

Совершенствование узла получения товарного продукта установки синтеза пара-третичного бутилфенола

Леонид С. Коваленко	¹	chemicaluniversity@mail.ru	 0000-0003-3430-4654
Сергей В. Попов	¹	svpopov2018@ya.ru	 0000-0003-0533-9049
Оксана В. Хабибрахманова	¹	chemicaluniversity@mail.ru	 0000-0002-1523-9861

¹ Самарский государственный технический университет, филиал в г. Новокуйбышевске, ул. Мironова, 5, г. Новокуйбышевск, 446200, Россия

Аннотация. Промышленный синтез пара-третичного бутилфенола осуществляется алкилированием фенола изобутиленом на катализаторах Amberlyst 36 Dry, Amberlyst 36 Wet Resin или КУ-23. В реакционной массе алкилирования кроме целевого продукта пара-третичного бутилфенола присутствует непрореагировавший фенол и побочные продукты, поэтому в технологической схеме предусмотрено их разделение, рециркулирование фенола в реакционный узел и получение в виде дистиллята колонны К-148 товарного пара-третичного бутилфенола с возвратом кубового остатка в реактор. Кубовый остаток содержит пара-третичный бутилфенол, 2,4-ди-трет-бутилфенол и высококипящие продукты. С целью оценки принципиальной возможности организации эффективного и четкого разделения кубового остатка колонны К-148 на целевой пара-третичный бутилфенол и поток, рециркулируемый в реактор алкилирования побочного 2,4-ди-трет-бутилфенола в целевой продукт выполнено исследование работы промышленной колонны К-148. С использованием промышленных данных эксплуатации установки синтеза пара-третичного бутилфенола в моделирующей программной среде Honeywell UniSim Design разработана модель узла разделения алкилата и получения товарного пара-третичного бутилфенола. В качестве математического пакета для расчета термодинамических свойств компонентов технологических потоков использовали метод NRTL. Адекватность модели технологической схемы подтверждается сопоставлением расчетных значений с промышленными данными. В компонентном составе алкилата присутствуют фенол, пара-третичный бутилфенол, орто-третичный бутилфенол, 2,6-ди-трет-бутилфенол, 2,4-ди-трет-бутилфенол, 2,4,6-три-трет-бутилфенол и высококипящие продукты. Выполненный анализ технологических потоков колонны К-148 показал, что кубовый остаток колонны, рециркулируемый в реактор алкилирования, содержит до 96 %мас. целевого пара-третичного бутилфенола, поступление которого в реактор приводит к уменьшению полезного реакционного объема аппарата, и одновременно практический интерес представляет оценка возможности выделения из кубового остатка колонны К-148 качественного целевого пара-третичного бутилфенола. Для этого предложен вариант изменения технологической схемы процесса с включением в неё дополнительной ректификационной колонны РК-1-2. Рассчитанные по модели оценки технологических и конструктивных параметров колонны РК-1-2 показали, что отбираемый в качестве дистиллята поток содержит 99.92 %мас. целевого пара-третичного бутилфенола, что составляет порядка 8.8 % к количеству целевого продукта, отбираемого с верха колонны К-148. Одновременно с этим, уменьшение количества пара-третичного бутилфенола в кубовом остатке колонны РК-1-2 обеспечивает увеличение использования объема реактора алкилирования на 1.7 %. Результаты исследований и модель могут быть использованы для оптимизации технологических режимов и оценки конструктивных параметров массообменных аппаратов схемы, а также для обучения технологов приемам квалифицированного ведения процесса.

Ключевые слова: фенол, изобутилен, алкилирование, пара-третичный бутилфенол, моделирование, Honeywell UniSim Design

Improvement of the unit for obtaining a commercial product of the para-tertiary butylphenol synthesis unit

Leonid S. Kovalenko	¹	chemicaluniversity@mail.ru	 0000-0003-3430-4654
Sergey V. Popov	¹	svpopov2018@ya.ru	 0000-0003-0533-9049
Oksana V. Khabibrakhmanova	¹	chemicaluniversity@mail.ru	 0000-0002-1523-9861

¹ Samara State Technical University, branch in Novokuibyshevsk, st. Mironova, 5, Novokuibyshevsk, 446200, Russia

Abstract. Industrial synthesis of para-tertiary butylphenol is carried out by alkylation of phenol with isobutylene on Amberlyst 36 Dry, Amberlyst 36 Wet Resin or KU-23 catalysts. In addition to the target product of para-tertiary butylphenol, unreacted phenol and by-products are present in the alkylation reaction mass, therefore, the technological scheme provides for their separation, recycling of phenol into the reaction unit and obtaining commercial para-tertiary butylphenol in the form of distillate of the K-148 column with the return of the cubic residue to the reactor. The cubic residue contains para-tertiary butylphenol, 2,4-di-tert-butylphenol and high-boiling products. In order to assess the principal possibility of organizing an effective and clear separation of the cubic residue of the K-148 column into the target para-tertiary butylphenol and the stream recycled into the alkylation reactor for the disproportionation of the 2,4-di-tert-butylphenol by-product into the target product, a study of the operation of the K-148 industrial column was performed. Using industrial data from the operation of the para-tertiary butylphenol synthesis plant in the Honeywell UniSim Design modeling software environment, a model of the alkylate separation unit and the production of commercial para-tertiary butylphenol was developed. The NRTL method was used as a mathematical package for calculating the thermodynamic properties of process flow components. The adequacy of the technological scheme model is confirmed by comparing the calculated values with industrial data. The component composition of alkylate contains phenol, para-tertiary butylphenol, ortho-tertiary butylphenol, 2,6-di-tert-butylphenol, 2,4-di-tert-butylphenol, 2,4,6-tri-tert-butylphenol and high-boiling products. The analysis of the technological flows of the K-148 column showed that the cubic residue of the column recycled into the alkylation reactor contains up to 96% by weight. the target para-tertiary butylphenol, the flow of which into the reactor leads to a decrease in the useful reaction volume of the apparatus, and at the same time, it is of practical interest to assess the possibility of isolating high-quality target para-tertiary butylphenol from the cubic residue of the K-148 column. For this purpose, a variant of changing the technological scheme of the process with the inclusion of an additional distillation column PK-1-2 is proposed. Estimates of the technological and structural parameters of the PK-1-2 column calculated by the model showed that the stream selected as distillate contains 99.92% by weight. the target para-tertiary butylphenol, which is about 8.8% of the amount of the target product taken from the top of the K-148 column. At the same time, a decrease in the amount of para-tertiary butylphenol in the cubic residue of the PK-1-2 column provides an increase in the use of the volume of the alkylation reactor by 1.7%. The research results and the model can be used to optimize technological modes and evaluate the design parameters of mass transfer devices of the scheme, as well as to train technologists in the techniques of qualified process management.

Keywords: phenol, isobutylene, alkylation, para-tertiary butylphenol, modeling, Honeywell UniSim Design

Для цитирования

Коваленко Л.С., Попов С.В., Хабибрахманова О.В. Совершенствование узла получения товарного продукта установки синтеза пара-третичного бутилфенола // Вестник ВГУИТ. 2021. Т. 83. № 3. С. 207–215. doi:10.20914/2310-1202-2021-3-207-215

For citation

Kovalenko L.S., Popov S.V., Khabibrakhmanova O.V. Improvement of the unit for obtaining a commercial product of the para-tertiary butylphenol synthesis unit. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2021. vol. 83. no. 3. pp. 207–215. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2021-3-207-215

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

Введение

Пара-третичный бутилфенол (ПТБФ) используется для получения лакокрасочных материалов, в производстве поликарбонатов, оптических материалов, пластификаторов, применяется в качестве антикоррозионных покрытий, в шинной промышленности, имеются перспективы его применения и в других химических синтезах [1].

Промышленный синтез ПТБФ осуществляется алкилированием фенола изобутиленом на катализаторах Amberlyst 36 Dry, Amberlyst 36 Wet Resin или КУ-23. В реакционной массе алкилирования кроме целевого продукта ПТБФ присутствует непрореагировавший фенол и побочные продукты, поэтому далее в технологической схеме проводится их разделение и рециркулирование фенола в реакционный узел [2].

Вопросы совершенствования технологии промышленного процесса получения ПТБФ, улучшения работы тепло – массообменных аппаратов и оптимизации их конструктивных параметров рассматриваются в работах [3–6]. В частности, в патенте [5] предлагается использовать роторно-пленочный испаритель для отделения из алкилата высококипящих примесей, товарный ПТБФ отбирать верхом

в дополнительной ректификационной колонне, а кубовый остаток колонны, содержащий побочный 2,4-ди-трет-бутилфенол и целевой ПТБФ, возвращать в реакционный узел. В работе [6] оптимизируются рабочие параметры термосифонных испарителей с повышенной кратностью циркуляции для условий вакуумной ректификации. В [7] нами проводится моделирование работы двух колонн ректификационного выделения фенола из алкилата.

Цель работы – исследование работы промышленной колонны выделения товарного ПТБФ К-148 для организации эффективного и четкого разделения кубового остатка на целевой ПТБФ и поток, рециркулируемый в реактор алкилирования для диспропорционирования побочного 2,4-ди-трет-бутилфенола в целевой продукт.

Методы

На рисунке 1 показана укрупненная технологическая схема получения ПТБФ [2].

Процесс алкилирования фенола изобутиленом ведется в реакторе с неподвижным слоем катализатора (сульфокатионитов), гидродинамический режим аппарата близок к режиму вытеснения.

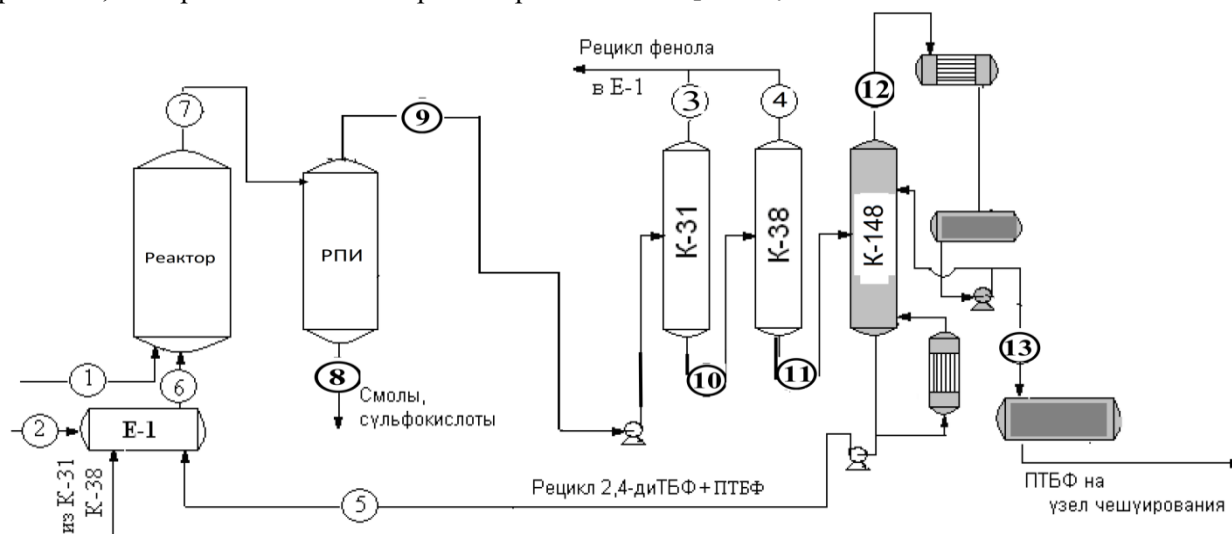


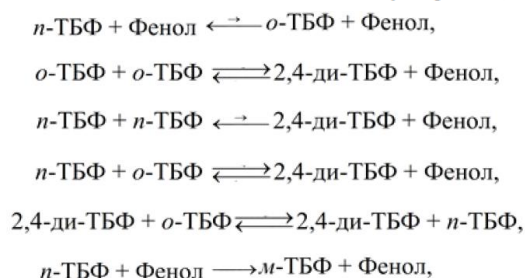
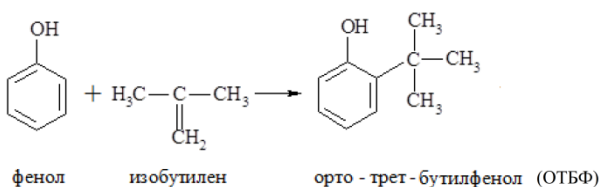
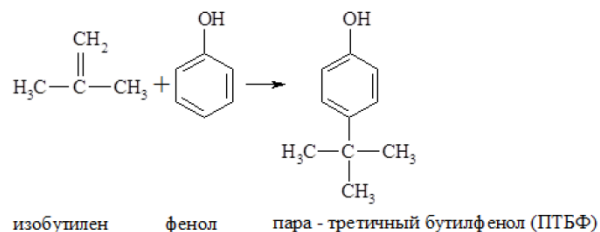
Рисунок 1. Технологическая схема получения пара-третичного бутилфенола

Figure 1. Technological scheme for the production of para-tertiary butylphenol

Изобутилен (поток 1) подается в жидкой фазе. Фенол (поток 2) в емкости E-1 смешивается с рециркулируемыми потоками фенола (потоки 3 и 4), выделенного из алкилата в колоннах К-31 и К-38. В составе данных потоков также присутствуют ПТБФ, орто-третичный бутилфенол (о-ТБФ) и 2,4-ди-третичный бутилфенол (2,4-ди-ТБФ). В емкость E-1 с целью диспропорционирования 2,4-ди-ТБФ в целевой продукт также рециркулирует кубовый продукт колонны К-148

(поток 5), содержащий ПТБФ, 2,4-ди-ТБФ и высококипящие продукты (позиционные изомеры 1,1,3,3-тетраметилбутилфенола, 1,2,3,3-тетраметилбутилфенола, (н-бутил) (1,1-диметилэтил) фенол, 2,3,3-триметилпентилфенол, (1,1 – диметилэтил) (1,2,4,4-тетраметилбутил) фенол, 1,1,3,3,5,5-гексаметилгексил – фенол) [4]. В результате смешения потоков 2, 3, 4 и 5 в реактор алкилирования поступает поток 6, содержащий в основном фенол ~ 88,41%мас., ПТБФ ~ 9,34%мас., о-ТБФ ~ 1,84%мас.,

2,4-ди-ТБФ $\sim 0.38\%$ мас., высококипящие продукты $\sim 0.03\%$ мас. Реакция проводится при атмосферном давлении и температурах $80\div 145^{\circ}\text{C}$ в избытке фенола (мольное соотношение *фенол: изобутилен* от 1:0,1 до 1:0,4), содержание воды в зоне реакции не более 0,5% мас. В результате реакции (поток 7) синтезируется целевой ПТБФ, а также образуются побочные продукты – о-ТБФ, 2,4-ди-ТБФ высококипящие продукты (смолы, сульфокислоты и другие). Возможная схема превращений [1, 3, 4]:



Реакционная масса алкилирования освобождается от сульфокислоты и продуктов уплотнения в роторно-пленочном испарителе

(поток 8) [5], после чего алкилат поступает на узел разделения компонентов смеси (поток 9).

Реакция алкилирования проводится в избытке фенола, поэтому непрореагировавший фенол в технологической схеме выделяется из алкилата в ректификационных колоннах К-31 (частичная отгонка фенола из алкилата) и К-38 (разделение алкилата на фенол и поток ПТБФ с побочными продуктами) и рециркулирует на реакционный узел (потоки 3 и 4). В товарном ПТБФ содержание фенола не должно превышать величину порядка 0,2% мас. Из куба колонны К-38 поток 11 подается на узел разделения ПТБФ от побочных продуктов в колонну К-148. Кубовый продукт колонны К-148 (поток 5) возвращается на переалкилирование в реактор, где в результате протекания реакции диспропорционирования побочный продукт 2,4-диТБФ превращается в целевой продукт ПТБФ. С верха колонны (потоки 12 и 13) ПТБФ направляется на чешуирование и упаковку.

В работе [7] моделируется работа узла выделения непрореагировавшего фенола (колонны К-31 и К-38). С целью оптимизации технологической схемы получения товарного ПТБФ проведением вычислительного эксперимента ниже исследуется работа колонны К-148.

Исследование проводили с использованием моделирующей системы Honeywell UniSim Design [8]. В качестве математического пакета для расчета термодинамических свойств компонентов технологических потоков использовали метод NRTL. Адекватность модели схемы получения товарного ПТБФ (рисунок 2) подтверждается сопоставлением расчетных значений с промышленными данными.

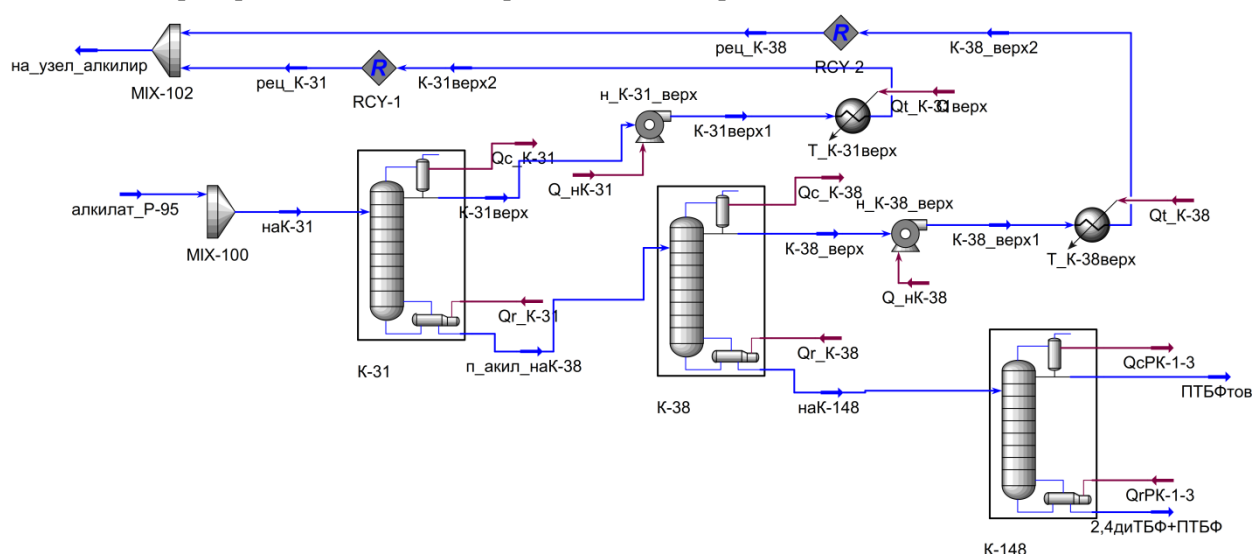


Рисунок 2. Фрагмент определенной регламентом технологической схемы узла разделения алкилата и получения товарного ПТБФ (распечатка в среде Honeywell UniSim Design)

Figure 2. Fragment of the process flow diagram of the alkylate separation unit and production of commercial para-tertiary butylphenol, defined by the regulations (printout in Honeywell UniSim Design environment)

В состав компонентов технологических потоков включены фенол, i-бутен, 1-бутен, транс 2-бутен, цис 2-бутен, 1,3-бутадиен, мезитилоксид, α-метилстирол, кумол, вода, азот, кислород, ПТБФ, ОТБФ, 2,6-ди-трет-бутилфенол, 2,4-ди-трет-бутилфенол, 2,4,6-три-трет-бутилфенол, высококипящие продукты.

Для моделирования технологической схемы использовали значения технологических параметров и компонентный состав для потока **алкилат_P-95**, приведенные на рисунке 3.

Stream Name	алкилат_P-95
Vapour / Phase Fraction	0,0000
Temperature [C]	100,0
Pressure [kPa]	100,0
Molar Flow [kgmole/h]	36,74
Mass Flow [kg/h]	3867
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	3,741
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1,599e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-61,87
Heat Flow [kJ/h]	-5,873e+006
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	3,639

(a)

	Mass Fractions
Phenol	0,718043
ptrbtylphenl	0,277798
o-TBPh*	0,001190
2,6-Di-TBPh*	0,000000
2,4-Di-TBPh*	0,002669
2,4,6-Tri-TBPh*	0,000000
P_isom*	0,000300

(b)

Рисунок 3. Значения технологических параметров (a) и компонентный состав (b) потока **алкилат_P-95** (распечатка в Honeywell UniSim Design)

Figure 3. Values of technological parameters (a) and component composition (b) of **алкилат_P-95** flow (printout in Honeywell UniSim Design)

Name	наК-148	2,4диТБФ+ПТБФ	ПТБФтов
Vapour	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature [C]	170,1	171,1	129,7
Pressure [kPa]	13,33	13,33	2,667
Molar Flow [kgmole/h]	7,228	0,6725	6,555
Mass Flow [kg/h]	1089	104,5	984,8
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1,110	0,1077	1,003
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,223e+005	-2,298e+005	-2,355e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-12,58	19,20	-75,66
Heat Flow [kJ/h]	-1,607e+006	-1,545e+005	-1,544e+006

(a)

	наК-148	2,4диТБФ+ПТБФ	ПТБФтов
Phenol	0,000000	0,000000	0,000000
ptrbtylphenl	0,988473	0,921093	0,995385
o-TBPh*	0,004150	0,000028	0,004573
2,6-Di-TBPh*	0,000000	0,000000	0,000000
2,4-Di-TBPh*	0,006918	0,073951	0,000042
2,4,6-Tri-TBPh*	0,000000	0,000000	0,000000
P_isom*	0,000459	0,004929	0,000000

(b)

Рисунок 4. Значения технологических параметров (a) и компонентный состав (b) потоков колонны К-148 (распечатка в Honeywell UniSim Design)

Figure 4. Values of technological parameters (a) and component composition (b) of K-148 column flows (printout in Honeywell UniSim Design)

В соответствии с технологической схемой процесса (рисунок 1) кубовый остаток колонны К-148 направляют в реактор алкилирования [5]. Анализ его компонентного состава (поток **2,4 диТБФ + ПТБФ** на рисунке 4b столбец 3) показывает, что в данном потоке порядка 92% мас. (расчеты выполнены для приведенного выше на рисунке 3 состава алкилата, поступающего на узел выделения непрореагировавшего фенола и получения товарного ПТБФ) составляет целевой продукт. Его поступление в реактор с потоком 5 приводит к уменьшению полезного реакционного объема аппарата, следовательно, практический интерес представляет оценка принципиальной возможности выделения из кубового остатка колонны К-148 качественного целевого продукта ПТБФ. Ниже описывается возможный вариант изменения технологической схемы процесса с включением в неё дополнительной ректификационной колонны. Решение задачи нами осуществлялось проведением вычислительного эксперимента с использованием программной среды Honeywell UniSim Design.

На рисунке 5 представлен фрагмент измененной технологической схемы узла разделения алкилата и получения товарного ПТБФ. В схему включена дополнительная ректификационная колонна РК-1–2, на питание которой поступает кубовый остаток колонны К-148

(поток **2,4 диТБФ + ПТБФ**). Верхом колонны РК-1–2 отбирается поток целевого продукта (поток **ПТБФ**), соответствующий качеству товарного ПТБФ, а кубовый остаток (поток **2,4 диТБФ_в_Е-1**) рециркулирует в реактор алкилирования. Рассчитанные конструкционные параметры колонны: число тарелок $N_t = 31$, тарелка питания $N_{пит} = 27$, эффективность контактного устройства 0.65, флегмовое число $R = 7$. Значения технологических параметров и компонентный состав потоков колонны РК-1–2 приведены на рисунке 6. Графики изменения температурного профиля и величин потоков жидкой и паровой фаз по высоте колонны показаны на рисунке 7.

Из рисунка 6b следует (поток **ПТБФ**), что найденные технологические режимы для дополнительной колонны РК-1–2 (рисунок 6a) обеспечивают получение из кубового остатка колонны К-148 дополнительного количества товарного ПТБФ ~ 85.79 кг/час или 8.8% к количеству ПТБФ с верха колонны К-148, составляющему ~ 980.27 кг/час, с одновременным значительным уменьшением количества ПТБФ, возвращаемого в реактор алкилирования на величину порядка 87.62 кг/час (уменьшение на $\sim 91\%$), что обеспечивает соответствующее «освобождение» используемого объема реактора на $\sim 1.7\%$.

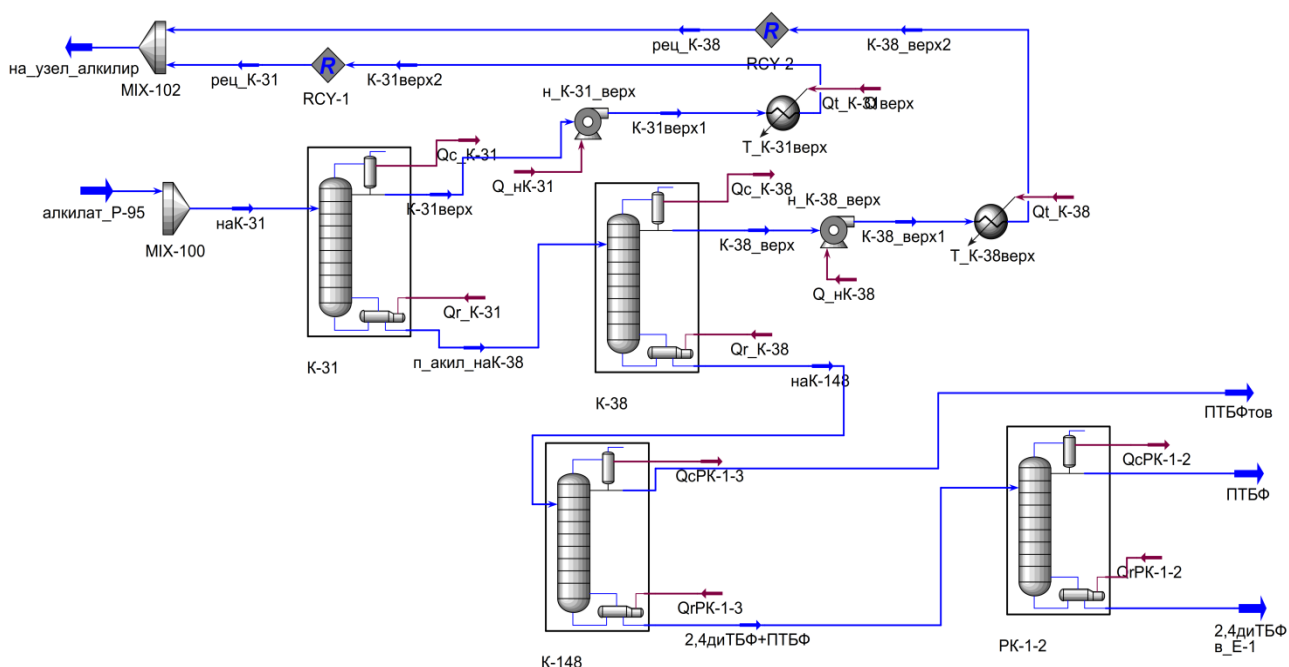


Рисунок 5. Фрагмент измененной технологической схемы узла разделения алкилата и получения товарного ПТБФ с включением дополнительной колонны РК-1–2 (распечатка в среде Honeywell UniSim Design)

Figure 5. Fragment of the modified technological scheme of the alkylate separation unit and the production of commercial para-tertiary butylphenol with the inclusion of an additional column PK-1–2 (printout in the Honeywell UniSim Design environment)

Name	2,4диТБФ+ПТ	2,4диТБФ в_Е-	ПТБФ
Vapour	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature [C]	171,1	162,7	129,7
Pressure [kPa]	13,33	7,900	2,667
Molar Flow [kgmole/h]	0,6725	0,1012	0,5713
Mass Flow [kg/h]	104,5	18,63	85,85
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1077	2,022e-002	8,745e-002
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,298e+005	-2,777e+005	-2,363e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	19,20	178,4	-74,03
Heat Flow [kJ/h]	-1,545e+005	-2,809e+004	-1,350e+005

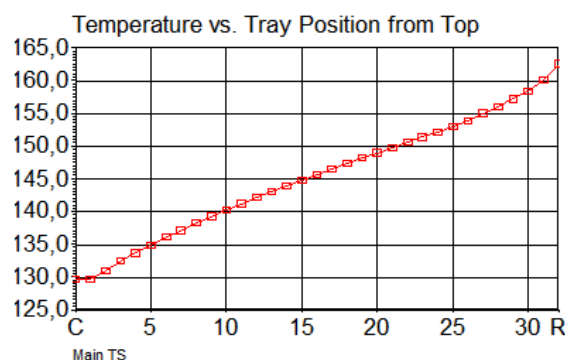
(a)

	2,4диТБФ+ПТБФ	2,4диТБФ в_Е-1	ПТБФ
Phenol	0,000000	0,000000	0,000000
ptrbtylphenl	0,921093	0,479440	0,999298
o-TBPh*	0,000028	0,000003	0,000032
2,6-Di-TBPh*	0,000000	0,000000	0,000000
2,4-Di-TBPh*	0,073951	0,487796	0,000670
2,4,6-Tri-TBPh*	0,000000	0,000000	0,000000
P_isom*	0,004929	0,032762	0,000000

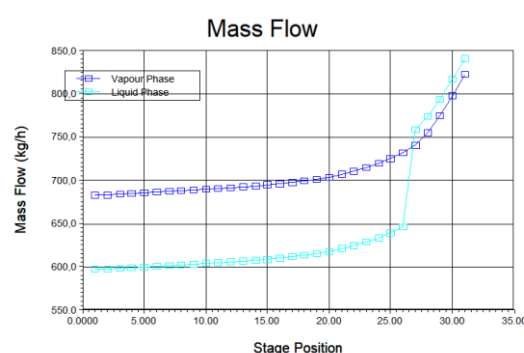
(b)

Рисунок 6. Значения технологических параметров (a) и компонентный состав (b) потоков колонны РК-1–2 (распечатка в Honeywell UniSim Design)

Figure 6. Values of technological parameters (a) and component composition (b) of PK-1–2 column flows (printout in Honeywell UniSim Design)



(a)



(b)

Рисунок 7. Графики изменения технологических характеристик по высоте колонны РК-1–2: (a) – температурный профиль в °C; (b) – потоки жидкой и паровой фаз в кг/час (распечатка в Honeywell UniSim Design)

Figure 7. Graphs of changes in technological characteristics along the height of the PK-1–2 column: (a) – temperature profile in °C; (b) – flows of liquid and vapor phases in kg/hour (printout in Honeywell UniSim Design)

Анализ потоков фаз по высоте колонны РК-1–2 (рисунок 7b) показывает на возможность использования одинакового диаметра для испаряющей и укрепляющей частей аппарата.

Закключение

В результате выполненного анализа состава технологических потоков промышленной установки получения ПТБФ и результатов её моделирования в среде Honeywell UniSim Design установлено, что в кубовом остатке

колонны К-148, возвращаемом в реактор алкилирования, содержится до 96% мас. целевого продукта, поступление которого в реактор приводит к уменьшению полезного реакционного объёма аппарата, и одновременно практический интерес представляет оценка возможности выделения из него качественного целевого ПТБФ. Для этого предложен вариант изменения технологической схемы процесса с включением в неё дополнительной ректификационной колонны РК-1–2. Рассчитанные по модели

оценки технологических и конструкционных параметров колонны РК-1–2 показали, что отбираемый в качестве дистиллята поток содержит 99.92% мас. целевого ПТБФ, что составляет порядка 8.8% к количеству целевого продукта, отбираемого с верха колонны К-148. Одновременно с этим, уменьшение количества пара-третичного бутилфенола в кубовом остатке колонны РК-1–2 обеспечивает увеличение использования объема реактора алкилирования на 1.7%. Результаты исследований

и разработанная в моделирующей программной среде UniSim Design модель усовершенствованного узла разделения алкилата и получения товарного ПТБФ, включающего дополнительную колонну РК-1–2, могут быть использованы для оптимизации технологических режимов и оценки конструкционных параметров массообменных аппаратов схемы, а также для обучения технологов приемам квалифицированного ведения процесса.

Литература

- 1 Воронин И.О., Наумкин П.В., Нестерова Т.Н. Равновесие жидкофазной структурной и позиционной изомеризации разветвленных пентилфенолов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2011. Т. 13. №. 4-4.
- 2 ИТС 31–2017. Производство продукции тонкого органического синтеза. М: Бюро НДТ. 2017. 167 с.
- 3 Воронин И.О., Нестерова Т.Н., Стрельчик Б.С., Журавский Е.А. Сравнение эффективности сульфокатионитов, применяемых в производстве пара-трет-бутилфенола, на основе кинетического исследования переалкилирования в системе фенол–трет-бутилфенолы // Кинетика и катализ. 2014. Т. 55. №. 6. С. 723-723.
- 4 Воронин И.О., Нестерова Т.Н., Головин Е.В. Идентификация компонентов рециклового потока производства *пара-трет*-бутилфенола // V Всероссийская конференция «Современные наукоемкие инновационные технологии». 2013. С. 331–334
- 5 Пат. № 2502718, RU, C07C 37/74, 39/06, B01D 3/16. Способ получения пара-трет-бутилфенола и устройство для его осуществления / Стрельчик Б.С., Соглаев И.В., Сендель А.К., Никулин А.А. и др. № 2012128913/04; Заявл. 06.07.2012; Опубл. 27.12.2013, Бюл. № 36.
- 6 Рубцов Д.В., Ланько Д.С. Каскадирование процессов как средство оптимизации рабочих параметров испарителей пара-трет-бутилфенола при вакуумной ректификации // Химическая техника. 2016. № 5. С. 26–27.
- 7 Хабибрахманова О.В., Попов С.В. Моделирование узла разделения алкилата установки синтеза пара-третичного бутилфенола // Результаты современных научных исследований и разработок: сборник статей XI Всероссийской научно-практической конференции. Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение», 2020. С. 62–65.
- 8 Honeywell, Unisim Design User Guide, 2013.
- 9 Яркина Е.М., Курганова Е.А., Фролов А.С., Кошель Г.Н. и др. Кислотное разложение гидропероксида пара-трет-бутилкумола до пара-трет-бутилфенола и ацетона // Журнал прикладной химии. 2019. Т. 92. №. 11. С. 1427-1434.
- 10 Терехов А.В., Занавескин Л.Н., Хаджиев С.Н. Выбор оптимального катализатора процесса получения пара-трет-бутилфенола алкилированием фенола трет-бутанолом // Нефтехимия. 2017. Т. 57. №. 4. С. 453-456.
- 11 Яркина Е.М., Курганова Е.А., Фролов А.С., Кошель Г.Н. и др. Синтез пара-трет-бутилкумола // Тонкие химические технологии. 2021. Т. 16. №. 1. С. 26-35.
- 12 Носков Ю.Г., Крон Т.Е., Карчевская О.Г., Корнеева Г.А. Получение огнестойких жидкостей на основе смешанных три (фенил-, пара-трет-бутилфенил) фосфатов реакцией переэтерификации трифенилфосфата пара-трет-бутилфенолом // Журнал прикладной химии. 2020. Т. 93. №. 8. С. 1181-1187.
- 13 Terekhov A.V., Zhanavskiy L.N., Khadzhiyev S.N. Selecting an optimum catalyst for producing para-tert-butylphenol by phenol alkylation with tert-butanol // Petroleum Chemistry. 2017. V. 57. №. 8. P. 714-717. doi: 10.1134/S096554411708014X
- 14 Voronin I.O., Nesterova T.N., Strelchik B.S., Zhuravskii E.A. Efficiency of sulfonic cation-exchange resins used in para-tert-butylphenol production: A comparison based on the kinetics of transalkylation in the phenol-tert-butylphenols system // Kinetics and Catalysis. 2014. V. 55. №. 6. P. 705-711. doi: 10.1134/S0023158414060147
- 15 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Lebedeva N.V. et al. Aerobic Liquid-Phase Oxidation of Para-tert-Butylcumene to Hydroperoxide // Petroleum Chemistry. 2019. V. 59. №. 11. P. 1245-1248. doi: 10.1134/S0965544119110161
- 16 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Koshel G.N. et al. Para-tert-butylcumene synthesis // Fine Chemical Technologies. 2021. V. 16. №. 1. P. 26-35. doi: 10.32362/2410-6593-2020-16-1-26-35
- 17 Xie G., Chen Z., Ramakrishna S., Liu Y. et al. Orthogonal design preparation of phenolic fiber by melt electrospinning // Journal of Applied Polymer Science. 2015. V. 132. №. 38. doi: 10.1002/app.42574
- 18 Xu L., Wang F., Feng Z., Liu Z. et al. Hierarchical ZSM-5 Zeolite with Enhanced Catalytic Activity for Alkylation of Phenol with Tert-Butanol // Catalysts. 2019. V. 9. №. 2. P. 202. doi: 10.3390/catal9020202
- 19 Li J., Lou L.L., Xu C., Liu S. Synthesis, characterization of Al-rich ZSM-12 zeolite and their catalytic performance in liquid-phase tert-butylation of phenol // Catalysis Communications. 2014. V. 50. P. 97-100. doi: 10.1016/j.catcom.2014.03.011
- 20 Krymkin N.Y., Shkun, V.A., Nesterova T.N., Naumkin P.V. et al. Theory and practice of alkyl phenol synthesis. tert-octylphenols // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2016. V. 55. №. 37. P. 9829-9839. doi: 10.1021/acs.iecr.6b02067

References

- 1 Voronin I.O., Naumkin P.V., Nesterova T.N. Equilibrium of liquid-phase structural and positional isomerization of branched pentylphenols. Bulletin of the Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences. 2011. vol. 13. no. 4-4. (in Russian).
- 2 ITS 31–2017. Production of fine organic synthesis products. Moscow, Bureau of NTD. 2017. 167 p. (in Russian).
- 3 Voronin I.O., Nesterova T.N., Strelchik B.S., Zhuravsky E.A. Comparison of the efficiency of sulfonic cation exchangers used in the production of para-tert-butylphenol based on the kinetic study of transalkylation in the phenol-tert-butylphenols system. Kinetics and Catalysis. 2014. vol. 55. no. 6. pp. 723-723. (in Russian).
- 4 Voronin I.O., Nesterova T.N., Golovin E.V. Identification of the components of the recycle stream of the production of para-tert-butylphenol. V All-Russian conference "Modern high-tech innovative technologies". 2013. pp. 331–334. (in Russian).
- 5 Strelchik B.S., Sogayev I.V., Sendel A.K., Nikulin A.A. et al. A method of obtaining para-tert-butylphenol and a device for its implementation. Patent RF, no. 2502718, 2013.
- 6 Rubtsov D.V., Lanko D.S. Cascading processes as a means of optimizing the operating parameters of para-tert-butylphenol evaporators during vacuum rectification. Khimicheskaya tekhnika. 2016. no. 5. pp. 26–27. (in Russian).
- 7 Khabibrakhmanova O.V., Popov S.V. Modeling of the alkylate separation unit of the para-tertiary butylphenol synthesis unit. Results of modern scientific research and development: collection of articles of the XI All-Russian scientific and practical conference. Penza, ICNS "Science and Education", 2020. pp. 62–65. (in Russian).
- 8 Honeywell, Unisim Design User Guide, 2013.
- 9 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Koshel G.N. et al. Acid decomposition of para-tert-butylcumol hydroperoxide to para-tert-butylphenol and acetone. Journal of Applied Chemistry. 2019. vol. 92. no. 11. pp. 1427-1434. (in Russian).
- 10 Terekhov A.V., Zanaevskiy L.N., Khadzhiyev S.N. The choice of the optimal catalyst for the process of obtaining para-tert-butylphenol by alkylation of phenol with tert-butanol. Neftekhimiya. 2017. vol. 57. no. 4. pp. 453-456. (in Russian).
- 11 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Koshel G.N. et al. Synthesis of para-tert-butylcumol. Fine chemical technologies. 2021. vol. 16. no. 1. pp. 26-35. (in Russian).
- 12 Noskov Yu.G., Kron T.E., Karchevskaya O.G., Korneeva G.A. Obtaining fire-resistant liquids based on mixed tri (phenyl, para-tert-butylphenyl) phosphates by transesterification of triphenyl phosphate with para-tert-butylphenol. Journal of Applied Chemistry. 2020. vol. 93. no. 8. pp. 1181-1187. (in Russian).
- 13 Terekhov A.V., Zanaevskiy L.N., Khadzhiyev S.N. Selecting an optimum catalyst for producing para-tert-butylphenol by phenol alkylation with tert-butanol. Petroleum Chemistry. 2017. vol. 57. no. 8. pp. 714-717. doi: 10.1134/S096554411708014X
- 14 Voronin I.O., Nesterova T.N., Strelchik B.S., Zhuravskii E.A. Efficiency of sulfonic cation-exchange resins used in para-tert-butylphenol production: A comparison based on the kinetics of transalkylation in the phenol-tert-butylphenols system. Kinetics and Catalysis. 2014. vol. 55. no. 6. pp. 705-711. doi: 10.1134/S0023158414060147
- 15 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Lebedeva N.V. et al. Aerobic Liquid-Phase Oxidation of Para-tert-Butylcumene to Hydroperoxide. Petroleum Chemistry. 2019. vol. 59. no. 11. pp. 1245-1248. doi: 10.1134/S0965544119110161
- 16 Yarkina E.M., Kurganova E.A., Frolov A.S., Koshel G.N. et al. Para-tert-butylcumene synthesis. Fine Chemical Technologies. 2021. vol. 16. no. 1. pp. 26-35. doi: 10.32362/2410-6593-2020-16-1-26-35
- 17 Xie G., Chen Z., Ramakrishna S., Liu Y. et al. Orthogonal design preparation of phenolic fiber by melt electrospinning. Journal of Applied Polymer Science. 2015. vol. 132. no. 38. doi: 10.1002/app.42574
- 18 Xu L., Wang F., Feng Z., Liu Z. et al. Hierarchical ZSM-5 Zeolite with Enhanced Catalytic Activity for Alkylation of Phenol with Tert-Butanol. Catalysts. 2019. vol. 9. no. 2. pp. 202. doi: 10.3390/catal9020202
- 19 Li J., Lou L.L., Xu C., Liu S. Synthesis, characterization of Al-rich ZSM-12 zeolite and their catalytic performance in liquid-phase tert-butylation of phenol. Catalysis Communications. 2014. vol. 50. pp. 97-100. doi: 10.1016/j.catcom.2014.03.011
- 20 Krymkin N.Y., Shakun, V.A., Nesterova T.N., Naumkin P.V. et al. Theory and practice of alkyl phenol synthesis. tert-octylphenols. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2016. vol. 55. no. 37. pp. 9829-9839. doi: 10.1021/acs.iecr.6b02067

Сведения об авторах

Леонид С. Коваленко магистрант, кафедра химии и химической технологии, Самарский государственный технический университет, филиал в г. Новокуйбышевске, ул. Мironova, 5, г. Новокуйбышевск, 446200, Россия, chemicaluniversity@mail.ru

 <https://orcid.org/0000-0003-3430-4654>

Сергей В. Попов к.т.н., доцент, кафедра химии и химической технологии, Самарский государственный технический университет, филиал в г. Новокуйбышевске, ул. Мironova, 5, г. Новокуйбышевск, 446200, Россия, svpopov2018@ya.ru

 <https://orcid.org/0000-0003-0533-9049>

Information about authors

Leonid S. Kovalenko master student, chemistry and chemical technology department, Samara State Technical University, branch in Novokuibyshevsk, st. Mironova, 5, Novokuibyshevsk, 446200, Russia, chemicaluniversity@mail.ru

 <https://orcid.org/0000-0003-3430-4654>

Sergey V. Popov Cand. Sci. (Engin.), associate professor, chemistry and chemical technology department, Samara State Technical University, branch in Novokuibyshevsk, st. Mironova, 5, Novokuibyshevsk, 446200, Russia, svpopov2018@ya.ru

 <https://orcid.org/0000-0003-0533-9049>

Оксана В. Хабибрахманова к.х.н., доцент, кафедра химии и химической технологии, Самарский государственный технический университет, филиал в г. Новокуйбышевске, ул. Миронова, 5, г. Новокуйбышевск, 446200, Россия, chemicaluniversity@mail.ru

 <https://orcid.org/0000-0002-1523-9861>

Oksana V. Khabibrakhmanova Cand. Sci. (Chem.), associate professor, chemistry and chemical technology department, Samara State Technical University, branch in Novokuibyshevsk, st. Mironova, 5, Novokuibyshevsk, 446200, Russia, chemicaluniversity@mail.ru

 <https://orcid.org/0000-0002-1523-9861>

Вклад авторов

Леонид С. Коваленко обзор литературных источников по исследуемой проблеме, разработал модели и провел вычислительный эксперимент

Сергей В. Попов разработал модели и провел вычислительный эксперимент

Оксана В. Хабибрахманова консультация в ходе исследования

Contribution

Leonid S. Kovalenko review of the literature on an investigated problem, developed models and conducted a computational experiment

Sergey V. Popov developed models and conducted a computational experiment

Oksana V. Khabibrakhmanova consultation during the study

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 09/07/2021	После редакции 02/08/2021	Принята в печать 20/08/2021
Received 09/07/2021	Accepted in revised 02/08/2021	Accepted 20/08/2021