

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Совершенствование технологии обработки информации о синтезе полимеров, установление взаимосвязи между свойствами полимеров и режимными параметрами процессов полимеризации является важной проблемой современного направления химической технологии. Поэтому целесообразно провести направленные исследования процесса полимеризации с использованием математической модели, учитывающей основные характеристики процесса и молекулярно-массового распределения получаемого продукта.

Важнейшей характеристикой молекулярной структуры полимеров, определяющей их реологические и физико-механические свойства, является молекулярно-массовое распределение (ММР) по числу мономерных звеньев. Информация о влиянии условий полимеризации и состава катализатора на ММР полимера позволяет выяснить механизм реакции полимеризации, природу активных центров, а также сформулировать подходы для получения широкого набора полимеров с заданными свойствами. Поэтому определение ММР и поиск методов его целенаправленного регулирования является важной задачей научно-технических исследований в области каталитической полимеризации.

Для промышленного процесса синтеза бутадиенового каучука на неодим содержащей каталитической системе (СКДН) имеется ряд нерешенных проблем (зарастание полимером первого реактора, несоответствие качества каучука мировым стандартам), которые могут быть решены технологическими методами.

Молекулярно-массовые характеристики каучука изменяются в широких пределах и зависят от соотношения компонентов каталитической системы, концентраций катализатора и мономера, технологического оформления процесса. Влияние температурного режима на полимеризационные процессы также является важным фактором, определяющим количественные и качественные характеристики получаемых продуктов.

Поэтому исследование совместно протекающих процессов теплообмена и химического превращения на ММР полимера совокупно с моделированием разветвленности (процесса разветвления) макромолекул позволит более четко контролировать свойства каучука.

С целью создания дополнительного рычага регулирования и управления процессом и свойствами получаемого продукта актуальным является моделирование совместно протекающих процессов теплообмена и химического превращения при получении каучука СКДН и расчет необходимых параметров при различных схемах ввода потоков реагентов. Дополнительный ввод шихты в реакторы каскада изменяет материальный и тепловой баланс реакторов. Более того, дробная подача шихты и других реагентов может позволить получить каучук на неодимовом катализаторе со свойствами ранее недоступными для данного процесса.

Работа выполнялась в рамках государственных программ:

- Грант Президента РФ №96-15-97179 «Моделирование процессов полимеризации при производстве синтетических каучуков»;
- Грант Президента РФ МК 554.2006.8 «Математическое моделирование и оптимизация процессов растворной и газофазной полимеризации при получении бутадиенового каучука»;
- Грант Министерства образования и науки РФ РНП 2.1.2.15 «Создание теоретических основ для математического моделирования совмещенных процессов теплообмена и химического превращения в реакторах каскада синтеза бутадиенового каучука на кобальт- и неодимсодержащих каталитических системах»
- Грант Российского фонда фундаментальных исследований № 06-08-00167-а «Взаимовлияющие процессы теплообмена и химического превращения при получении бутадиенового каучука на кобальт- и неодимсодержащих каталитических системах».
- Грант Президента РФ МК-4814.2008.8 «Математическое моделирование процессов синтеза полидиенов на литийсодержащих каталитических системах для получения широкого ассортимента каучуков общего назначения с заданными молекулярно-массовыми характеристиками»;

Цель:

Исследование влияния режимных параметров процесса растворной полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе в каскаде реакторов с мешалкой непрерывного действия на молекулярно-массовое распределение и характеристики разветвленности полимера при различных схемах подачи шихты в реакторы каскада на основе математической модели совместно протекающих процессов теплообмена и химического превращения.

Научная новизна

- разработана методика расчета ММР каучука СКДН, синтезированного в каскаде реакторов с мешалкой непрерывного действия, при наличии передачи цепи на полимер (путем непосредственного численного решения системы уравнений, вытекающей из кинетической схемы полимеризации, при специальном выборе граничных условий, максимальной длины макромолекул и величины шага вычислений);

- разработана математическая модель совместно протекающих процессов химического превращения и теплообмена при получении каучука СКДН для каскада реакторов смешения непрерывного действия при дополнительном вводе шихты в реакторы каскада, позволяющая определять ММР и характеристики разветвленности полимера;

- выведены соотношения для расчета среднего числа разветвлений на макромолекулу, средней длины основной цепи и боковых ветвей, весовой доли