Оригинальная статья/Research article Open Access Available online at vestnik-vsuet.ru

**УДК** 004.94

# Сравнительное исследование геометрических характеристик микрокапилляров для проведения химических реакций

Михаил В. Шишанов <sup>1</sup>	shishanov.m.v@muctr.ru	0000-0003-2861-5878
Христофор Герман Кук <sup>1</sup>	kuk.khristofor@inbox.ru	0009-0005-7115-6760
Элиза Л. Геворкян	eliza.gevorkyan15@mail.ru	0009-0005-4510-5046
Александр Ю. Ботнев <sup>1</sup>	botnev2001@gmail.com.	0009-0006-2055-4205

1 Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Миусская площадь, д.9 стр.1, г. Москва, 125047, Россия

Аннотация. В данной статье проведено комплексное сравнительное исследование различных геометрических характеристик микрокапилляров, которые используются для проведения химических реакций. Рассмотрены три основные формы микрокапилляров: серпантинная, фрактальная и лобулярная. Основное внимание уделено тому, как геометрия микрокапилляров влияет на ключевые параметры реакционного процесса, включая эффективность смешения реагентов, распределение потоков, теплопередачу и скорость реакции. Оптимизация этих параметров является крайне важной для повышения производительности химических процессов в микромаештабах. Для моделирования использовалось программное обеспечение COMSOL Multiphysics, которое дало возможность провести оценку гидродинамических характеристик, таких как число Рейнольдса, коэффициенты перемешивания и профиль распределения температуры. В исследование также включены расчеты критериев, используемых для количественной оценки эффективности смешения реагентов. Кроме численного моделирования, проведены эксперименты, результаты которых использовались для верификации полученных расчетных данных. Это позволило повысить точность и достоверность выводов. Результаты исследования показывают, что выбор геометрии микрокапилляров оказывает значительное влияние на гидродинамические параметры течения и, следовательно, на общую эффективность химических реакций. Например, серпантинная геометрия может обеспечивать лучшее перемешивание на ранних этапах реакции, тогда как кишкообразная форма может быть оптимальной для длительных процессов с высокой скоростью теплообмена. Выводы данной работы содержат практические рекомендации по выбору геометрии микрокапилляров в зависимости от специфики химической реакции. На примере самоконденсации ацетона была выявлена подходящая геометрия – лобулярная. Рекомендации направлены на повышение производительности, улучшение качества продуктов реакции и снижение энергетических затрат.

Ключевые слова: микроканалы, геометрические характеристики, число Рейнольдса, число Пекле, перепад давления, смешивание, микрофлюидные системы.

## Comparative study of geometric characteristics of microcapillaries for chemical reactions

Mikhail V. Shishanov	1	shishanov.m.v@muctr.ru	0000-0003-2861-5878
Christopher German Cook	1	kuk.khristofor@inbox.ru	0009-0005-7115-6760
Eliza L. Gevorkyan	1	eliza.gevorkyan15@mail.ru	0009-0005-4510-5046
Alexander Yu. Botnev	1	botnev2001@gmail.com.	0009-0006-2055-4205
1 Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya Square, 9 str.1, Moscow, 125047, Russia			

Abstract. In this paper, a comprehensive comparative study of various geometrical characteristics of microcapillaries used for chemical reactions is carried out. Three main shapes of microcapillaries are considered: serpentine, fractal and lobular. The focus is on how microcapillary geometry affects key parameters of the reaction process, including reactant mixing efficiency, flow distribution, heat transfer, and reaction rate. Optimization of these parameters is critical to improve the performance of chemical processes at the microscale. COMSOL Multiphysics software was used for the simulations, which enabled the evaluation of hydrodynamic characteristics such as Reynolds number, mixing coefficients and temperature distribution profile. The study also includes calculations of criteria used to verify the obtained calculated data. This improved the accuracy and reliability of the conclusions. The results of the study show that the choice of microcapillary geometry has a significant influence on the hydrodynamic parameters of the flow and, consequently, on the overall efficiency of chemical reactions. For example, serpentine geometry may provide better mixing in the early stages of the reaction, whereas a brush-like shape may be optimal for long-term processes with high heat transfer rates. The conclusions of this work provide practical recommendations for the choice of microcapillary geometry, lobular, was identified. The recommendations are aimed at increasing productivity, improving the quality of reaction products and reducing energy costs.

Keywords: microchannels, geometrical characteristics, Reynolds number, Peclet number, pressure drop, mixing, microfluidic systems.

Для цитирования Шишанов М.В., Кук Х.Г., Геворкян Э.Л., Ботнев А.Ю. Сравнительное исследование геометрических характеристик микрокапилляров для проведения химических реакций // Вестник ВГУИТ. 2024. Т. 86. № 3. С. 274–281. doi:10.20914/2310-1202-2024-3-274-281 For citation

Shishanov M.V., Cook K.G., Gevorkyan E.L., Botnev A.Yu. Comparative study of geometric characteristics of microcapillaries for chemical reactions. Vestnik VGUIT [Proceedings of VSUET]. 2024. vol. 86. no. 3. pp. 274–281. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2024-3-274-281

 $\ensuremath{\mathbb{C}}$  2024, Шишанов М.В. и др. / Shishanov M.V. et al.

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

### Введение

В последние годы значительно возрос интерес к использованию микрокапилляров в химических реакциях [1-2], что связано с их особыми характеристиками, такими как высокий коэффициент теплопередачи и возможность точного контроля процессов на микроуровне. Эти свойства делают микрокапилляры идеальными инструментами для исследований в области химии, фармацевтики и биотехнологий. Развитие микрорадиаторных технологий привело к новым возможностям повышения эффективности химических реакций за счет оптимизации смешивания реагентов на микроскопическом уровне. Одним из ключевых факторов, влияющих на производительность микрокапилляров, является их геометрия, которая определяет динамику потоков и степень смешивания жидкостей.

В данной работе проводится сравнительное исследование геометрических характеристик различных типов микрокапилляров, применяемых в химических реакциях. Основное внимание уделяется влиянию геометрии на эффективность смешивания и взаимодействия реагентов при низких значениях числа Рейнольдса. Этот аспект имеет решающее значение для разработки более эффективных микрореакторов, способных улучшить результаты во множестве областей – от синтеза лекарственных препаратов до производства высококачественных наноматериалов.

Прогресс в микро- и нанотехнологиях также сыграл важную роль в развитии микрокапилляров. Каналы диаметром менее 1 мм обеспечивают значительно более высокий коэффициент теплопередачи по сравнению с традиционными реакционными сосудами, что повышает энергоэффективность процессов и снижает затраты. Малые размеры каналов увеличивают удельную площадь поверхности, способствуя лучшей теплопередаче.

Исследования показывают [1, 3], что для оптимизации теплопередачи и минимизации гидравлического сопротивления необходимо учитывать геометрию микрокапилляров. Форма канала, его диаметр и структура внутренней поверхности оказывают непосредственное влияние на поведение жидкости и газов в микрокапилляре, что, в свою очередь, определяет общую эффективность реакций. Кроме того, вариации в этих параметрах могут привести к значительным изменениям в кинетике химических процессов, что делает их важным фактором при разработке и оптимизации микрореакторов.

Основной реакцией для выявления подходящей геометрии микрокапилляров будет являться альдольная конденсация ацетона [4] в условиях щелочной среды, в результате которой

выходит важное промышленное вещество, широко используемое в производстве красок, чернил, лаков, клеящих составов, виниловых смол и сополимеров, а также в синтезе пестицидов и в качестве промежуточного соединения для органического синтеза. Альдольная конденсация ацетона является многоступенчатой реакцией [5-6], в ходе которой из ацетона, воды и щелочного катализатора образуются промежуточные соединения (диацетоновый спирт и мезитилоксид) и побочные продукты (оксилитон и тяжёлые соединения), с получением целевого продукта – изофорона [7]. Коммерческая эффективность этого процесса зависит от контроля над специфичностью реакции и поддержания высокой селективности в рамках стехиометрических соотношений. Одним из ключевых параметров работы установки является селективное использование ацетона в процессе 3,5,5-триметил-2-циклогексен-1-она. получения На селективность оказывают влияние такие факторы, как температура, давление, концентрация реагентов и гидродинамические условия, а применение микрофлюидных технологий может способствовать повышению селективности до 10-15% [8].

Цель работы – сравнительное исследование геометрических характеристик микрокапилляров различных форм для оптимизации проведения химических реакций, а также анализ влияния этих характеристик на такие ключевые параметры, как перепад давления, смешивание и массоперенос в микрофлюидных системах с использованием программы COMSOL Multiphysics.

### Материалы и методы

В данном исследовании будут рассматриваться серпантинообразной, фрактальной и лобулярной формы микрокапилляра (рисунок 1) [19-20]. Лобулярная, в дальнейшем «лобуляр», форма микроканалов увеличивает площадь поверхности, улучшает удержание жидкости, снижает гидродинамическое сопротивление и риск запирания потока, а также повышает прочность и устойчивость к механическим нагрузкам. В серпантинообразных, в дальнейшем «серпантин», микрокапиллярах, благодаря многократным изменениям направления потока, удается добиться более равномерного распределения реагентов по всему объему, что важно при проведении экзотермических реакций. Фрактальные, в дальнейшем «фрактал», микрокапилляры представляют собой сочетание извилистых и ветвящихся каналов, что позволяет эффективно управлять потоками на микроуровне и минимизировать потери давления.

### Shishanov M.V. et al. Proceedings of VSUET, 2024, vol. 86, no. 3, pp. 274-281

# (a) (b)

Рисунок 1. Различные формы микроканалов (а – фрактал, b – серпантин, с – лобуляр)

Figure 1. Different shapes of microchannels (a - fractal, b - serpentine, c - lobular)

Данные формы микроканалов были выбраны за их способность обеспечивать высокую эффективность реакций в условиях низких чисел Рейнольдса, а также за их способность к улучшению теплопередачи и перемешивания. Кроме того, исследование этих геометрий позволило глубже понять, как их особенности влияют на процессы гидродинамики и теплопередачи, что важно для дальнейшего улучшения и оптимизации микрореакторных систем.

### post@vestnik-vsuet.ru

Кинетические параметры получения 3,5,5-триметил-2-циклогексен-1-она были получены по справочным данным из работы [9–13], прописанные в таблице 1. В качестве критерия оптимальности потока использовалась средняя молярная концентрация 3,5,5-триметил-2-циклогексен-1-она на выходе из реакционного микрокапилляра [14–16].

Альдольная конденсация ацетона (1–5) – процесс многостадийный [17–18], включающий следующие реакции:

$$2C_{3}H_{6}O\overset{\stackrel{\scriptscriptstyle A}}{\underset{\leftarrow}{\longrightarrow}}C_{6}H_{12}O_{2} \tag{1}$$

$$C_6 H_{12} O_2 \xleftarrow[k_4]{k_3} C_6 H_{10} O + H_2 O \tag{2}$$

$$C_{3}H_{6}O + C_{6}H_{10}O \xrightarrow[k_{6}]{k_{5}} C_{9}H_{14}O + H_{2}O \qquad (3)$$

$$C_{9}H_{14}O + C_{3}H_{6}O \xrightarrow{k7} C_{12}H_{18}O + H_{2}O \qquad (4)$$

$$2C_6H_{10}O \to C_{12}H_{18}O + H2O$$
 (5)

Таблица 1.

Кинетические параметры стадий получения 3,5,5-триметил-2-циклогексен-1-она Table 1.

				1 1 1
K inotic poromotors of the s	and in the nron	orotion of i	5 tramothy 1	avalobayan Long
KINEIR DALAMETER OF THE S	EUX III IIIE DIED		) = [1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1	
itilietie parameters or the	copo in the prep	ununon or 5,5	, chineniyi $\Delta$	eyelonexen i one

Реакция	Константа	Предэкспонтенциальный множитель	Энергия активации, кДж/кмоль
Reaction	Constant	Pre-exponential multiplier	Activation energy, kJ/kmol
1	k1	4,08 х 10 <sup>2</sup> , м <sup>3</sup> ч/кмоль	14650
1	k2	3,37 х 10 <sup>9</sup> , 1/ч	34400
2	k3	7,19 x 10 <sup>15</sup> , 1/ч	90000
	k4	5,98 х 10 <sup>8</sup> , 1/ч	53038
3	k5	3,19 х 10 <sup>17</sup> , м <sup>3</sup> ч/кмоль	93259
4	k7	5,35 х 10 <sup>2</sup> , м <sup>3</sup> ч/кмоль	34400
5	k8	4,52 х 10 <sup>14</sup> , м <sup>3</sup> ч/кмоль	90000

Для сравнительной характеристики микрокапилляров различной геометрии будет применялся ряд методов исследования, с использованием программы COMSOL Multiphysics, что обеспечит комплексный анализ и моделирование различных аспектов работы микрокапилляров. Программа COMSOL позволяет интегрировать различные физические процессы и управлять ими в едином программном окружении. В рамках этого исследования использовались следующие методы и уравнения:

Анализ скорости потока и распределения скорости. В COMSOL Multiphysics применялось решение уравнений Навье–Стокса для анализа

скорости потока и распределения внутри микрокапилляров. В программе для моделирования потока используется уравнение:

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + v\nabla v\right) = \nabla p + \mu \nabla^2 v + f \qquad (6)$$

где  $\rho$  – плотность жидкости,  $\nu$  – вектор скорости, p – давление,  $\mu$  – динамическая вязкость, f – внешняя сила.

Моделирование реакционно-диффузионных процессов. Уравнение для моделирования реакционно-диффузионных процессов в микроканалах с учетом конвективного переноса, диффузии и химической реакции описывается в интерфейсе

post@vestnik-vsuet.ru

Transport of Diluted Species и выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \left( -D\nabla C + vC \right) = R \tag{7}$$

где C – концентрация вещества, D – коэффициент диффузии, v – вектор скорости потока, R – скорость химической реакции.

Моделирование критерия Рейнольдса. Используя встроенные физические интерфейсы для моделирования течения жидкости, можно рассчитать скорость потока, профиль давления и другие параметры, необходимые для вычисления критерия Рейнольдса по формуле:

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \tag{8}$$

где  $\rho$  – плотность жидкости, v – средняя скорость потока, d – гидравлический диаметр микроканала,  $\mu$  – динамическая вязкость жидкости.

Моделирование критерия Пекле. Немаловажным параметром является критерий Пекле, характеризующий соотношение между конвективными и молекулярными процессами переноса теплоты. Данный критерий можно также задать в программе и рассчитать по формуле:

$$Pe = \frac{c_p \rho v L}{x}, \tag{9}$$

где  $c_p$  – удельная теплоемкость при постоянном давлении,  $\rho$  – плотность жидкости, v – скорость потока жидкости относительно поверхности теплообмена, L – характерный линейный размер поверхности теплообмена, x – коэффициент теплопроводности жидкости

### Результаты и обсуждения

**0D** моделирование. Для корректного моделирования в программной среде COMSOL сначала необходимо провести верификацию кинетических расчётов в 0D. Для этого был использован модуль «Reaction Engineering» COMSOL, основанный на стандартных уравнениях для расчёта кинетических параметров. Входными данными служили концентрации: 0,010324 моль/л ацетона и 0,0135 моль/л воды. На рисунке 2 (а) показано распределение концентраций ацетона и воды, полученных в результате моделирования на основе кинетических параметров реакции. Также данный модуль позволяет визуализировать кинетические кривые концентраций изофорона и основных побочных продуктов (рисунок 2 (b)).



Рисунок 2. Кинетические кривые компонентов (а – исходные вещества, b – изофорон и основные побочные продукты) Figure 2. Kinetic curves of components (a – starting substances, b – isophorone and main by-products)

**2D** моделирование. Для определения наиболее эффективной геометрии необходимо, чтобы площадь каналов была неизменной, и она равна ~ 20 см<sup>2</sup>. На входе также задавался и в последующем варьировался объемный расход исходных компонентов. Исходным значением является 0,25 мл/мин по ацетону и воде. Варьировался параметр от исходного значения до 2 мл/мин с шагом 0,25 мл/мин. Концентрации данных веществ совпадают с заданными при 0D моделировании.

По окончании расчетов были выведены графики зависимостей различных параметров друг от друга. Так, при изучении зависимости концентрации изофорона на выход от расхода поступающих реагентов (рисунок 3) видно, что при геометрии «фрактал» достигается максимальный выход продукта ~ 2%.

### post@vestnik-vsuet.ru



Рисунок 3. Зависимость средней концентрации изофорона на выходе от расхода поступающих реагентов Figure 3. Dependence of average isophorone concen-

tration at the outlet on the flow rate of incoming reagents

В системе необходимо поддерживать оптимальный перепад давления, чтобы не возникало рисков, снижения энергоэффективности и затруднения контроля над важными параметрами, что может негативно сказываться на эффективности процессов. Рассматривая рисунок 4, видно, что при геометрии «фрактал» возникает больший перепад давления, чем при системе «лобуляр».



Рисунок 4. Зависимость перепада давления от расхода поступающих реагентов

Figure 4. Dependence of pressure drop on the flow rate of incoming reagents

На рисунке 5 представлена зависимость перепада давления от числа Рейнольдса для трех геометрий микроканалов. Геометрия «фрактал» демонстрирует наибольший перепад давления, достигая более 3500 Па при  $Re \approx 60$ , что связано с высокой сопротивляемостью потоку из-за сложной траектории. «Серпантин» показывает более умеренный рост давления (около 2500 Па при тех же условиях), обеспечивая лучшее соотношение сопротивления и контроля потока. Наименьший перепад давления наблюдается для формы «лобуляр», где при Re = 60 перепад давления составляет около 1500 Па. Это делает

геометрию грибы оптимальной для минимизации гидравлических потерь и энергозатрат в системе микроканалов.



Рисунок 5. Зависимость критерия Рейнольдса от перепада давления в системе микрокапилляров

Figure 5. Dependence of the Reynolds criterion on the pressure drop in the microcapillary system

В микроканалах необходимо поддерживать доминирование конвективного переноса над молекулярной диффузией, что характеризуется числом Пекле [10]. На рисунке 6 видно, что концентрация 3,5,5-триметил-2-циклогексен-1-она на выходе уменьшается с увеличением числа Пекле для всех трех геометрий, что свидетельствует о лучшем перемешивании в системе. Геометрия «лобуляр» демонстрирует наибольший эффект уменьшения концентрации при увеличении числа Пекле, что говорит о более интенсивном перемешивании и лучшей диффузии. Наименьшее снижение концентрации наблюдается у геометрии «фрактал», что связано с более низкой эффективностью перемешивания в такой форме.



Рисунок 6. Зависимость числа Пекле от средней концентрации изофорона на выходе

Figure 6. Dependence of the Peclet number on the average isophoron concentration at the outlet

С ростом числа Рейнольдса также наблюдается снижение концентрации изофорона для всех геометрий (рисунок 7). Однако, как и в случае с числом Пекле, наибольшее снижение демонстрирует геометрия грибы, что указывает на ее преимущество в интенсификации массообмена и перемешивания при более высоких скоростях потока.



Рисунок 7. Зависимость числа Рейнольдса от средней концентрации изофорона на выходе

Figure 7. Reynolds number dependence on the average isophoron concentration at the outlet

### Заключение

В результате проведенного сравнительного исследования геометрических характеристик микрокапилляров для проведения химических реакций были получены данные о влиянии формы микроканалов на основные параметры, такие как перепад давления, эффективность перемешивания и транспортные свойства.

Геометрия микроканалов значительно влияет на перепад давления и эффективность

### post@vestnik-vsuet.ru

смешивания. Микроканал типа "фрактал" показал наибольший перепад давления при всех значениях числа Рейнольдса, что связано с его сложной траекторией. С другой стороны, форма «лобуляр» показала минимальные гидравлические потери, что делает её предпочтительной для снижения энергозатрат в микросистемах. Анализ числа Пекле показал, что геометрия «лобуляр» обеспечивает наилучшее перемешивание за счет эффективного конвективного переноса, особенно при высоких значениях числа Пекле. Это подтверждает ее преимущество в задачах, где важен интенсивный массоперенос. При увеличении числа Рейнольдса, наблюдалось улучшение смешивания во всех геометриях. Однако микроканал «лобуляр» показали наиболее резкое снижение концентрации изофорона на выходе, что свидетельствует о лучшем перемешивании даже при относительно небольших затратах энергии. Перепады давления в микроканалах должны оставаться в пределах, позволяющих поддерживать оптимальный режим течения без чрезмерного увеличения энергетических затрат. Геометрия «лобуляр» в этом аспекте снова показала наилучшие результаты, обеспечивая минимальные потери давления при сохранении высокой эффективности перемешивания.

Таким образом, можно заключить, что геометрия микроканалов играет ключевую роль в оптимизации рабочих параметров микрофлюидных систем. Форма «лобуляр» представляется наилучшей в условиях, где критичны минимизация гидравлических потерь и максимальная эффективность перемешивания.

### Литература

1 Yan L., Wang S., Cheng Y. Numerical Simulation of Mixing Process in a Splitting-and-Recombination Microreactor // Frontiers in Chemical Engineering, 2022. V. 3. P. 1–12. doi: 10.3389/fceng.2021.803861

2 García-López I., Águeda V.I., Garrido-Escudero A. Hydrodynamic behavior of a novel 3D-printed nature-inspired microreactor with a high length-to-surface ratio // Chemical Engineering Journal Advances. 2023. V. 13. P. 1-9. doi: 10.1016/j.ceja.2022.100438

3 Bojang A.A., Wu H.S. Design, fundamental principles of fabrication and applications of microreactors // Processes. 2020. V. 8. No. 8. P. 891-922. doi: 10.3390/pr8080891

4 Ruther T., Muller M.-A., Bonrath W., Eisenacher M. The Production of Isophorone // Encyclopedia. 2023. № 3. P. 224-244. doi: 10.3390/encyclopedia3010015

5 Houssaini J. et al. Study of the Catalytic Activity of the Compounds Hydrotalcite Type Treated by Microwave in the Self-Condensation of Acetone // International Journal of Analytical Chemistry. 2021. V. 2021. №. 1. P. 15–21. doi: 10.1155/2021/1551586

6 Veshchitsky G.A. et al. Self-Condensation of Acetone of Strontium Stannate under Supercritical Conditions // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2021. V. 15. No. 8. P. 1299–1302. doi: 10.1134/S1990793121080133

7 Liu Y., Luo W.Y. YMgAl-LDO Synthesis and its Catalytic Performance for Preparation of Isophorone by Condensation of Acetone // Current Micro-Nano Science and Technology. 2015. №. 1118. P. 265–269. doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.1118.265

8 Пат. № 2807773, RU, F15D 1/00. Модульный проточный микрофлюидный реактор для проведения химических реакций при высоких давлении и температуре/ Яшунин Д.В., Кук Х.Г., Большаков И.А., Досов К.А., Шишанов М.В., Колобов В.В. № 2023106740; Заявл. 22.03.2023; Опубл. 21.11.2023, Бюл. № 33.

9 Ruther T. et al. The Production of Isophorone // Encyclopedia. 2023. V. 3. №. 1. P. 224-244. doi: 10.3390/encyclopedia3010015

10 Yao C. et al. Two-phase flow and mass transfer in microchannels: A review from local mechanism to global models // Chemical Engineering Science. 2021. V. 229. P. 29–47. doi: 10.1016/j.ces.2020.116017 11 Wang X., Hu Sh., Yang X., Zheng Sh. Thermal stability and kinetic analysis of isophorone diisocyanato //

Thermochimica Acta. 2023. V. 727. P. 179–574. doi: 10.1016/j.tca.2023.179574

### Shishanov M.V. et al. Proceedings of VSUET, 2024, vol. 86, no. 3, pp. 274-281

12 García A., Marín P., Ordóñez S. Production of renewable mesitylene as jet-fuel additive: Reaction kinetics of acetone self-condensation over basic (TiO2) and acid (Al-MCM-41) catalysts // Fuel Processing Technology. 2024. V. 253. P. 108–110. doi: 10.1016/j.fuproc.2023.108007

13 Reynolds J.P., Thompson T.N., Pritchard C.Q., Schulz M.D. et al. Chemorheological Kinetic Modeling of Uncatalyzed Hydroxyl-Terminated Polybutadiene and Isophorone Diisocyanate // Macromol. Mater. Eng. 2024. V. 309. P. 23–34. doi: 10.1002/mame.202300423

14 Herran R., Molinari F., Cimas A., Karp F., Amalvy J. Synthesis and characterization of bio-based poly(urethaneurea) nanocomposite coatings employing cellulose nanocrystals incorporated by two different routes // Polymer Composites. 2024. V. 45. P. 11–29. doi: 10.1002/pc.28602

15 Tkachuk A.I., Zagora A.G., Terekhov I.V. et al. Isophorone Diamine – A Curing Agent for Epoxy Resins: Production, Application, Prospects. A Review. // Polym. Sci. Ser. D. 2022. V. 15. P. 171–176. doi: 10.1134/S1995421222020289

16 Ahmed M.I. Elkhaiary, Bartosz Rozmysłowicz, Jher Hau Yeap, Michael H. Studer et al. Kinetic Network Modeling of the Catalytic Upgrading of Biomass's Acetate Fraction to Aromatics // Energy Fuels. 2023. V. 37. №. 20. P. 16172–16180

17 Chen L., Zheng K., Wang Y., Duan X. et al. Study of UV-cured tung oil-based polyalcohol resin with isophorone diisocyanate as crosslinker // European Polymer Journal. 2024. V. 218. P. 113–118. doi: 10.1016/j.eurpolymj.2024.113348

18 Arnould P., Simon F., Fouquay S., Pardal F. et al. Harnessing Catalysis Selectivity and Isophorone Diisocyanate Asymmetry for Tailored Polyurethane Prepolymers and Networks // Macromolecules. 2022. V. 55. №. 8. P. 3344–3352. doi: 10.1021/acs.macromol.1c02491

19 Etminan A., Muzychka Y.S., Pope K. A review on the hydrodynamics of Taylor flow in microchannels: Experimental and computational studies // Processes. 2021. V. 9. № 5. P. 870–879. doi: 10.3390/pr9050870

20 Kose H.A., Yildizeli A., Cadirci S. Parametric study and optimization of microchannel heat sinks with various shapes // Applied Thermal Engineering. 2022. V. 211. P. 118–136. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2022.118368

### References

1 Yan L., Wang S., Cheng Y. Numerical Simulation of Mixing Process in a Splitting-and-Recombination Microreactor. Frontiers in Chemical Engineering. 2022. vol. 3. pp. 1–12. doi: 10.3389/fceng.2021.803861

2 García-López I., Águeda V.I., Garrido-Escudero A. Hydrodynamic behavior of a novel 3D-printed nature-inspired microreactor with a high length-to-surface ratio. Chemical Engineering Journal Advances. 2023. vol. 13. pp. 1–9. doi: 10.1016/j.ceja.2022.100438

3 Bojang A.A., Wu H.S. Design, fundamental principles of fabrication and applications of microreactors. Processes. 2020. vol. 8. no. 8. pp. 891–922. doi: 10.3390/pr8080891

4 Ruther T., Muller M.-A., Bonrath W., Eisenacher M. The Production of Isophorone. Encyclopedia. 2023. no. 3. pp. 224–244. doi: 10.3390/encyclopedia3010015

5 Houssaini J. et al. Study of the Catalytic Activity of the Compounds Hydrotalcite Type Treated by Microwave in the Self-Condensation of Acetone. International Journal of Analytical Chemistry. 2021. vol. 2021. no. 1. pp. 15–21. doi: 10.1155/2021/1551586

6 Veshchitsky G.A. et al. Self-Condensation of Acetone of Strontium Stannate under Supercritical Conditions. Russian Journal of Physical Chemistry B. 2021. vol. 15. no. 8. pp. 1299–1302. doi: 10.1134/S1990793121080133

7 Liu Y., Luo W.Y. YMgAl-LDO Synthesis and its Catalytic Performance for Preparation of Isophorone by Condensation of Acetone. Current Micro-Nano Science and Technology. 2015. no. 1118. pp. 265–269. doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.1118.265

8 Yashunin D.V., Cook H.G., Bolshakov I.A., Dosov K.A. et al. Modular flow-through microfluidic reactor for conducting chemical reactions at high pressure and temperature. Patent RF, no. 2807773, 2023.

9 Ruther T. et al. The Production of Isophorone. Encyclopedia. 2023. vol. 3. no. 1. pp. 224–244. doi: 10.3390/encyclopedia3010015 10 Yao C. et al. Two-phase flow and mass transfer in microchannels: A review from local mechanism to global models. Chemical Engineering Science. 2021. vol. 229. pp. 29–47. doi: 10.1016/j.ces.2020.116017

11 Xiao Wang, Shuang Hu, Xia Yang, Shiqing Zheng. Thermal stability and kinetic analysis of isophorone diisocyanato. Thermochimica Acta. 2023. vol. 727. pp. 179–574. doi: 10.1016/j.tca.2023.179574.

12 García A., Marín P., Ordóñez S. Production of renewable mesitylene as jet-fuel additive: Reaction kinetics of acetone self-condensation over basic (TiO2) and acid (Al-MCM-41) catalysts. Fuel Processing Technology. 2024. vol. 253. pp. 108–110. doi: 10.1016/j.fuproc.2023.108007

13 Reynolds J.P., Thompson T.N., Pritchard C.Q., Schulz M.D. et al. Chemorheological Kinetic Modeling of Uncatalyzed Hydroxyl-Terminated Polybutadiene and Isophorone Diisocyanate. Macromol. Mater. Eng. 2024. vol. 309. pp. 23–34. doi: 10.1002/mame.202300423

14 Herran R., Molinari F., Cimas A., Karp F., Amalvy J. Synthesis and characterization of bio-based poly(urethaneurea) nanocomposite coatings employing cellulose nanocrystals incorporated by two different routes. Polymer Composites. 2024. vol. 45. pp. 11–29. doi: 10.1002/pc.28602

15 Tkachuk, A.I., Zagora, A.G., Terekhov, I.V. et al. Isophorone Diamine – A Curing Agent for Epoxy Resins: Production, Application, Prospects. A Review. Polym. Sci. Ser. D. 2022. vol. 15. pp. 171–176. doi: 10.1134/S1995421222020289

16 Ahmed M.I. Elkhaiary, Bartosz Rozmysłowicz, Jher Hau Yeap, Michael H. Studer, et al. Kinetic Network Modeling of the Catalytic Upgrading of Biomass's Acetate Fraction to Aromatics. Energy Fuels. 2023. vol. 37. no. 20. pp. 16172–16180. 17 Chen L., Zheng K., Wang Y., Duan X. et al. Study of UV-cured tung oil-based polyalcohol resin with isophorone

diisocyanate as crosslinker. European Polymer Journal. 2024. vol. 218. pp. 113–118. doi: 10.1016/j.eurpolymj.2024.113348

18 Arnould P., Simon F., Fouquay S., Pardal F.et al. Harnessing Catalysis Selectivity and Isophorone Diisocyanate Asymmetry for Tailored Polyurethane Prepolymers and Networks. Macromolecules. 2022. vol. 55. no. 8. pp. 3344–3352. doi: 10.1021/acs.macromol.1c02491

19 Etminan A., Muzychka Y.S., Pope K. A review on the hydrodynamics of Taylor flow in microchannels: Experimental and computational studies. Processes. 2021. vol. 9. no. 5. pp. 870–879. doi: 10.3390/pr9050870

20 Kose H.A., Yildizeli A., Cadirci S. Parametric study and optimization of microchannel heat sinks with various shapes. Applied Thermal Engineering. 2022. vol. 211. pp. 118–136. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2022.118368

### Сведения об авторах

Михаил В. Шишанов к.т.н., доцент, кафедра химической технологии природных энергоносителей и углеродных материалов, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Миусская площадь, д.9 стр.1, г. Москва, 125047, Россия, shishanov.m.v@muctr.ru

### Dhttps://orcid.org/0000-0003-2861-5878

Христофор Герман Кук аспирант, кафедра химической технологии природных энергоносителей и углеродных материалов, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Миусская площадь, д.9 стр.1, г. Москва, 125047, Россия, kuk.khristofor@inbox.ru

<sup>D</sup>https://orcid.org/0009-0005-7115-6760

Элиза Л. Геворкян магистрант, кафедра передовой инженерной школы химического инжиниринга и машиностроения, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Миусская площадь, д.9 стр.1, г. Москва, 125047, Россия, eliza.gevorkyan15@mail.ru

<sup>b</sup>https://orcid.org/0009-0005-4510-5046

Александр Ю. Ботнев магистрант , Российский химикотехнологический университет имени Д.И. Менделеева, Миусская площадь, д.9 стр.1, г. Москва, 125047, Россия, botnev2001@gmail.com.

Dhttps://orcid.org/0009-0006-2055-4205

### Вклал авторов

Все авторы в равной степени принимали участие в написании рукописи и несут ответственность за плагиат

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### Information about authors

Mikhail V. Shishanov Cand. Sci. (Engin.), associate professor, chemical technology of natural energy carriers and carbon materials department, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya Square, 9 str.1, Moscow, 125047, Russia, shishanov.m.v@muctr.ru

Dhttps://orcid.org/0000-0003-2861-5878

Christopher German Cook graduate student, chemical technology of natural energy carriers and carbon materials department, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya Square, 9 str.1, Moscow, 125047, Russia, kuk.khristofor@inbox.ru

Dhttps://orcid.org/0009-0005-7115-6760

Eliza L. Gevorkyan master student, advanced engineering school of chemical engineering and mechanical engineering department, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya Square, 9 str.1, Moscow, 125047, Russia, eliza.gevorkyan15@mail.ru

### Dhttps://orcid.org/0009-0005-4510-5046

Alexander Yu. Botnev master student, advanced engineering school of chemical engineering and mechanical engineering department, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya Square, 9 str.1, Moscow, 125047, Russia, botnev2001@gmail.com.

<sup>D</sup>https://orcid.org/0009-0006-2055-4205

### Contribution

All authors are equally involved in the writing of the manuscript and are responsible for plagiarism

**Conflict of interest** 

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 18/07/2024	После редакции 05/08/2024	Принята в печать 02/09/2024
Received 18/07/2024	Accepted in revised 05/08/2024	Accepted 02/09/2024