

Моделирование влияния основных параметров синтеза на свойства карбоксиметилцеллюлозы

© Панов^{1*} Юрий Терентьевич, Крюков² Сергей Вадимович, Ильин² Михаил Иванович и Фуразов¹ Михаил Николаевич

¹ Кафедра химических технологий. Институт архитектуры, строительства и энергетики. Владимирский государственный университет имени А.Г. и Н.Г. Столетовых. Ул. Горького, 87. г. Владимир, 600000. Владимирская область. Россия. Тел.: (4922) 47-99-57. E-mail: tpp_vlgu@mail.ru

² ЗАО «Полицелл». Ул. Б. Нижегородская, д.77. г. Владимир, 600000.

Владимирская область. Россия. E-mail: info@polycell.ru

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: моделирование, карбоксиметилирование целлюлозы, кинетика карбоксиметилирования, целлюлоза, монохлорацетат натрия, гидроксид натрия.

Аннотация

Из выпускаемых простых эфиров целлюлозы в промышленном масштабе наиболее крупнотоннажным и широко применяемым эфиром является карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ), имеющая степень замещения 0.6-0.9, и полианионная целлюлоза (ПАЦ), представляющая собой высокозамещенную КМЦ со степенью замещения ≥ 0.9 .

Не смотря на многочисленные разработки по синтезу КМЦ исследования в этой области до сих пор актуальны особенно при использовании нового отечественного сырья, в частности, целлюлоз, полученных из хвойных и лиственных деревьев, льна и других растительных культур. В настоящее время при комплексном исследовании синтеза КМЦ в лучшем случае используется метод планирования эксперимента с построением эмпирических регрессионных уравнений. Цель настоящей работы состоит в разработке нового подхода к исследованиям, минимизирующим объем экспериментальных работ по синтезу КМЦ с применением детерминированной модели кинетики карбоксиметилирования целлюлозы.

В основу моделирования макрокинетики карбоксиметилирования целлюлозы положены следующие допущения:

- в зоне протекания химических реакций создается равномерное распределение реагентов;
- двухфазная система, состоящая из твердых и жидких реагентов (целлюлоза, NaOH, монохлорацетат натрия, H₂O и другие) рассматривается как квазигомогенная фаза.

В работе рассмотрена макрокинетическая модель карбоксиметилирования целлюлозы. Основная реакция между гидроксильными группами целлюлозы и монохлорацетатом натрия протекает по третьему порядку (константа скорости K_1). Побочная реакция между монохлорацетатом натрия и гидроокисью натрия протекает по второму порядку (константа скорости K_2). На базе макрокинетических уравнений получена теоретическая зависимость степени замещения OH-групп целлюлозы от начальных мольных соотношений реагентов и соотношения констант скоростей K_2/K_1 .

При обработке экспериментальных данных карбоксиметилирование различных целлюлоз для широкого диапазона мольных соотношений реагентов величина K_2/K_1 (относительная реакционная способность) остается постоянной величиной для продукции определенного целлюлозно-бумажного комбината и условий среды. Таким образом, проводя эксперимент при данном соотношении реагентов и определенном K_2/K_1 , можно рассчитать по теоретической формуле степень замещения для любых желаемых соотношений реагентов, минимизируя затраты экспериментальных работ.