

КОМП'ЮТЕРНИЙ РОЗРАХУНОК ПРОЦЕСУ ГІДРОФОРМІЛЮВАННЯ ПРОПЕНУ В *CHEMCAD*

Абрамова А. О., Бондаренко С. Г., Бугаєва Л. М., Кірчев А. М.
КІП ім. Ігоря Сікорського, alla_abramova@ukr.net

Вперше реакція гідроформілювання була здійснена у присутності кобальтового каталізатора процесу Фішера–Тропша. Згодом були досліджені і запатентовані в якості каталізатора інші метали. В промисловості до теперішнього часу переважно використовуються кобальтові каталізатори. Під час гідроформілювання пропену на кобальтових каталізаторах відбувається гідратація одного з подвійних зв'язків, результатом якої є утворення моноальдегіду [1]. При використанні нефтенату кобальту утворюється діальдегід. Розглядається процес гідроформілювання пропену, з метою розрахунку матеріального балансу побудовано технологічну схему у програмі *ChemCAD* (див. рисунок) [2].

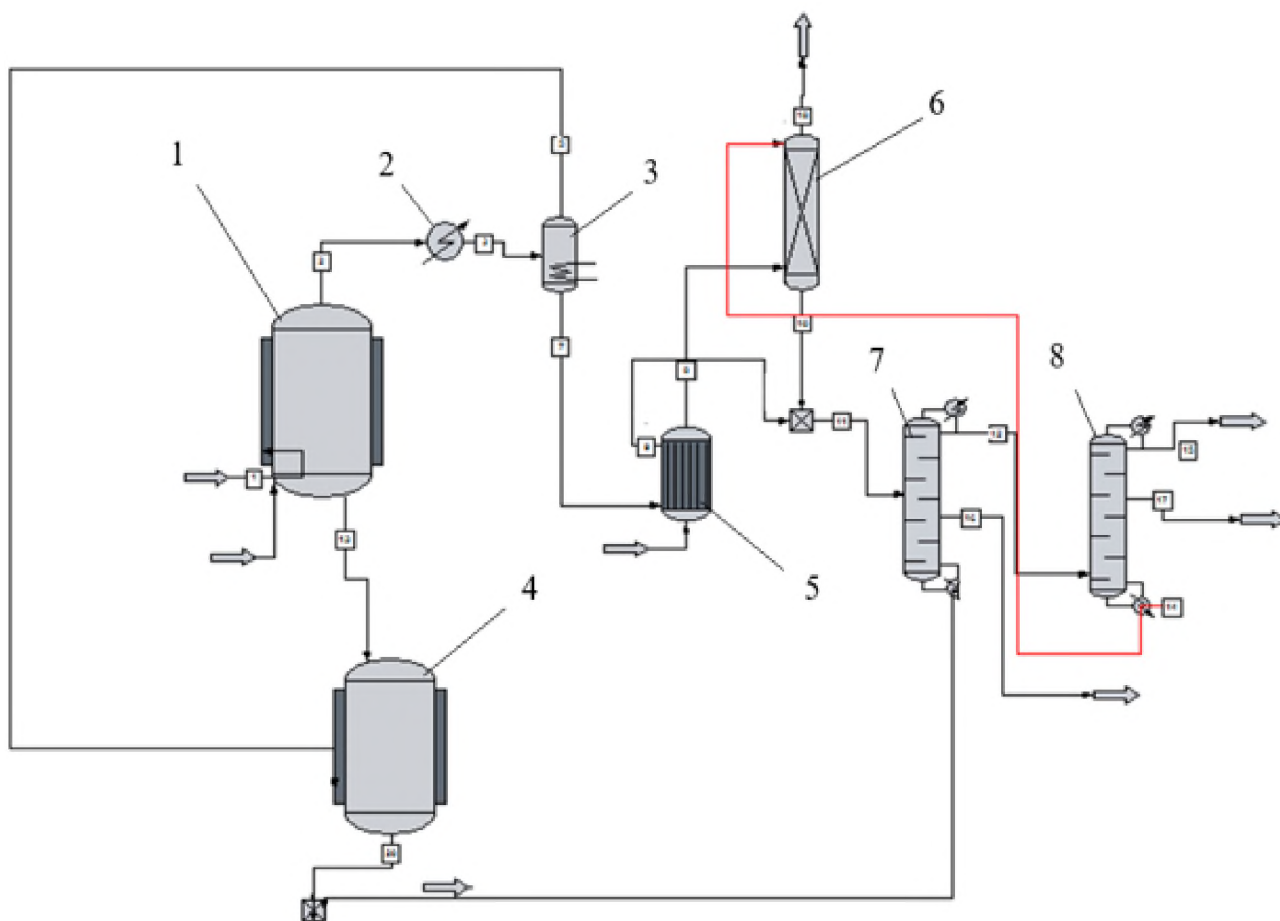


Рис. 1. Схема процесу гідроформілювання пропену у *ChemCAD*

На основі створеної схеми розраховано матеріальний баланс речовин для кожного апарату, результати представлені на прикладі реактора (табл. 1) та реактора гідроформілювання (табл. 2).

Таблиця 1. Матеріальний баланс реактора

Речовина	Прихід, моль/год	Речовина	Вихід, моль/год
Потік 8:	8,37	Потік 11:	6,627
МА	0,8	МА	0,4
ІМА	0,66	ІМА	0,256
Б	0,16	Пропен	0,48
ІБ	0,13	СО	1,206
Пропен	0,48	Н ₂	4,168
СО	0,506	Н ₂	0,3
Н ₂	4,168	Н ₂	0,112
НCo(CO) ₄	0,182	Потік 14:	
Толуен	1,073	МА	0,4
Кисень	0,4	ІМА	0,384
		Б	0,16
		ІБ	0,13
		Со	0,364
		Толуен	1,073
Разом	16,929	Разом	16,06

Таблиця 2. Матеріальний баланс реактора гідроформілювання

Речовина	Прихід, кмоль/год	Речовина	Вихід, кмоль/год
Синтез-газ:	10,58	Реакційна суміш:	14,14
СО	1,31	МА	0,8
Н ₂	0,31	ІМА	0,64
Пропен	1,3	Б	0,161
Розчин каталізатора:	0,315	ІБ	0,13
Толуен	0,182	Пропен	0,48
НCo(CO) ₄	1,073	СО	1,74
СО	0,74	Н ₂	9,27
Н ₂	12,32	НCo(CO) ₄	0,182
		Толуен	1,073
Разом	26,51	Разом	26,829

Отже, після проведення розрахунку матеріального балансу для кожного апарату в технологічній схемі, можна зробити висновок, що результати обчислень є вірними, матеріальний баланс зійшовся.

1. W.A.Smith., A.F.Bochkov, R. Caple. Organic Synthesis – the Science behind the Art. Cambridge, 1998.

2. Бугаєва Л. Н., Безносик Ю. О., Статюха Г. О. Рішення хіміко-технологічних задач із використанням програми CHEMCAD. Київ, Політехніка, 2007. – 72 с.