

Discontinu à continu : un monomère d'ammonium quaternaire

Le procédé:

Synthesis



Neutralization



Side-reaction



Le client:

- La compagnie B était intéressée dans le développement d'un réacteur continu pour la production d'un important monomère d'ammonium quaternaire

Buts du projet:

- Déterminer l'aptitude du système pour différents types de réacteurs (continu et discontinu)
- Obtenir les données calorimétriques et autres informations utiles pour l'étude du passage à grande échelle

L'approche:

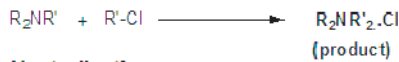
- La calorimétrie de réaction et la simulation de procédé furent utilisées
- Un modèle de la chimie du système fut construit, basé sur le procédé développé par le client
- Les cinétiques de réaction furent déterminées et ajoutées au modèle afin de construire des modèles détaillés du procédé
- Les modèles du procédé furent alors utilisés pour simuler le comportement à grande échelle pour différents types de réacteurs : écoulement piston, continu parfaitement agité et discontinu

Le résultat:

- Une phase initiale très rapide (Q_r augmenta très rapidement dès l'addition du premier équivalent du chlorure puis chuta)
- Une seconde phase plus lente (Q_r ne chute pas entre les additions successives indiquant l'accumulation du chlorure)
- Une longue (> 10h) phase d'agitation fut nécessaire afin d'atteindre une conversion totale
- Le pH et la vitesse d'agitation furent identifiés comme des facteurs importants pour la réaction durant la phase d'agitation
 - (La réaction s'arrêtait si le pH restait constant à 9.5)
 - (La réaction s'arrêtait si la vitesse d'agitation descendait sous 450 trs/min)
- L'agitation était une variable importante à cause d'un phénomène de 2 zones de mélange discrètes, attribuées à la précipitation de NaCl et au phénomène d'accumulation
- Le modèle cinétique construit à partir des données de Q_r prédirent une augmentation de température de 25 à 172°C en moins d'une seconde !

Discontinu à continu : un monomère d'ammonium quaternaire

Synthesis



Neutralization

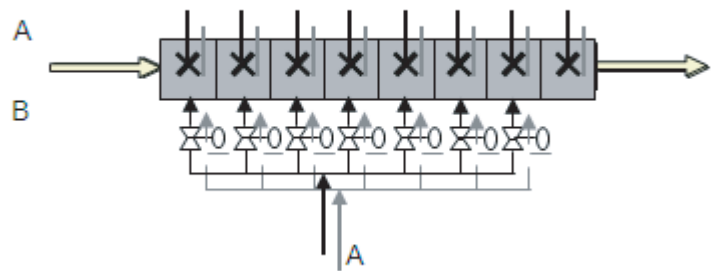


Side-reaction



Les conclusions de la modélisation du procédé:

- Un réacteur à écoulement piston demanderait que l'addition des réactifs soit faite dans la longueur du réacteur afin de pouvoir contrôler l'exotherme et le pH.
- Cette option fut jugée trop complexe en termes de développement et difficile à opérer à une échelle de production pour ce procédé



- La longue phase d'agitation serait insatisfaisante pour un réacteur continu parfaitement agité. Une série de réacteurs serait nécessaire afin de garantir le temps de résidence demandé pour obtenir de hauts niveaux de conversion (chacun nécessitant un contrôle du pH et de la température).
- Cette option fut donc, également, jugée trop complexe à développer

Les résultats:

- Les modèles développés suggèrent que le procédé était incompatible avec le régime continu
- Basé sur les données déjà obtenues, un modèle de réacteur discontinu (batch) fut construit afin de simuler le passage à grande échelle dans un réacteur Pfaudler de 2000 gallons (environ 9100 litres)
- L'accumulation de chlorure prédite par le modèle en régime discontinu fut similaire aux résultats observés lors des expériences effectuées dans le calorimètre ; validant par le fait les résultats des simulations
- Les données de sécurité thermique (chaleurs de réaction) pour le procédé furent également obtenues