

УДК 66.095.132:66.011

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ ЕСТЕРИФІКАЦІЇ**Мельник С.Р., Кравченко І.В.****THE MATHEMATICAL MODEL OF ESTERIFICATION PROCESS****Melnyk S.R., Kravchenko I.V.**

За результатами кінетичних досліджень реакції естерифікації оцтової і адипінової кислот бутан-1-олом і 2-метилпропан-1-олом побудована математична модель процесу в нестационарних умовах. Визначено необхідні вихідні дані та алгоритм розрахунку тривалості процесу для досягнення заданого ступеня перетворення визначального реагента (карбонової кислоти) і концентрацій компонентів реакційної системи у будь-який момент реакції. Показано, що експериментальні результати естерифікації оцтової і адипінової кислот бутан-1-олом і 2-метилпропан-1-олом підтверджують адекватність запропонованої математичної моделі процесу, яку можна рекомендувати для технічних розрахунків процесів одержання моно- і дієстерів карбонових кислот і встановлення оптимальних умов для кожного конкретного синтезу.

Ключові слова: естерифікація, напівперіодичний процес, математична модель, адипінова кислота, оцтова кислота, бутан-1-ол, 2-метилпропан-1-ол.

1. Вступ. Математичне моделювання технологічного процесу за результатами лабораторних досліджень є невід'ємною частиною проектування нового або вдосконалення діючого хімічного виробництва. Одержані кінетичні характеристики реакцій дозволяють виконати технологічний розрахунок реактора та описати стан системи у будь-який момент часу: визначити концентрації реагентів і продуктів чи тривалість процесу, необхідну для досягнення заданого ступеня перетворення визначального реагента [1–3].

2. Аналіз останніх досліджень і публікацій. Для математичного опису процесу естерифікації за участю нелетких компонентів достатньо визначених констант швидкості та рівноваги реакції [4]. Процес одержання моно- та дієстерів карбонових кислот і нижчих спиртів відбувається в нестационарних умовах з відгонкою утвореної в реакції води, спирту та інших летких компонентів реакційної суміші, тому для одержання його адекватної математичної моделі потрібні не лише кінетичні характеристики реакцій, але й термодинамічні дані реагентів і продуктів, які необхідні для складання теплового

балансу реактора [1, 2]. Наприклад, у статті [5] наведено математичну модель процесу естерифікації молочної кислоти бутан-1-олом у реакторі напівперіодичної дії в присутності катіонообмінної смоли LEWATIT-S у H-формі. Для опису процесу використана багатопараметрична модель, яка вимагає відомостей про фізико-хімічні властивості кожного компонента реакційної системи, залежність його фізичних характеристик від температури тощо. На жаль, така інформація не завжди є доступною з літературних джерел.

Тому метою роботи було розроблення спрощеного алгоритму математичного опису нестационарного процесу естерифікації оцтової (ОК) і адипінової (АК) кислот бутан-1-олом (БС) та 2-метилпропан-1-олом (іБС) у присутності каталізаторів *n*-толуолсульфо кислоти і перфтор(4-метил-3,6-діоксаоктан)сульфонату кобальту $C(Co(pfos)_2)$.

3. Матеріали і результати дослідження. Для побудови математичної моделі процесу естерифікації використані визначені у попередніх кінетичних дослідженнях значення передекспоненти константи швидкості та енергії активації вищевказаних реакцій [6, 7].

Для розрахунку тривалості реакції естерифікації та концентрацій реагентів і продуктів реакції можна запропонувати наведений нижче алгоритм.

✚ Вихідні дані:

- початкові концентрації реагентів $C_{i,0}$, моль/дм³;
- концентрація каталізатора $C_{кат}$, моль/дм³;
- ступінь перетворення карбонової кислоти $X_K=0,995$, що відповідає високому ступеню перетворення моноестеру АК;
- значення передекспоненти константи швидкості $k_{0,i}$ і енергії активації реакції $E_{A,i}$.

✚ Оскільки процес відбувається в неізотермічних умовах, то приймаємо, що реакція з помітною швидкістю відбувається в інтервалі температури у межах від початкової $T_0=373K$

до кінцевої $T_K=T_{кин}$ температури, яка відповідає температурі кипіння естеру ОК (що є найвищою в реакційній системі), або до температури теплоносія $T_K=T_T$ під час одержання дієстерів АК.

- ✚ За передекспонентою k_0 і енергією активації E_A реакції моно- чи дикарбонової кислоти, визначеними у кінетичних дослідженнях [6, 7], розраховуємо константу швидкості реакції при температурі T_C

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT_C}\right), \quad (1)$$

за якою визначаємо орієнтовну тривалість реакції для досягнення заданої конверсії ОК X_{OK} чи АК X_{AK} .

- ✚ Середнє значення температури реакції розраховуємо за формулою

$$T_C = \frac{T_0 - T_K}{2}. \quad (2)$$

Швидкість реакції витрати моно- і дикарбонової кислоти (К) у нестационарних умовах за відсутності води, яка відганяється з реакційної системи, описує рівняння

$$\frac{dC_K}{d\tau} = -kC_{kat}C_KC_C, \quad (3)$$

де C_K і C_C – концентрації карбонової кислоти і спирту, відповідно, моль/дм³.

Оскільки

$$C_K = C_{K,0}(1 - X_K), \quad (4)$$

де $C_{K,0}$ – початкова концентрація карбонової кислоти, моль/дм³, то інтегруванням рівняння (3) з врахуванням виразу (4) одержуємо рівняння для розрахунку тривалості реакції естерифікації при T_C :

$$\tau_K = \frac{-\ln\left|\frac{1 - X_K}{\beta(\beta - X_K)}\right|}{kC_{kat}C_{K,0}}, \quad (5)$$

де $\beta = \frac{C_{C,0}}{C_{K,0}}$ – коефіцієнт надлишку спирту;

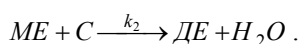
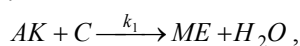
$C_{C,0}$ – початкова концентрація спирту, моль/дм³.

- ✚ З врахуванням заданого ступеня перетворення карбонової кислоти $X_K=0,995$ визначаємо тривалість реакції естерифікації τ_K за рівнянням (5).

- ✚ Приймаємо лінійний характер підвищення температури і визначаємо коефіцієнт росту температури з рівняння

$$k_t = \frac{T_K - T_0}{\tau_K}. \quad (6)$$

- ✚ Схему перетворень, які відбуваються під час естерифікації АК спиртами, описують рівняння:



- ✚ Приймаємо, що утворена вода відразу ж залишає реактор. Це дозволяє вважати реакцію нерівноважною.

- ✚ Складаємо систему рівнянь, які враховують:

- зміну концентрації карбонової кислоти (3);
- зв'язок ступеня перетворення карбонової кислоти з її поточною концентрацією:

$$X_K = \frac{C_{K,0} - C_K}{C_{K,0}}, \quad (7)$$

- зміну концентрації моноестеру АК:

$$\frac{dC_{ME}}{d\tau} = k_1C_{kat}C_KC_C - k_2C_{kat}C_{ME}C_C; \quad (8)$$

- зміну концентрації дієстеру АК:

$$\frac{dC_{DE}}{d\tau} = k_2C_{kat}C_{ME}C_C; \quad (9)$$

- зміну температури реакції естерифікації:

$$T = T_0 + k_t\tau, \quad (10)$$

де τ – поточний час реакції, с;

- рівняння залежності константи швидкості i -ої реакції від температури:

$$k_i = k_{0,i} \exp\left(-\frac{E_{A,i}}{RT}\right). \quad (11)$$

- ✚ Систему рівнянь (3, 7–11) розв'язуємо відносно значень концентрацій реагентів і продуктів реакції в межах температурного інтервалу (T_0 – T_K). При розрахунку процесу естерифікації ОК рівняння (8) не враховуємо, а для розрахунку зміни концентрації естеру ОК використовуємо рівняння (9).

- ✚ Процес естерифікації в реакторі напівперіодичної дії також супроводжується зміною об'єму реакційної маси за рахунок вилучення частини спирту і води, а у реакції одержання алкілацетатів також частини ОК та її естеру, у водовідділювач:

- цю зміну враховуємо під час інтегрування системи рівнянь коректуванням концентрацій карбонової кислоти, моно- і дієстеру множенням їх значення на коефіцієнт зміни об'єму (на першій хвилині реакції):

$$k_V = \frac{V_0}{V_0 - V_d}, \quad (12)$$

де V_0 і V_d – об'єм реакційної суміші до реакції та об'єм дистилляту, винесений у водовідділювач, м³;

- зміну концентрації спирту під час естерифікації АК за рахунок його винесення з реакційної системи не враховуємо, оскільки він надалі повертається з водовідділювача у реактор внаслідок витіснення водою;

- зміну концентрації ОК і спирту C_4 – C_5 враховуємо до інтегрування системи рівнянь, приймаючи, що у водовідділювач відганяється 20–25% ОК і 75–80% спирту.

За наведеним вище алгоритмом виконано розрахунок кінетичних кривих і зміни ступеня перетворення АК для процесу її естерифікації

бутан-1-олом у присутності *n*-толуолсульфокислоти (*n*ТСК) для співвідношення БС:АК – (2,2–2,8):1 (мол.) і концентрації каталізатора $(1,0\text{--}2,0)\cdot 10^{-2}$ моль/дм³. Середню температуру реакції прийнято 386К.

З рис. 1 а, в очевидно, що зміна мольного співвідношення БС:АК від 2,2:1 до 2,8:1 меншою мірою впливає на тривалість реакції естерифікації, ніж підвищення концентрації каталізатора від $1,0\cdot 10^{-2}$ до $2,0\cdot 10^{-2}$ моль/дм³. Результати математичного моделювання процесу естерифікації АК бутан-1-олом також вказують, що мінімальне співвідношення для даних умов процесу не повинно бути меншим за БС:АК – 2,4:1 (мол.).

Рівняння (1) і (5) дозволяють розрахувати тривалість реакції естерифікації для заданих вихідних даних процесу і визначити оптимальні співвідношення реагентів і концентрацію каталізатора.

Як видно з рис. 2–4, експериментальні результати естерифікації АК і ОК бутан-1-олом і 2-метилпропан-1-олом підтверджують адекватність запропонованої математичної моделі процесу.

Для детальнішого опису процесу одержання моно- та діестерів карбонових кислот у математичній моделі необхідно враховувати ряд додаткових параметрів, зокрема для визначення поточної концентрації спирту і води у процесі естерифікації АК з рівнянь:

$$\frac{dn_C}{d\tau} = -W_{n,C}C_C + W_{p,C}C_C - Vr_C = -W_{n,C}C_C + W_{p,C}C_C - V(k_1C_{kat}C_KC_C + k_2C_{kat}C_{ME}C_C), \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{H_2O}}{d\tau} &= -W'_{n,H_2O}C_{H_2O} + W'_{p,H_2O}C_{H_2O} - r_{H_2O} = \\ &= -W'_{n,H_2O}C_{H_2O} + W'_{p,H_2O}C_{H_2O} - \\ &- V(k_1C_{kat}C_KC_C + k_2C_{kat}C_{ME}C_C), \end{aligned} \quad (14)$$

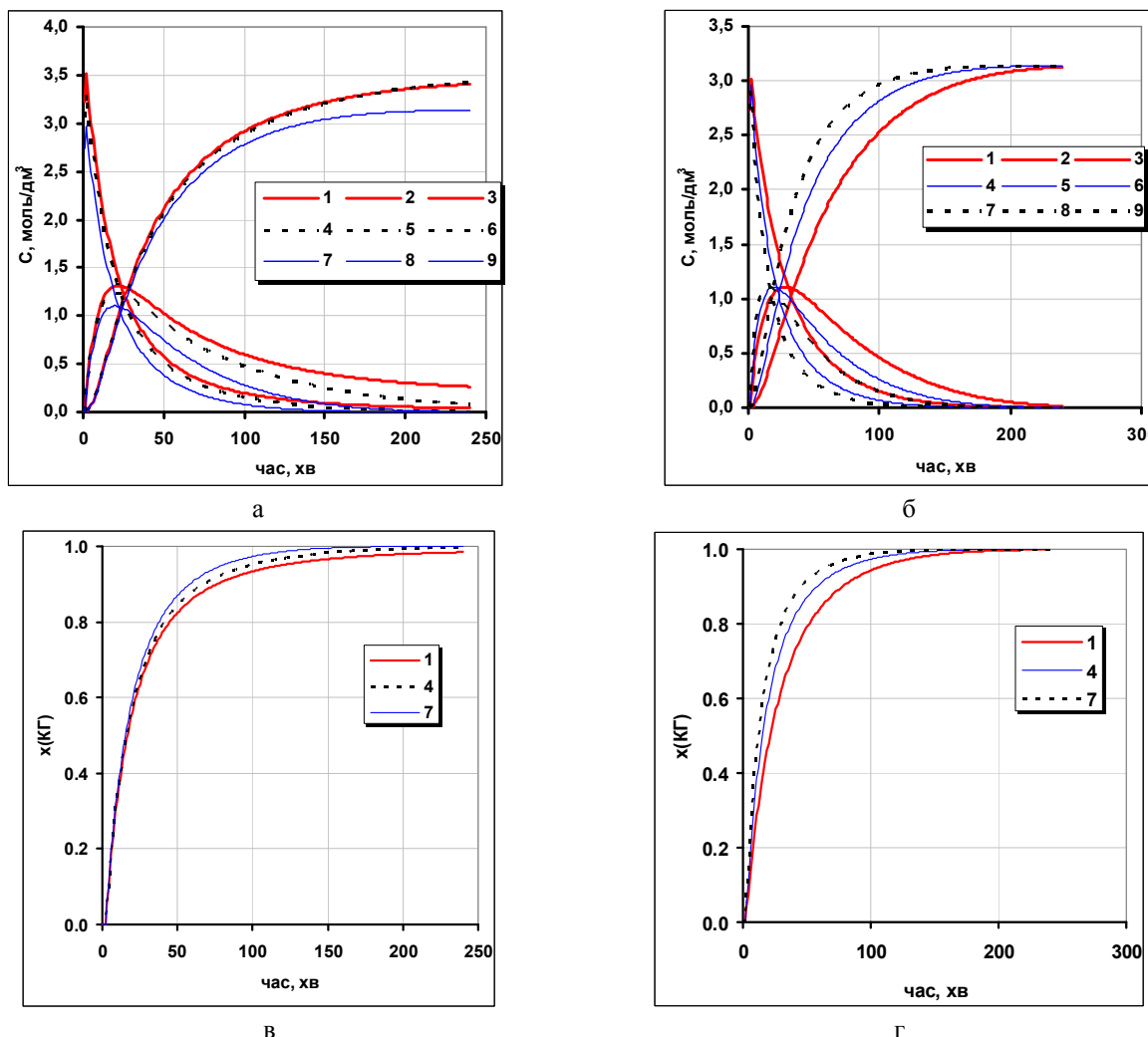


Рис. 1. Результати математичного моделювання процесу естерифікації АК бутан-1-олом – кінетичні криві (а, б) і зміна ступеня перетворення (в, г) карбоксильних груп (КГ):
 а, в – вплив БС : АК (1, 2, 3 – 2,2:1; 4, 5, 6 – 2,4:1; 7, 8, 9 – 2,8:1); б, г – вплив $C(n\text{ТСК})\cdot 10^{-2}$, моль/дм³ (1, 2, 3 – 1,0; 4, 5, 6 – 1,5; 7, 8, 9 – 2,0) при БС : АК – 2,8:1 (мол.);
 рисунки (а) і (б): 1, 4, 7 – АК; 2, 5, 8 – монобутиладипінат; 3, 6, 9 – дибутіладипінат

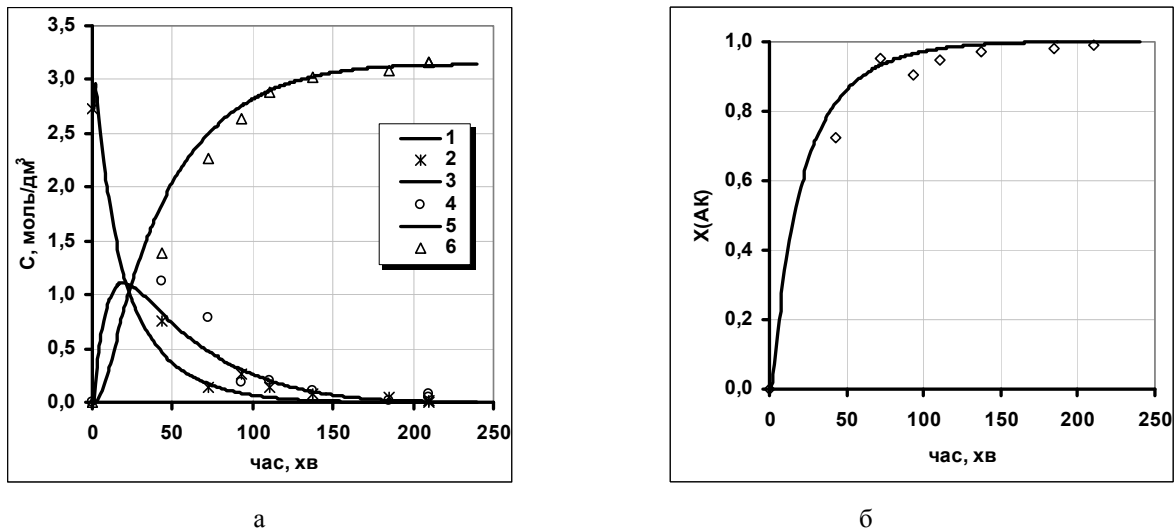


Рис. 2. Кінетичні криві процесу естерифікації АК бутан-1-олом (а) і залежність зміни конверсії АК від часу (б) у реакторі напівперіодичної дії:

експериментальні точки – 2, 4, 6; розрахункові криві – 1, 3, 5; 1, 2 – АК; 3, 4 – монобутиладіпінат; 5, 6 – дибутиладіпінат. БС:АК – 2,8:1 (мол.), $C(n\text{TCK}) = 1,5 \cdot 10^{-2}$ моль/дм³

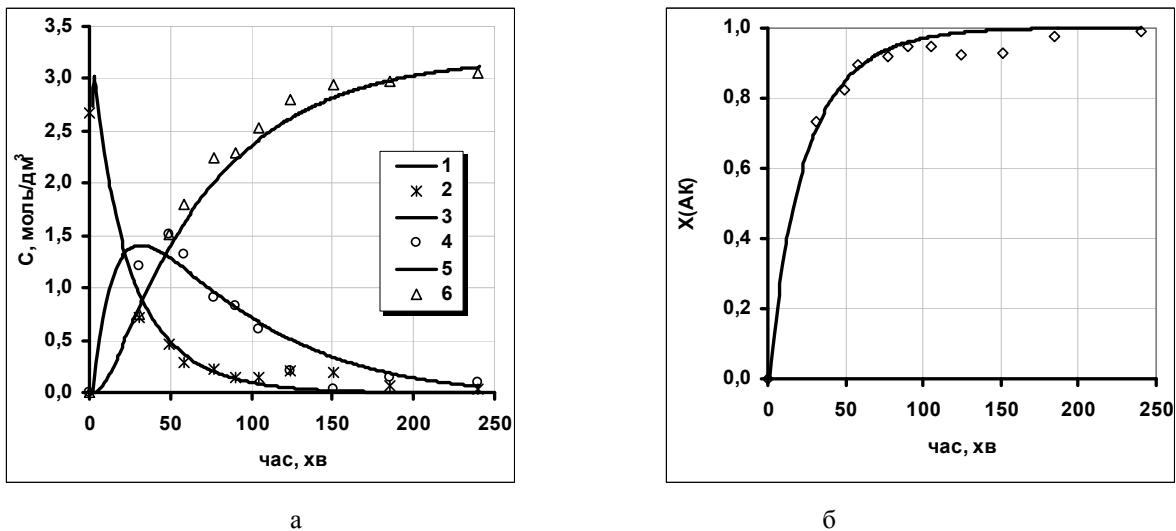


Рис. 3. Кінетичні криві процесу естерифікації АК 2-метилпропан-1-олом (а) і залежність зміни конверсії АК від часу (б) у реакторі напівперіодичної дії:

експериментальні точки – 2, 4, 6; розрахункові криві – 1, 3, 5; 1, 2 – АК; 3, 4 – моноізобутиладіпінат; 5, 6 – діізобутиладіпінат. іБС:АК – 2,8:1 (мол.), $C(n\text{TCK}) = 1,5 \cdot 10^{-2}$ моль/дм³

необхідно мати залежності від часу зміни об'єму реакційної суміші у реакторі:

$$V = V_0 - W\tau, \quad (15)$$

та об'ємної витрати потоків пари води і спирту $W_{n,i}$, що виходять з реактора у водовідділювач, і об'ємної витрати потоків рідини води і спирту $W_{p,i}$, що повертаються з водовідділювача, від часу.

Значення останніх визначаються легкістю кожного з компонентів потоку пари і можуть бути визначені згідно рекомендацій статті [5]. Зрозуміло, що за відсутності таких характеристик хоча б для одного-двох компонентів реакційної суміші досягнення адекватності моделі ускладнюється.

4. Експериментальна частина У досліді використовували АК (вищий сорт), ОК (х.ч.), пропан-2-ол (х.ч.), бутан-1-ол (х.ч.), 2-метилпропан-1-ол (ч.д.а.); для кінетичних експериментів спирти додатково очищали дистиляцією. Чистоту рідких реагентів контролювали хроматографічно. Для побудови математичної моделі процесу використано результати досліджень естерифікації карбонових кислот спиртами у присутності каталізаторів *n*-ТСК (марки ч.) і перфтор(4-метил-3,6-діоксаоктан)сульфонату кобальту (НДІ «Синтез» м. Борислав).

Кінетику естерифікації ОК і АК спиртами C_2 – C_5 досліджували у скляному термостатованому реакторі, оснащеному зворотним холодильником і мішалкою (500 об./хв) з гідрозатвором. Температуру реакційної суміші визначали термометром з ціною

поділки $\pm 0,1\text{K}$, а теплоносія – $\pm 0,2\text{K}$. За початок реакції приймали момент внесення каталізатора у нагріту до температури реакції суміш, завантажену у мольному співвідношенні спирт : АК – (16–20):1 та ОК:спирт і спирт:ОК – (5–6):1. Концентрацію каталізатора підбирали індивідуально для конкретної системи реагентів. Дослідження вели при температурі 333–368K, нижчій за температуру кипіння азеотропної суміші води і спирту чи води і ОК або її естеру [8, 9]. Через визначені проміжки часу відбирали проби реакційної суміші для визначення кислотного числа продуктів естерифікації АК і хроматографічного аналізу утвореного діестеру.

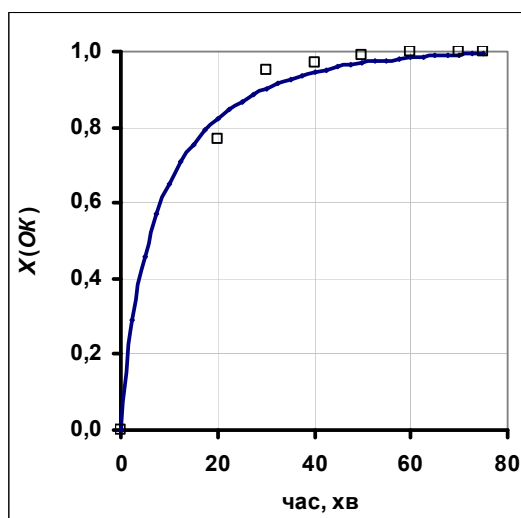


Рис. 4. Експериментальні точки та розрахункова крива залежності зміни конверсії ОК з часом за умови її естерифікації 2-метилпропан-1-олом.
 $C(\text{Co}(\text{pfos})_2) = 5,2 \cdot 10^{-3}$ моль/дм³; $C(\text{OK})_0 = 5,44$ моль/дм³,
 $C(\text{iAC})_0 = 6,37$ моль/дм³

Під час дослідження кінетики естерифікації ОК її концентрацію в реакційній суміші визначали титруванням наважки проби розчином луку.

За розрахованими значеннями передекспоненти і енергії активації реакції естерифікації АК і ОК аліфатичними спиртами [6, 7] можна з достатньою точністю розрахувати константи швидкості при дещо вищій температурі технологічного процесу, максимальне значення якої не перевищує 420K. Такі розрахунки допустимі з міркувань, що енергія активації реакції мало змінюється з відхиленням температури на 30–50K від тієї, при якій виконували кінетичні дослідження.

Дослідження естерифікації у нестационарних умовах, які відповідають напівперіодичному промислового процесу, вели у реакційній установці, що складалася з термостійкої круглодонної колби, зворотного холодильника, механічної мішалки з гідрозатвором, пастки Діна-Старка і термометра, яким визначали температуру реакційного середовища. Естерифікацію здійснювали за умов кипіння середовища і дистиляції утвореної

реакційної води з реактора у пастку Діна-Старка до завершення зміни об'єму водного шару в пастці. Температура реакції визначалася умовами кипіння, які залежали від складу реакційної суміші.

Після закипання реакційної суміші відбирали пробу для визначення кислотного числа і хроматографічного аналізу. Надалі проби відбирали через певні проміжки часу до припинення зміни кислотного числа реакційної суміші.

Кислотне число реакційної суміші визначали згідно методики [10]. Аналіз продуктів естерифікації АК виконано газорідним хроматографом "Цвет-100" з детектором по теплопровідності. Для розділення компонентів реакційної суміші використано колонку завдовжки 1 м, діаметром 3 мм, заповнену нерухою фазою 5% Silicone SE30 на Chromaton N-AW. Газ-носії – гелій, витрата якого становила – 3 дм³/год; сила струму на детекторі – 120 мА; об'єм аналізованої проби – 2 мкл. Температура випарника становила 523K, температура детектора – 503K. Температуру колонки змінювали в межах 373–448K, залежно від виду діестеру. Досліджувані проби при потребі розчиняли у пропан-2-олі.

5. Висновки. Розроблений алгоритм розрахунку тривалості реакції естерифікації та концентрацій основних компонентів реакційної суміші можна рекомендувати для технічних розрахунків процесів одержання моно- і діестерів карбонових кислот і встановлення оптимальних умов для кожного конкретного синтезу. Він дозволяє визначити концентрації реагентів і продуктів у будь-який момент часу реакції, прогнозувати тривалість реакції та встановити взаємозв'язок між ступенем перетворення ДКК і часом реакції для кожної індивідуальної реакційної системи.

Л і т е р а т у р а

1. Грязнов М. А. Проектирование и расчет аппаратов основного органического и нефтехимического синтеза / М. А. Грязнов, Н. Г. Дигуров, В. В. Кафаров и др. – М.: Химия, 1995. – 256 с.
2. Царева З.М. Теоретические основы химической технологии / З. М. Царева, Е. И. Орлова. – К.: Вища школа, 1986. – 271 с.
3. Піх З. Г. Теорія хімічних процесів органічного синтезу: Підручник. / З. Г. Піх. – Львів: Видавництво Національного університету «Львівська політехніка», 2002. – 393 с.
4. Sanchez N. Kinetic analysis and modeling of the esterification of oleic acid and oleyl alcohol using cobalt chloride as catalyst / N. Sanchez, A. Coteron, M. Martinez, J. Aracil // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 1992. – №31. – P. 1985–1988.
5. Счастливая С. В. Разработка гетерогенно-каталитического способа получения бутиллактата / С. В. Счастливая, Д. Н. Кондратьев, Р. А. Козловский, В. Ф. Швец // Химическая промышленность сегодня. – 2007. – №4. – С. 20–25.

6. Мельник С. Р. Кінетичні закономірності естерифікації адипінової та бурштинової кислот аліфатичними спиртами C_2-C_5 / С. Р. Мельник // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2014. – №1/6 (67). – С. 13–17.
7. Дзіняк М. Б. Кінетичні закономірності естерифікації оцтової кислоти спиртами C_4-C_5 у присутності солей перфтор(4-метил-3,6-діоксаоктан)сульфонатної кислоти / М. Б. Дзіняк, С. Р. Мельник, В. Л. Старчевський // Вісник Національного університету «Львівська політехніка»: Хімія, технологія речовин та їх застосування. – 2012 – №726. – С. 169–171.
8. Справочник химика. Под ред. Б. П. Никольского в VI томах, Т. I. – Л.: Химия, 1971. – 1072 с.
9. Огородников С. К. Азеотропные смеси. Справочник. Под ред. проф. В. Б. Когана. / С. К. Огородников, Т. М. Лестева, В. Б. Коган / Л.: Химия, 1971. – 848 с.
10. Одабашьян Г. В. Лабораторный практикум по химии и технологии основного органического и нефтехимического синтеза. Учеб. пособие для вузов / Г. В. Одабашьян, В. Ф. Швец – 2-е изд. перераб. и доп. – М.: Химия, 1992. – 240 с.

References

1. Gryaznov M. A. Proektirovanie i raschet apparatov osnovnogo organicheskogo i neftekhimicheskogo sinteza / M. A. Gryaznov, N. G. Digurov, V. V. Kafarov [i dr.] – М.: Khimiya, 1995. – 256 s.
2. Tsareva Z.M. Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tehnologii / Z. M. Tsareva, E. I. Orlova. – K.: Vischa shkola, 1986. – 271 s.
3. Pikh Z.G. Teoriya Khimichnyh Protseviv Organichnogo Syntezu: Pidrychnyk / Z. G. Pikh – Lviv: Vydavnyctvo Natsionalnogo Universytetu "Lvivska politehnika", 2002. – 393 s.
4. Schastlivaya S. V. Razrabotka geterogenno-kataliticheskogo sposoba polucheniya butillaktata / S. V. Schastlivaya, D. N. Kondrat'ev, R. A. Kozlovskiy, V. F. Shvets // Himicheskaya promyshlennost' segodnya. – 2007. – №4. – С. 20–25.
5. Sanchez N. Kinetic analysis and modeling of the esterification of oleic acid and oleyl alcohol using cobalt chloride as catalyst / N. Sanchez, A. Coteron, M. Martinez, J. Aracil // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 1992. – №31. – P. 1985–1988.
6. Melnyk S. R. Kinetychni zakonomirnosti esteryfikatsiyi adypinovoyi ta burshtynovoyi kyslot alifatychnymy spyrtamy C_2-C_5 / S. R. Melnyk // Vostochno-Evropeyskiy zhurnal peredovyh tehnologiy. – 2014. – №1/6 (67). – С. 13–17.
7. Dzinyak M. B. Kinetychni zakonomirnosti esteryfikatsiyi otstovoyi kysloty spyrtamy C_4-C_5 u prysutnosti soley perftor(4-metyl-3,6-dioksaoktan)sulfonatnoyi kysloty / M. B. Dzinyak S. R. Melnyk, V. L. Starchevskyy // Visnyk Natsionalnoho universytetu «Lvivska politehnika»: Khimiya, tekhnolohiya rehovyn ta yikh zastosuvannya. – 2012 – №726. – S. 169–171.
8. Spravochnik khimika. Pod red. B. P. Nikolskogo v VI tomah, T. I. – L.: Khimiya, 1971. – 1072 s.
9. Ogorodnikov S. K. Azeotropnyie smesi. Spravochnik. Pod red. prof. V. B. Kogana. / S. K. Ogorodnikov, T. M. Lesteva, V. B. Kogan / L.: Khimiya, 1971. – 848 s.

10. Odabashyan G. V. Laboratornyi praktikum po khimii i tehnologii osnovnogo organicheskogo i neftekhimicheskogo sinteza. Ucheb. posobie dlya vuzov / G. V. Odabashyan, V. F. Shvets – 2-e izd. pererab. i dop. – М.: Khimiya, 1992. – 240 s.

Мельник С. Р., Кравченко И. В. Математическая модель процесса этерификации

По результатам кинетических исследований реакции этерификации уксусной и адипиновой кислот бутан-1-олом и 2-метилпропан-1-олом построена математическая модель процесса в нестационарных условиях. Определены необходимые исходные данные и алгоритм расчета длительности процесса для достижения заданной степени превращения определяющего реагента (карбоновой кислоты) и концентраций компонентов реакционной системы в любой момент реакции. Показано, что экспериментальные результаты этерификации уксусной и адипиновой кислот бутан-1-олом и 2-метилпропан-1-олом подтверждают адекватность предложенной математической модели процесса, которую можно рекомендовать для технических расчетов процессов получения моно- и диэфиров карбоновых кислот и установления оптимальных условий для каждого конкретного синтеза.

Ключевые слова: этерификация, полупериодический процесс, математическая модель, адипиновая кислота, уксусная кислота, бутан-1-ол, 2-метилпропан-1-ол.

Melnyk S. R., Kravchenko I. V. The mathematical model of esterification process

Mathematical model of acetic and adipic acid esterification with butan-1-ol and 2-methylpropan-1-ol under unsteady conditions has been constructed based on the kinetic research results of the reactions. Necessary input data and the algorithm of calculation of the process duration required to achieve given conversion degree of the key reagent (carboxylic acid) and concentration of the reaction system components in any instant of the reaction have been determined. It is shown that the experimental data of acetic and adipic acid esterification with butan-1-ol and 2-methylpropan-1-ol confirm the adequacy of proposed mathematical model of the process. The model can be recommended to be used in technical calculations of mono- and dicarboxylic acids diesters production, as well as for the optimal conditions determination in each specific synthesis.

Keywords: esterification, semi-batch process, mathematical model, adipic acid, acetic acid, butan-1-ol, 2-methylpropan-1-ol.

Мельник Степан Романович – д.т.н., доцент, доцент кафедри технології органічних речовин, Національний університет «Львівська політехніка» (м. Львів). st_melnyk@yahoo.com

Кравченко Інна Василівна – к.т.н., доцент, доцент кафедри технології неорганічних речовин та екології, Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля (м. Северодонецьк). innakrav2014@yandex.ru

Рецензент: Суворін О.В. – д.т.н., доцент.