

БІНОМІАЛЬНА МОДЕЛЬ РЕАКЦІЇ ПЕРЕЕСТЕРИФІКАЦІЇ

Г.І. Гурина, канд. хім. наук, доцент

*Харківський національний університет міського господарства імені О.М. Бекетова,
61002, Харків, вул. Маршала Бажанова, 17*

gigurina@ukr.net

Є.І. Дружинін, канд. техн. наук, доцент

*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
вул. Кирпичова, 2, м. Харків, 61002, Україна*

druzhinin_e_i@ukr.net

Процеси виробництва алкідних смол характеризуються наявністю відпрацьованих технологій, доступним обладнанням, однак це виробництво пов'язано зі значною тривалістю стадій технологічних процесів, високою енергоємністю, необхідністю використання органічних розчинників з можливими викидами в атмосферу токсичних легколетких органічних сполук. У зв'язку з цим визначення напрямків інтенсифікації технологічних процесів виробництва алкідних смол є актуальним завданням.

Однією з можливостей управління синтезом алкідних смол є інтенсифікація процесу переестерифікації рослинної олії поліолом шляхом оптимізації мольного співвідношення поліол/олія в рецептурах лаків з метою збільшення концентрації двох- та трьох функціональних продуктів реакції, що сприяють ефективному перебіганню наступної реакції поліконденсації.

В якості математичної моделі, що описує співвідношення між дев'ятьма продуктами алкоголізу за участі олії і пентаеритриту для різного молярного співвідношення поліол/олія, була обрана біноміальна модель з використанням біному Ньютона восьмого ступеня.

Одержані залежності складу продуктів алкоголізу олії пентаеритритом в стані рівноваги від вихідного відношення пентаеритрит/олія для пентаеритриту, тригліцериду, моногліцериду, дигліцериду, трипентаеритриду, тетрапентаеритриду, дипентаеритриду, монопентаеритриду, гліцерину, сумарної частки дво- і трифункційних естерів.

На прикладі аналізу рецептури лаку ПФ-053 показано, що оптимальними співвідношеннями поліол/олія є величини 1,55–1,80, які відповідають області максимуму інтегральної кривої виходу дво- і трифункційних продуктів реакції переестерифікації в залежності від співвідношення поліол/олія.

Встановлено, що біноміальна модель для опису реакції переестерифікації може бути використана для оптимізації процесу трансестерифікації при виробництві біодизелю на основі рослинних олій. Дійсно, теоретичний аналіз співвідношення компонентів спирт/олія з використанням біному п'ятого ступеня показав, що оптимальним мольним співвідношенням є інтервал 3–7,6, а експериментальні дані для реакції трансестерифікації ріпакової олії бутанолом при каталізі реакції калій бутилатом відповідають мольному співвідношенню 7,5.