

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Исследования процессов полимеризации диенов на ионных катализаторах приобретают все возрастающее значение. В настоящее время в ОАО «Нижекамскнефтехим» осваивают выпуск и производят синтетические каучуки СКДЛ и ДССК на модифицированных литийсодержащих каталитических системах. Управление качеством и структурой полимеров при использовании вышеупомянутых катализаторов осложняется отсутствием полномасштабных теоретических исследований, основанных на моделировании кинетики процесса полимеризации. Поэтому теоретическая база производства синтетического каучука в присутствии модифицированной литийсодержащей каталитической системы требует усиления фундаментальных исследований и прикладных разработок в целях получения каучука с заданным комплексом физико-механических свойств.

Известно, что рассматриваемые каталитические системы кинетически неоднородны, при этом механизм полимеризации на нескольких типах активных центрах мало изучен. Для объяснения поведения таких систем естественно предположить их полицентровость и протекание реакций обмена между активными центрами. Существующие на данный момент полицентровые модели процессов полимеризации диенов не учитывают передачу цепи на полимер, которая значительно усложняет математическое описание. Следовательно, такие модели не позволяют рассчитать характеристики разветвленности полимера, от которых зависят кинематическая вязкость раствора полимера, хладотекучесть и другие свойства. Поэтому для дальнейшего промышленного освоения процесса синтеза полибутадиена в присутствии модифицированной литийсодержащей каталитической системы целесообразно провести прогнозирование комплекса свойств каучука, основанное на математическом моделировании взаимовлияющих процессов теплообмена и химического превращения с учетом двухцентровости и основных реакций передач цепи, таких как передача цепи на полимер, мономер, толуол и обмен активностью между центрами.

Диссертационная работа выполнялась в рамках государственных программ:

- Грант Президента Российской Федерации №00-15-99-438 «Моделирование взаимосвязанных явлений переноса и химического превращения в процессах полимеризации при получении синтетических каучуков СКЭПТ и СКДК»
- Программа РТ по развитию приоритетных направлений науки по теме № 07-7.5-56/2001 (Ф) «Совершенствование и промышленное освоение энерго- и ресурсосберегающих технологий синтеза каучуков СКДК и ДССК»
- Программа РТ по развитию приоритетных направлений науки по теме №07-19.2.17/2000(ФП) АН РТ «Моделирование и оптимизация процессов полимеризации при производстве синтетических каучуков»
- Грант Президента Российской Федерации № МД-104.2003.08 «Исследование совместно протекающих процессов химического превращения и теплообмена при синтезе каучуков СКДК и ДССК»
- 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»;

- А
- 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».

Цель работы

Прогнозирование комплекса свойств бутадиенового каучука, синтезируемого с использованием модифицированной литийсодержащей каталитической системы в каскаде реакторов непрерывного действия на основе математического моделирования совместно протекающих процессов теплообмена и химического превращения с учетом двухцентровости каталитической системы и передачи цепи на полимер.

Научная новизна работы

Проведено математическое моделирование процесса синтеза бутадиенового каучука на литийорганической каталитической системе в реакторе периодического действия с учетом двухцентровости системы и передачи цепи на полимер; предложена кинетическая схема; определены кинетические константы скоростей элементарных реакций, в модели учтен взаимный переход активных центров двух типов с сохранением равновесия между ними.

Разработана модель совместно протекающих процессов химического превращения и теплообмена при получении бутадиенового каучука на модифицированной литийсодержащей каталитической системе для каскада реакторов непрерывного действия; отличительной особенностью математической модели является учет двухцентровости каталитической системы и реакции передачи цепи на полимер.

Включение в кинетическую схему процесса полимеризации передачи цепи на полимер, в условиях взаимного перехода активных центров двух типов, позволило рассчитать характеристики разветвленности полибутадиена, такие как: среднее число разветвлений на макромолекулу, весовая доля полимера в боковых ветвях, g -фактор.

На основе математического моделирования проведено прогнозирование комплекса свойств каучука СКДЛ и определены рациональные режимные параметры.

Практическая значимость работы

На основе разработанной математической модели выработаны рекомендации по технологическим режимам синтеза бутадиенового каучука на модифицированной литийсодержащей каталитической системе, которые позволяют получать каучук с контролируемыми молекулярно-массовыми характеристиками.

Представленная в работе математическая модель совместно протекающих процессов химического превращения и теплообмена при учете двухцентровости каталитической системы может быть использована для исследования непрерывных процессов синтеза других полимеров в каскаде с любым числом реакторов.

Апробация работы

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на научной сессии КГТУ по итогам 2005, 2008 годов (г. Казань), на Международной научной конференции Polymeric Materials (2006 Halle, Германия), на XX Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях» (ММТТ-20), (Ярославль 2007), на Всероссийской конференции "Молодые ученые и инновационные химические технологии (У.М.Н.И.К.)", (Москва 2007), II Международной научной конференции "Современные проблемы прикладной математики и математического моделирования", (Воронеж 2007), XXI Международной научной конференции «Математические методы в