

Badania nad modelowaniem procesu oczyszczania merkaptanu perchlorometylowego (PCMM) oraz ocena możliwości dalszego rozwoju technologii

Streszczenie

Końcowy etap projektu obejmował badania dotyczące modelowania procesu oczyszczania merkaptanu perchlorometylowego (PCMM) oraz ocenę możliwości wykorzystania uzyskanych wyników do dalszego rozwoju technologii. Prace stanowiły uzupełnienie wcześniejszych badań eksperymentalnych nad syntezą i oczyszczaniem produktu oraz miały na celu analizę wybranych wariantów technologicznych z wykorzystaniem narzędzi obliczeniowych.

W ramach badań przeprowadzono symulacje komputerowe procesu rektyfikacji oraz analizę parametrów mających wpływ na efektywność rozdziału mieszaniny poreakcyjnej. Wykorzystano dane uzyskane podczas wcześniejszych badań laboratoryjnych oraz wyniki analiz składu produktów reakcji. Oceniono wpływ wybranych parametrów procesu na przebieg oczyszczania oraz możliwości uzyskania produktu o odpowiednich parametrach jakościowych.

Uzyskane wyniki pozwoliły na porównanie analizowanych wariantów procesu oraz określenie kierunków dalszych prac związanych z rozwojem technologii otrzymywania i oczyszczania PCMM. Zebrane dane stanowią uzupełnienie wyników uzyskanych w poprzednich etapach projektu i mogą zostać wykorzystane podczas projektowania kolejnych badań dotyczących związków siarkoorganicznych oraz procesów technologicznych wykorzystujących PCMM jako półprodukt.

Słowa kluczowe: PCMM, rektyfikacja, symulacje komputerowe, modelowanie procesu, oczyszczanie.

Process Modeling of Perchloromethyl Mercaptan (PCMM) Purification and Evaluation of Further Technology Development

Abstract

The final stage of the project focused on process modeling of perchloromethyl mercaptan (PCMM) purification and evaluation of the potential for further technology development. The work complemented previous experimental studies on PCMM synthesis and purification by applying computational tools to selected technological variants.

Computer simulations of the rectification process were carried out using experimental data obtained during earlier laboratory investigations. The influence of selected process parameters on separation efficiency and product quality was evaluated. The obtained results enabled comparison of different process variants and assessment of factors affecting purification efficiency.

The study provided additional information supporting further development of PCMM production and purification technology. The collected data complement the experimental results obtained during previous stages of the project and may serve as a basis for future research on organosulfur compounds and technological processes using PCMM as an intermediate.

Keywords: PCMM, rectification, process modeling, computer simulation, purification.