

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СУЛЬФИРОВАНИЯ СОПОЛИМЕРА СТИРОЛА С ДИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ¹

© 2021 г. T. R. Theodoro^a, J. O. V. Moura^a, J. R. Dias^a,
J. A. Carpegiani^a, W. M. Godoy^a, L. G. Aguiar^{a, *}

^aDepartment of Chemical Engineering, Engineering School of Lorena, University of São Paulo, 12602-810, Lorena, SP, Brazil

*e-mail: leandroaguiar@usp.br

Поступила в редакцию 06.06.2020 г.

После доработки 31.08.2020 г.

Принята к публикации 07.09.2020 г.

Сульфированные смолы очень важны в различных промышленных процессах, таких как получение простых и сложных эфиров, производство биодизеля и водоподготовка. Математические модели играют важную роль в процессах контроля и оптимизации, поскольку они позволяют предсказать влияние на процесс различных переменных и оптимизировать параметры. В настоящее время математические модели процессов сульфирования смол в литературе встречаются довольно редко. В данной работе математические методы использованы для построения модели, которая способна описать процесс сульфирования частиц сополимера стирола с диметилметакрилатом этиленгликоля. Коэффициенты диффузии и скорости оценены путем сравнения модельных и экспериментальных данных и представлены когерентные значения. Для реакции сульфирования получена средняя энергия активации 170 кДж/моль. Полученные результаты показывают, что в условиях, использованных в настоящей работе, процесс контролируется диффузией и может быть представлен моделью сужающегося ядра в предположении первого порядка для реакции с серной кислотой.

Ключевые слова: моделирование, стирол, диметилметакрилат этиленгликоля, сульфирование, смола

DOI: 10.31857/S045388112101010X

Mathematical Modeling of Poly[Styrene-Co-(Ethylene Glycol Dimethacrylate)] Sulfonation

T. R. Theodoro¹, J. O. V. Moura¹, J. R. Dias¹, J. A. Carpegiani¹, W. M. Godoy¹, and L. G. Aguiar^{1, *}

¹Department of Chemical Engineering, Engineering School of Lorena, University of São Paulo, 12602-810, Lorena, SP, Brazil

*e-mail: leandroaguiar@usp.br

The production of sulfonated resins is of great interest to be applied in different industrial processes such as esterification, etherification, biodiesel production and water treatment. Mathematical models play an important role in process control and optimization, through prediction of process variables and adjustment of parameters. Currently mathematical models for resin sulfonation processes are still scarce in literature. In the present study, mathematical tools were used to build a model that is able to describe the sulfonation process of poly[styrene-co-(ethylene glycol dimethacrylate)] particles. The diffusion and rate coefficients were estimated through comparison between the model and the experimental data and presented coherent values. An average activation energy of 170 kJ/mol was obtained for the sulfonation reaction. The results revealed that, for the conditions studied herein, the process is diffusion-controlled and can be represented by the shrinking core model, considering irreversible pseudo-first order reaction for sulfuric acid.

Keywords: modeling, styrene, ethylene glycol dimethacrylate, sulfonation, resin

¹ Полная версия статьи на английском языке опубликована в “Kinetics and Catalysis”, 2021, № 1.