

Зачиняев Максим Владимирович,
магистрант, Ангарский государственный технический университет,
e-mail: maks-0905@mail.ru

Фомина Лариса Валерьевна,
к.х.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,
e-mail: flvbaan@mail.ru

К РАСЧЁТУ ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ РЕАКТОРА СИНТЕЗА ХОЛИНХЛОРИДА ИЗ ДИХЛОРЭТАНА И ТРИМЕТИЛАМИНА

Zachinyaev M.V., Fomina L.V.

TO THE CALCULATION OF HEAT FLOWS OF THE SYNTHESIS REACTOR OF CHOLINE CHLORIDE FROM DICHLOROETHANE AND TRIMETHYLAMINE

Аннотация. Согласно справочным данным выполнены расчёты средних теплоёмкостей реагентов в интервале 298-373 К. Показана их близость к значениям стандартных теплоёмкостей. Вычислены теплоёмкости раствора гидроксида натрия и продуктового рассола в синтезе холинхлорида через хлорхолинхлорид в соответствии с принципом аддитивности.

Ключевые слова: холинхлорид, хлорхолинхлорид, триметиламин, дихлорэтан, теплоёмкость, тепловой баланс.

Abstract. According to reference data, calculations of average heat capacities of reagents in the range of 298-373 K were performed. Their proximity to the values of standard heat capacities was shown. Heat capacities of sodium hydroxide solution and product brine in the synthesis of choline chloride through chlorocholine chloride were calculated in accordance with the additivity principle.

Keywords: choline chloride, chlorocholine chloride, trimethylamine, dichloroethane, heat capacity, heat balance.

За последние 20 лет существенно возрос интерес научного сообщества к холинхлориду (ХХ) – органической соли, находящей широкое применение в различных областях прикладного и научного значения [1]. Производство ХХ в РФ на сегодняшний день отсутствует. На предприятиях Башкортостана и Татарстана ведутся работы по созданию технологических линий выпуска ХХ [2]. Известно несколько способов получения ХХ. В Иркутской области имеются сырьевые ресурсы для синтеза ХХ из триметиламина (ТМА) и дихлорэтана (ДХЭ). Согласно этому способу [3] синтез ХХ ведут в два этапа в течение 6 часов с выходом готового продукта, близким к теоретическому. На этапах проектирования химико-технологического процесса выполняют составление материального и теплового балансов установки в целом и основного реактора, в частности. В работе [4] выполнены расчёты тепловых эффектов химических реакций, протекающих на первом (4 часа) и втором (2 часа) этапах синтеза ХХ через хлорхолинхлорид (ХХХ). Для составления теплового баланса реактора получения ХХ дополнительно необходимо выполнить расчёт тепловых эффектов, связанных: 1) с приходом в реактор реагентов и уходом из реактора продуктов; 2) с растворением кристаллов ХХХ в воде; 3) с теплопереносом через стенки реактора.

Целью данной работы является расчёт статей теплового баланса реактора синтеза ХХ из ДХЭ и ТМА, связанных с потоками реагентов и продуктов.

Теплоёмкости (C_p) чистых исходных реагентов приведены в справочной литературе. По известным массам (m) реагентов (ДХЭ и ТМА) рассчитывают тепло, вносимое ими в реактор, согласно формуле: $Q_p = C_p \cdot m \cdot t$, где t – температура потока реагента. Теплоёмкости раствора гидроксида натрия и выходящего из реактора продуктового потока можно рассчитать как аддитивные величины, если известна теплоёмкость и доля каждого компонента в растворе.

Массовая доля гидроксида натрия в водном растворе составляет 0,332. Массовые доли компонентов в продуктивном потоке равны: 0,501 (XX), 0,210 (NaCl), 0,289 (H₂O) [3]. В справочниках приведены в основном теплоёмкости при постоянном давлении и стандартных условиях. Синтез XX идёт при 90-100 °С. Расчёт средних теплоёмкостей веществ (NaCl, H₂O, NaOH, ТМА, ДХЭ) в интервале 298-373 К по формуле:

$$\bar{C}_p = \frac{1}{T_2 - T_1} \cdot \int_{T_1}^{T_2} (a + b \cdot T + c' \cdot T^{-2} + c \cdot T^2) dT,$$

где a , b , c' , c – коэффициенты уравнения температурной зависимости теплоёмкости, даёт отклонение от стандартного значения теплоёмкости 0,3-3,0 %. Для XX в [5] приведена теплоёмкость для 70 % водного раствора, равная 2,60 Дж/(г·К). Из формулы аддитивности найдена теплоёмкость кристаллического XX, по величине которой рассчитана теплоёмкость продуктового потока равная 2,35 Дж/(г·К). Теплоёмкость раствора щёлочи составила 3,29 Дж/(г·К).

ЛИТЕРАТУРА

1. **Emma L. Smith, Andrew P. Abbott and Karl S. Ryder.** Deep Eutectic Solvents (DESS) and Their Application. – Текст : электронный // Chem. Rev. 2024, 114, 11060-11082 – URL: [dx.doi.org/10.1021/cr300162p](https://doi.org/10.1021/cr300162p) (дата обращения: 01.05.2023).
2. **Козлова, М. Ю.** Создание импортозамещающего производства холина хлорида полного цикла для обеспечения продуктовой безопасности страны. – Текст : электронный // Форум «Рынок кормов: инвестиции и инновации для развития бизнеса» – М.: КРОКУС ЭКСПО, 2023. – 14 с. – URL: https://feedlot.ru/assets/documents/market_dynamics/ (дата обращения: 19.02.2025).
3. **А. с. 176591 СССР, МПК С 07с.** Способ получения холинхлорида : № 938386/23-4; заяв. 18.01.1965 : опубл. 17.11.1965 / Алексеев Н. Ф., Егоров А. М., Ливен А. В. и др.; заявитель Кемеровский научно-исследовательский институт химической промышленности. – Бюллетень № 23. – 1 с. Текст : непосредственный.
4. **Фомина, Л. В., Зачиняев, М. В.** Оценка тепловых эффектов химических реакций синтеза холинхлорида на основе триметиламина и дихлорэтана // Вестник. – Ангарск: АнгТУ, 2024. – №18. – С. 138-144. Текст : непосредственный.
5. Физико-химические и теплофизические свойства исходных, промежуточных, конечных продуктов и отходов производства. – Текст : электронный // Stud Ref – URL: https://studref.com/648804/tehnika/fiziko_himicheskie_teplofizicheskie_svoystva_ishodnyh_promezhutochnyh_konechnyh_produktov_othodov_proizvo (дата обращения: 17.06.23).