять хлор, окрім дихлоретану.

4. Хімізм і механізм процесу оксихлорування етилену

Основою процесу оксихлорування служить газофазний процес окислення хлориду водню на каталізаторах, що містять хлорид міді (реакція Дикона). Відомо, що при спільному перебігу процесів Дикона і хлорування рівновага реакції зсувається за рахунок використання хлору, тому HCl повністю витрачається.

Реакції оксихлорування практично необоротні, при цьому хлорид міді залишається єдиним каталізатором окислення HCl і процесу оксихлорування. Для цього Диконом була запропонована схема окислення HCl:

$$2CuCl_2 \longleftrightarrow Cu_2Cl_2 + Cl_2^{газ}$$

$$Cu_2Cl_2 + 0{,}5O_2 \longrightarrow CuO \cdot CuCl_2$$

$$CuO \cdot CuCl_2 + 2HCl^{газ} \longleftrightarrow 2CuCl_2 + H_2O^{газ}$$

Після цього був ще запропонований механізм отримання 1,2-дихлоретану при взаємодії етилену з дихлоридом міді, з утворенням відновленої форми міді:

$$2CuCl_2 + C_2H_4 \longrightarrow C_2H_4Cl_2 + Cu_2Cl_2$$

$$Cu_2Cl_2 + 2HCl + 0{,}5O_2 \longrightarrow 2CuCl_2 + H_2O$$

Тому в разі окисного хлорування етилену при 210-280 °С відбувається приєднання хлору на місці подвійного зв'язку. Встановлено, що хлорування здійснюється не хлором, а дихлоридом міді, який під дією HCl і O_2 регенерується:

$$CH_2 = CH_2 + 2HCl + 0{,}5O_2 \longrightarrow ClCH_2 - CH_2Cl + H_2O$$

$$CH_2 = CH_2 + 2CuCl_2 \longrightarrow ClCH_2 - CH_2Cl + Cu_2Cl_2$$

$$Cu_2Cl_2 + 2HCl + 0{,}5O_2 \longrightarrow CuCl_2 + H_2O$$

Передбачається, що в присутності кисню Cu2Cl2 окиснюється в оксохлориди міді (II), а в присутності HCl переходить в $CuCl_2$ [5].

5. Методика побудова схеми та ввод даних її модулів для процесу оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану

Спочатку роботи с програмою ChemCad ми вибираємо одиниці вимірювання параметрів величин. Для досліджуваного процесу оксихлорування етилену приймаємо наступні одиниці: годину; кмоль; °С; кПа; атомні частки.

Далі зі списку речовин бази даних програми необхідно вибрати усі речовини, які беруть участь і утворюються в ході хімічної взаємодії.

Програма має свого майстра термодинаміки, тому для досліджувального процесу встановлюємо моделі розрахунку константи рівноваги і ентальпії. У програмному комплексі ChemCad до цих параметрів входить інтервал величин по температурі й тиску.У нашому випадку вибір показаний на Рис. 5.

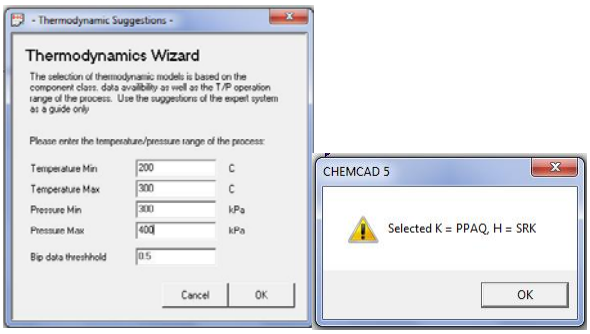

Рис. 5. Панель вводу фізико-хімічних величин параметрів процесу оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану

Схема, яка описує процес оксихлорування етилену з одержанням 1,2-дихлоретану у програмі ChemCad виглядає як показано на Рис. 6.

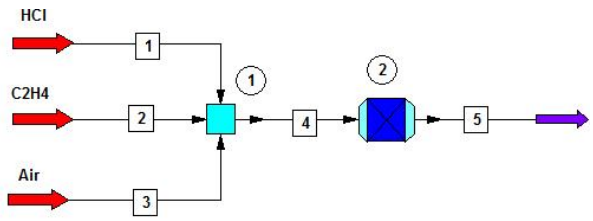

Рис. 6. Комп'ютерна модель схеми процесу оксихлорування етилену з одержанням 1,2-дихлоретану

В цій схемі використано 5 модулів програми, а саме:

- потік живлення;
- потік продукту
- формування потоків, що пов'язують апарати, а також елементи, відповідні потокам живлення і продуктових потоків;
- модуль змішування потоків;
- моделювання однієї хімічної реакції – модуль стехіометричного реактора.

Важливим фактом є те, що модулі пов’язані з хімічною реакцією мають тільки один потік живлення та один потік продукту. Тому якщо до реактору надходить суміш, тоді нобхідно використовуати модуль змішування потоків.

Брутто-реакція процесу оксихлорування етилену з одержанням 1,2-дихлоретану для системи ChemCad буде виглядати наступним чином:

$$-C_2H_4 - 2HCl - \frac{1}{2}O_2 + C_2H_4Cl_2 + H_2O = 0$$

Виділивши на схемі змішувач 1, знаходимо й натискаємо панель «Редагувати параметри потоків модуля» та у відкрившемуся вікні ми вводимо параметри усіх трьох вхідних потоків за дослідженням та обчисленими кількостями речовин при відповідному співвідношенні.

Коли ми виділили на схемі модуль реактора, знаходимо й натискаємо команду Edit Unit On Data та виводимо панель реактора. На цій панелі задаємо температуру ізотермічного процесу, ступінь перетворення ключового компонента (у нашому випадку ми взяли HCl), стехіометричні коефіцієнти балансового рівняння реакції (Рис. 7).

Після вводу параметрів процесу виконують розрахунок та виводять меню видачі звіту й вказують у якому вигляді слід виводити результати розрахунку [6].

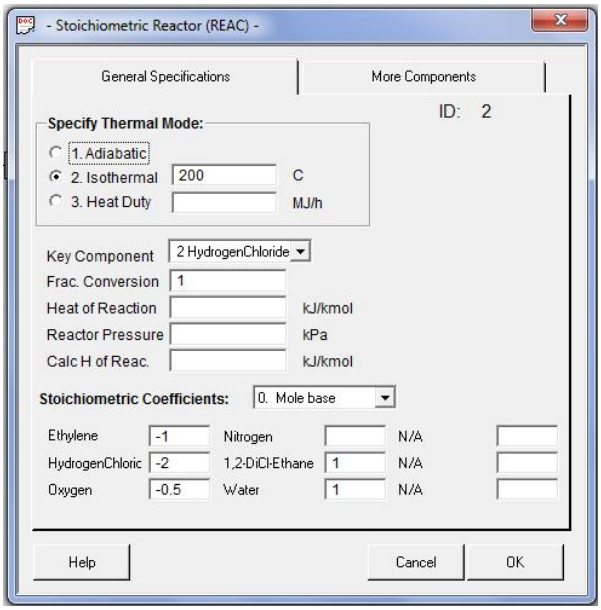

Рис. 7. Панель вводу параметрів стехіометричного реактора процесу оксихлорування етилену з одержанням 1,2-дихлоретану

6. Результати дослідження процесу оксихлорування етилену

Розрахунок будемо вести на 1000 кг етилену (n1 = 36,65 кмоль), при цьому підтримучюи постійним тиск 350 кПа та температуру 220 °С.

При аналізі літератури було з'ясовано, що молярне співвідношення C_2H_4:O_2:HCl=1:(0,75-0,8):(1,85-1,9) сприяє високій конверсії вихідних речовин і досить високим виходом цільового продукту (1,2-дихлоретану). При цьому температура процесу досягає 210-230 °С і тиск – 0,35-0,5 МПа.

В експерименті №1 ми досліджували співвідношення вихідних речовин C_2H_4:O_2:HCl=1:0,8:1,9.

Для дослідження нам знадобиться кількість вихідних речовин у кмоль, які ми й обчислюємо:

HCl: $n_3 = 1.9 \cdot n_1 = 1.9 \cdot 36.65 = 67.74$

O_2: $n_4 = 0.8 \cdot n_1 = 0.8 \cdot 36.65 = 29.32$

N_2: $n_5 = n_4 \cdot 0.79/0.21 = 29.32 \cdot 0.79/0.21 = 110.3$

Результати розрахунку цього матеріального балансу наведені у Таблиці 1.

В експерименті №2 ми досліджували співвідношення вихідних речовин C_2H_4:O_2:HCl=1:0,75:1,85.

Для дослідження нам знадобиться кількість вихідних речовин у кмоль, які ми й обчислюємо:

HCl: $n_3 = 1.85 \cdot n_1 = 1.85 \cdot 36.65 = 67.80$

O_2: $n_4 = 0.75 \cdot n_1 = 0.75 \cdot 36.65 = 27.49$

N_2: $n_5 = n_4 \cdot 0.79/0.21 = 27.49 \cdot 0.79/0.21 = 103.4$

Результати розрахунку цього матеріального балансу наведені у Таблиці 2.

В експерименті №3 ми досліджували співвідношення вихідних речовин C_2H_4:O_2:HCl=1:0,6:1,7.

Для дослідження нам знадобиться кількість вихідних речовин у кмоль, які ми й обчислюємо:

HCl: $n_3 = 1.7 \cdot n_1 = 1.7 \cdot 36.65 = 62.31$

O_2: $n_4 = 0.6 \cdot n_1 = 0.6 \cdot 36.65 = 21.99$

N_2: $n_5 = n_4 \cdot 0.79/0.21 = 21.99 \cdot 0.79/0.21 = 82.72$

Результати розрахунку цього матеріального балансу наведені у Таблиці 3.

В експерименті №4 ми досліджували співвідношення вихідних речовин C_2H_4:O_2:HCl=1:0,85:1,95.

Для дослідження нам знадобиться кількість вихідних речовин у кмоль, які ми й обчислюємо:

HCl: $n_3 = 1.95 \cdot n_1 = 1.95 \cdot 36.65 = 71.47$

O_2: $n_4 = 0.85 \cdot n_1 = 0.85 \cdot 36.65 = 31.15$

N_2: $n_5 = n_4 \cdot 0.79/0.21 = 31.15 \cdot 0.79/0.21 = 117.18$

Результати розрахунку цього матеріального балансу наведені у Таблиці 4.

В експерименті №5 ми досліджували співвідношення вихідних речовин C_2H_4:O_2:HCl=1:0,7:1,8.

Для дослідження нам знадобиться кількість вихідних речовин у кмоль, які ми й обчислюємо:

HCl: $n_3 = 1.8 \cdot n_1 = 1.8 \cdot 36.65 = 65.97$

O_2: $n_4 = 0.7 \cdot n_1 = 0.7 \cdot 36.65 = 25.66$

N_2: $n_5 = n_4 \cdot 0.79/0.21 = 25.66 \cdot 0.79/0.21 = 96.53$

Результати розрахунку цього матеріального балансу наведені у Таблиці 5.

У ході експерименту був визначенний тепловий ефект при різних значеннях температури. Залежність представлена на Рис. 8.

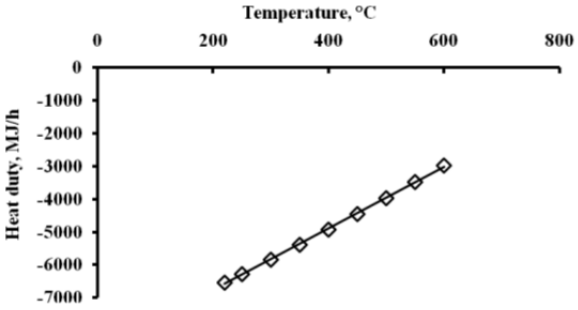

Рис. 8. Тепловий ефект процесу оксихлорування етилену до 1,2-дихлоретану в інтервалі температур 200-600 °C

Таблиця 1

Матеріальний баланс процесу при співвідношенні C_2H_4:O_2:HCl=1:0,8:1,9
Overall Mass Balance

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Ethylene	36.650	2.780	1028.179	77.990
HydrogenChloride	67.740	0.000	2469.868	0.000
Oxygen	29.320	12.385	938.211	396.308
Nitrogen	110.300	110.300	3089.944	3089.944
1,2-DiCl-Ethane	0.000	33.870	0.000	3351.741
Water	0.000	33.870	0.000	610.168
Total	244.010	193.205	7526.202	7526.151

Таблиця 2

Матеріальний баланс процесу при співвідношенні C_2H_4:O_2:HCl=1:0,75:1,85
Overall Mass Balance

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Ethylene	36.650	2.750	1028.179	77.149
HydrogenChloride	67.800	0.000	2472.056	0.000
Oxygen	27.490	10.540	879.653	337.269
Nitrogen	103.400	103.400	2896.648	2896.648
1,2-DiCl-Ethane	0.000	33.900	0.000	3354.710
Water	0.000	33.900	0.000	610.709
Total	235.340	184.490	7276.535	7276.484

Таблиця 3

Матеріальний баланс процесу при співвідношенні C_2H_4:O_2:HCl=1:0,6:1,7
Overall Mass Balance

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Ethylene	36.650	5.495	1028.179	154.157
HydrogenChloride	62.310	0.000	2271.885	0.000
Oxygen	21.990	6.412	703.658	205.194
Nitrogen	82.720	82.720	2317.318	2317.318
1,2-DiCl-Ethane	0.000	31.155	0.000	3083.068
Water	0.000	31.155	0.000	561.257
Total	203.670	156.938	6321.040	6320.993

Таблица 4

Матеріальний баланс процесу при співвідношенні C_2H_4:O_2:HCl=1:0,85:1,95
Overall Mass Balance

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Ethylene	36.650	0.915	1028.179	25.669
HydrogenChloride	71.470	0.000	2605.868	0.000
Oxygen	31.150	13.283	996.769	425.027
Nitrogen	117.180	117.180	3282.680	3282.680
1,2-DiCl-Ethane	0.000	35.735	0.000	3536.300
Water	0.000	35.735	0.000	643.766
Total	256.450	202.848	7913.497	7913.442

Таблица 5

Матеріальний баланс процесу при співвідношенні C_2H_4:O_2:HCl=1:0,7:1,8
Overall Mass Balance

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Ethylene	36.650	3.665	1028.179	102.818
HydrogenChloride	65.970	0.000	2405.332	0.000
Oxygen	25.660	9.168	821.094	293.351
Nitrogen	96.530	96.530	2704.191	2704.191
1,2-DiCl-Ethane	0.000	32.985	0.000	3264.162
Water	0.000	32.985	0.000	594.225
Total	224.810	175.333	6958.797	6958.747

7. Аналіз отриманих результатів

Для полегшення розглядання експериментальних даних представимо результати експериментів у вигляді таблиці 6.

Це дозволяє більш детальніше розглянути умови перебігу процесу та провести подальший аналіз результатів.

З результатів таблиці 6 відно, що зі збільшенням співвідношення масовий вихід 1,2-дихлоретану незначно зростає. При цьому можливо відмітити деяки співвідношення, при яких отримували практично однаковий вихід 1,2-дихлоретану. Цими співвідношенями є C_2H_4:O_2:HCl=1:0,8:1,9 та C_2H_4:O_2:HCl=1:0,75:1,85.

Вплив маси хлороводню у вихідній суміші на вихід масової кількості продуктів показана на Рис. 9. Бачимо, що маса 1,2-дихлоретану плавно збільшується зі збільшенням кількості хлороводню у вихідній суміші, при цьому отримана кількість води майже не змінюється.

Відомим фактом є те, що етилен у суміші з повітрям вибухонебезпечний, тому він має свої межі вибуховості, а саме нижню межу вибуховості – 2,75% об., верхню межу вибуховості – 28,6 %об. З цього слід, що даний процес треба проводити при вибухобезпечній межі за етиленом [7].

Залежність виходу 1,2-дихлоретану від об'ємної концентрації етилену у вихідній суміші показана на Рис. 10.

Таблиця 6

Результати експериментів з впливом співвідношення речовин

Співвідношення реагентів	Кількість речовин на виході з системи							
C_2H_4:O_2:HCl	C_2H_4		O_2		$C_2H_4Cl_2$		H_2O	
	кг/год	%мол.	кг/год	%мол.	кг/год	%мол.	кг/год	%мол.
1:0,85:1,95	25,669	0,45	425,027	6,55	3536,3	17,62	643,766	17,62
1:0,8:1,9	77,99	1,44	396,308	6,41	3351,741	17,53	610,168	17,53
1:0,75:1,85	77,149	1,49	337,269	5,71	3354,710	18,375	610,709	18,375
1:0,7:1,8	102,818	2,09	293,351	5,23	3264,162	18,8	594,225	18,8
1:0,6:1,7	154,157	3,5	205,194	4,09	3083,068	19,85	561,257	19,85

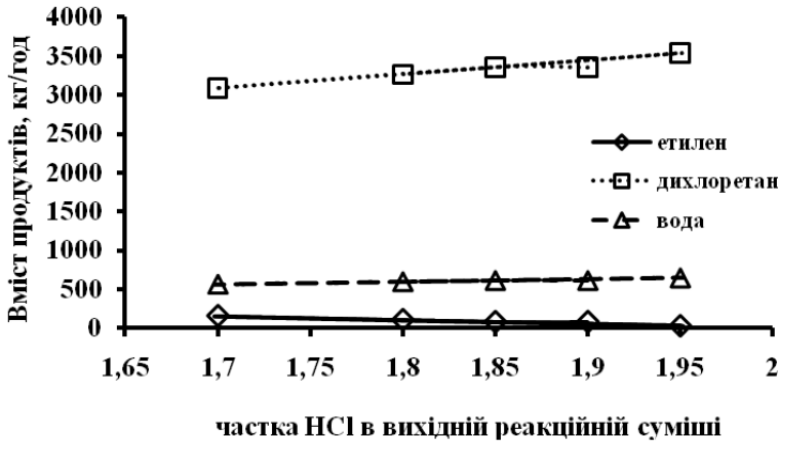

Рис. 9. Залежність виходу продуктів реакції від частки HCl вихідній реакційній суміші

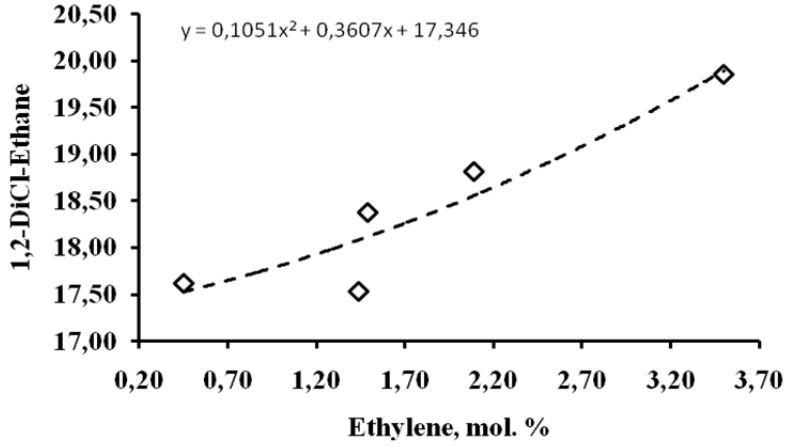

Рис. 10. Залежність виходу 1,2-дихлоретану від концентрації етилену у вихідній суміші

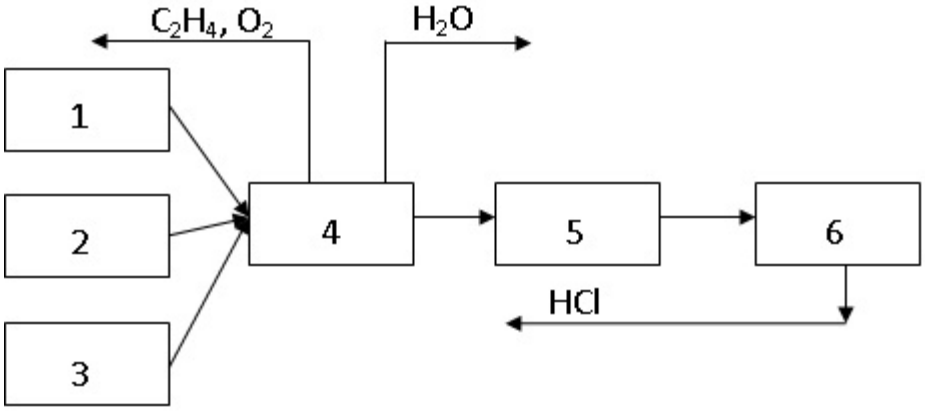

Рис. 11. Блок-схема отримання вінілхлориду через оксихлорування етилену:
1 - етилен; 2 - хлороводень; 3 - кисень повітря; 4 - процес оксихлорування етилену з виділенням C_2H_4, O_2 і H_2O - для охолодження; 5 - піроліз 1,2-дихлоретану методом аерозольного нанокаталізу; 6 - відділення вінілхлориду від інших продуктів з виділенням HCl - для рецикла

Можливо розгледіти, що зі зростом концентрації етилену, вихід 1,2-дихлоретану різко збільшується. Однак у дослідженному інтервалі співвідношень найбільший вихід 1,2-дихлоретану отримали при концентрації етилену 3,5%об., але вона входить до межі вибуховості етилену. Тому ми пропонуємо в якості результату розрахунку за конентрацією етилену в вихідній суміші використовувати концентрацію етилену 2,1%.

8. Застосування процесу оксихлорування етилену у технологічній схемі

Досліджений в роботі процес можна застосувати в технологічній схемі отримання вінілхлориду. При цьому існуючу схему ми трохи вдосконалюємо за рахунок перспективної технології аерозольного нанокаталізу. Представлену на Рис. 11 вдосконалену схему отримання вінілхлориду через етап отримання 1,2-дихлоретану ми вважаємо здатної до життя.

Згідно цієї схеми процесс піролизу 1,2-дихлоретану був вдосконало розглянутий в лабораторних умовах та доказано можливість його перебігу за технологією аерозольного нанокаталізу. Процесс йде при температурі 300 °С, атмосферному тиску на гетерогенному каталізаторі окись міді, який знаходиться у дрібнозрідженому шарі [8].

Ми вважаємо, що для всієї схеми можливо використати для перебігу хімічних перетворень технологію аерозольного нанокаталізу. При цьому процес оксихлорування етилену проводити при температурі 220 °С та на гетерогенному каталізаторі, а саме окисі міді.

Висновки

У даній роботі була проаналізована стадія оксихлорування етилену для виробництва вінілхлориду. Визначено умови перебігу цього процесу при різних співвідношеннях вихідної суміші і розглянута можливість використання технології аерозольного нанокаталізу для здійснення процесу.

В результаті роботи більш детально були:

1. розглянуті способи перебігу оксихлорування етилену та виявлені можливі параметри управління (температура, співвідношення реагентів, допустима концентрація етилену в суміші з обраним інтервалом.

2. побудована комп'ютерна модель та проаналізовані зміни виходу продуктів реакції оксихлорування етилену в 1,2-дихлоретан за допомогою комп'ютерної системи ChemCad.

3. обрані прийнятні умови параметрів управління процесом оксихлорування етилену. А саме – температура 220 °С, C_2H_4:O_2:HCl=1:0,7:1,8.

4. зроблено припущення про можливість застосування технології аерозольного нанокаталізу для процесу оксихлорування етилену у сумісній схемі одержання вінілхлориду піролізом 1,2-дихлоретану.

Література

1. Промышленные хлорорганические продукты : справочник / Л. А. Ошин, Ю. А. Трегер, Г. В. Моцарев и др.; под ред. Л. А. Ошина. – Москва:Химия, 1978. – 654 с.
2. Химия и технология галогенорганических соединений / Ф.Ф. Муганлинский, Ю.А. Трегер, М.М. Люшиню – М.:Химия, 1991. – 272 с.
3. Гуревич Д.А. Переработка отходов в промышленности полупродуктов и красителей. – М.:Химия, 1980. – 160 с.
4. Катализ промышленности: в 2-х т. Т.1 / Под ред. Б. Лича. – М.:Мир, 1986. – 324 с.
5. Тимофеев В.С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза: Учеб. Пособие пособие для вузов / В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов. – М.:Высшая школа, 2003. – 536 с.
6. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad: Учебно-методическое пособие / Казан. гос. технол. ун-т. Сост.: Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов. – Казань, 2008. – 160 с.
7. http://forca.com.ua/info/bezopasnost/predely-vzryvaemosti-gazov-i-parov-v-vozduhe-i-kislorode.html - Пределы взрываемости газов и паров в воздухе и кислороде
8. Ляскевич В. С., Гликина И. М. Пиролиз дихлорэтана в условиях аэрозольного нанокатализа. Схема промышленной реализации // Вісник східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля, № 9(216), 2014. – С.114-120

References

1. Promishlenie khlororganitseskie produkty : spravotsnik / L. A. Oshin, Yu. A. Treger, G. V. Motsarev i dr.; pod red. L. A. Oshina. – M.:Khimiya, 1978. – 654 s.
2. Khimiya i tekhnologiya galogenorganitseskikh soedinenij / F. F. Mugalinskiy, Yu. A. Treger, M. M. Lyushinyu – M.:Khimiya, 1991. – 272 s.
3. Gurevich D. A. Pererabotka otkhodov v promishlennosti poluproduktov i krasiteley. – M.:Khimiya, 1980. – 160 s.
4. Kataliz v promyshlenosti: v 2-kh t. T.1 / Pod red. B. Licha. – M.:Mir, 1986. – 324 c.
5. Timofeev V.S. Printcipi tekhnologii osnovnogo organicheskogo i heftekhimicheskogo sinteza: Ucheb. Posobie dlya vuzov / V. S. Timofeev, L. A. Serafimov. – M.:Vyshaya shkola, 2003. – 536 s.
6. Matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh sistem s ispolizovaniem programi ChemCad : Uchebno-metodicheskoe posobie / Kazan. Gos. Tekhnol. Univer. Sost. N. N. Ziyatdinov, T. V. Lapteva, D. A. Ryzhov. – Kazan, 2008. - 160 s.
7. http://forca.com.ua/info/bezopasnost/predely-vzryvaemosti-gazov-i-parov-v-vozduhe-i-kislorode.html - Predeli vzryvaemosti gazov i parov v vozukhe i kislorode
8. Lyaskevich V. S. Piroliz dikhloretana v usloviyakh aerozolnogo kataliza. Skhema promishlennoy realizatsii / V. S. Lyaskevich, I. M. Glikina // Visnik SNU im. V. Dalya, 9(216), 2014. – S. 114-120

Адамян Д.Р., Гликина И.М., Кудрявцев С.А., Гликин М.А. Создание компьютерной модели каталитического процесса оксихлорирования этилена при помощи ChemCad.

Построена компьютерная модель процесса оксихлорирования этилена с получением 1.2-дихлорэтана. Проведены исследования и рассмторено влияние соотношения исходных реагентов смеси на выход 1,2-дихлорэтана. Предложена схема применения процесса оксихлорирования этилена до 1,2-дихлорэтана. Схема представляет собой перспективное направление. 1,2-дихлорэтан используют как сырье для получения винилхлорида пиролизом в условиях аэрозольного нанокатализа. Предполагаем, что процесс оксихлорирования этилена до 1,2-дихлорэтана также реально проводить по технологии аэрозольного нанокатализа.

Ключевые слова: *оксихлорирование, ChemCad, 1,2-дихлорэтан,аэрозольный нанокатализ*

Adamyan David R., Glikina Irene M., Kudryavtsev Sergey A., Glikin Marat A. Creation of the computer model of the catalytic process of oxidative chlorination of ethylene with the ChemCad software package

A computer model of the process of oxychlorination of ethylene with the preparation of 1,2-dichloroethane is constructed. The investigations were conducted and the effect of the ratio of the initial reactants of the mixture on the yield of 1,2-dichloroethane was examined. The scheme of application of the process of oxychlorination of ethylene to 1,2-dichloroethane is proposed. The scheme is a promising direction. 1,2-dichloroethane is used as a raw material for the production of vinyl chloride by pyrolysis under aerosol nanocatalysis conditions. We assume that the process of oxychlorination of ethylene to 1,2-dichloroethane is also feasible in the aerosol nanocatalysis technology.

Key words: *oxychlorination, ChemCad, 1,2-dichloroethane, aerosol nanocatalysis*

Адамян Д.Р. - учень 11 класу Сєвєродонецької загальноосвітньої школи І-ІІІ ступенів № 10
Глікіна І.М. – д.т.н., доцент, професор кафедри хімічної інженерії та екології, СНУ ім. Даля, e-mail: irene555@i.ua
Кудрявцев С.О. - к.т.н., доцент, доцент кафедри хімічної інженерії та екології, СНУ ім. Даля, e-mail: irene555@i.ua
Глікін М.А. – д.т.н., професор, засл. діяч науки і техніки України, професор кафедри хімічної інженерії та екології, СНУ ім. Даля, e-mail: irene555@i.ua

Рецензент: д.т.н., проф. ***Суворін О.В.***

Стаття подана 10.11.2017.