

Общая химическая технология



Доцент Щетинский

Андрей Валерьевич

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Степень превращения – это отношение количества реагента, вступившего в реакцию, к его исходному количеству.

Например, для простой необратимой реакции типа $A \rightarrow R$ степень превращения выражается уравнением

$$X_A = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}}$$

где X_A - степень превращения реагента А;

$N_{A,0}$; N_A - количество исходного реагента А в начале и конце процесса или текущее на данный момент.

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Степень превращения выражается в долях или %, в последнем случае

$$X_A = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}} * 100\%$$

Из уравнения следует, что количество реагента в конце процесса можно определить по выражению

$$N_A = N_{A,0} \cdot (1 - X_A)$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Степень превращения для реакций без изменения объема:

$$X_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} = 1 - \frac{C_A}{C_{A,0}}$$

где $C_{A,0}$, C_A - концентрации исходного реагента А в начале и конце процесса.

Текущая концентрация рассматриваемого реагента, в этом случае, определяется по выражению

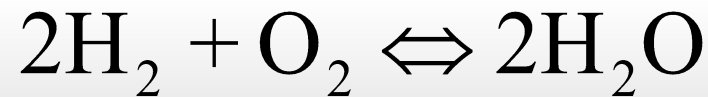
$$C_A = C_{A0} (1 - X_A)$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Если реакция протекает с изменением объема,
например



и $C=f(X_A)$, соответственно относительное изменение
объема системы выражаются уравнением

$$\xi_A = \frac{V_{X_A=1} - V_{X_A=0}}{V_{X_A=0}} = \frac{V_{X_A=1}}{V_{X_A=0}} - 1$$

Где ξ_A - относительное изменение объема системы,

$V_{X_A=1}; V_{X_A=0}$ - объем реакционной смеси при $X_A=0$; и $X_A=1$.

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Соответственно можно записать для объёма

$$V = V_0(1 + \xi_A X_A)$$

и для концентрации

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A,0}(1 - X_A)}{V_0(1 + \xi_A X_A)}$$

Ввиду того, что $\frac{N_A}{V_0} = C_{A,0}$

получаем $C_A = C_{A,0} \frac{1 - X_A}{1 + \xi_A X_A}$ и $X_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0} + C_A \xi_A}$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Степень превращения – для простой обратимой реакции типа



степень превращения выражается уравнением

$$X_A^* = \frac{N_{A,0} - N_A^*}{N_{A,0}}$$

где X_A^* – равновесная степень превращения реагента A;

$N_{A,0}$; N_A^* - количество исходного реагента A в начале процесса и в состоянии равновесия.

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Выход продукта для неравновесных условий

$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_R^*}$$

где N_R^* и N_R - количество продукты **R** в состоянии равновесия и в неравновесных условиях.

Используя выражения для количества продукта выведенные из формулы для степени превращения:

$$N_R = N_{A,0} - N_A \quad \text{и} \quad N_R^* = N_{A,0} \cdot X_A^*$$

получаем:

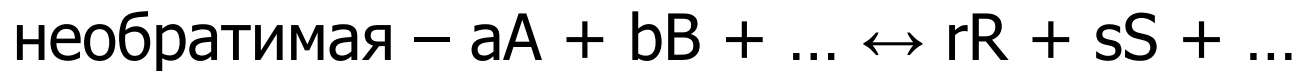
$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_R^*} = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0} \cdot X_A^*} = \frac{X_A}{X_A^*}$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Уравнения для выхода продукта справедливы также по отношению к простым необратимым и обратимым реакциям, протекающим с изменением объема реакционной смеси. Например, для реакций:



2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

И пользуясь символьными уравнениями для выхода продукта в простых необратимых и обратимых реакциях, протекающим с изменением объема реакционной смеси можно записать:

необратимая –
$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_{R,\max}} = \frac{\frac{r}{a}(N_{A,0} - N_A)}{\frac{r}{a} \cdot N_{A,0}} = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0}} = X_A$$

обратимая –
$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_R^*} = \frac{\frac{r}{a}(N_{A,0} - N_A)}{\frac{r}{a} \cdot N_{A,0} \cdot X_A^*} = \frac{N_{A,0} - N_A}{N_{A,0} \cdot X_A^*} = \frac{X_A}{X_A^*}$$

2. Основные закономерности

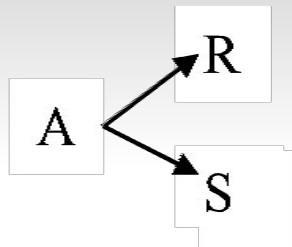
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Селективность - избирательность

Селективностью называется отношение количества целевого продукта к общему количеству получаемых продуктов.

Селективность характеризует процессы, в которых протекают сложные параллельные и последовательные реакции с получением нескольких продуктов.



селективность будет выражаться

$$Y_r = \frac{N_R}{N_R + N_S}$$

где Y_R - селективность

2. Основные закономерности химико-технологического процесса

Основные технологические понятия и определения

Селективность - избирательность

Для рассматриваемой параллельно реакции

$$N_R + N_S = N_{A,O} - N_A$$

тогда

$$Y_r = \frac{N_R}{N_{A,O} - N_A}$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Связь между степенью превращения (X), выходом продукта (Φ) и селективностью (Y):

$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_{A,O}} \quad \text{умножим на} \quad \left(\frac{N_{A,O} - N_A}{N_{A,O} - N_A} \right)$$

тогда с учетом уравнения для степени превращения и селективности получим

$$\Phi_R = \frac{N_R}{N_{A,O}} = \frac{N_{A,O} - N_A}{N_{A,O}} * \frac{N_R}{N_{A,O} - N_A} = X_A * \varphi_R$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Основные технологические понятия и определения

Полученную зависимость $\Phi = f(x, \varphi)$

можно записать в виде:

$\Phi = X$ – для простой необратимой реакции

$\Phi = X/X^*$ – для простой обратимой реакции

$\Phi = X \times \Phi$ – для сложной необратимой реакции

$\Phi = X/X^* \times \Phi$ – для сложной обратимой реакции

В производственных условиях с целью уменьшения расходных коэффициентов сырья стремятся иметь возможность более высоких значений степени превращения (X), выхода продукта (Φ) и селективности (Y).

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Периодические и непрерывные процессы

Периодическим называется процесс, в котором порция сырья едино-временно загружается в аппарат, проходит в нем все стадии обработки (до заданной степени превращения X), и затем выгружается все образующееся вещество.

Свойства периодических процессов:

1. Технологическая переменная (Γ), которая включает в себя температуру, давление, концентрацию или другой характерный параметр, является функцией времени, а не пространства, т.е. ее значение в каждой точке пространства одинаково.
2. Цикличность. Как только достигнута желаемая степень обработки материала, аппарат разгружается. Повторяемость циклов представляет собой существенную и общую черту всех промышленных периодических процессов и способов работы всех машин периодического действия.

2. Основные закономерности химико-технологического процесса

Периодические и непрерывные процессы

Непрерывным называется такой технологический процесс, в котором предмет труда (материал, вещество) подводится к орудию труда (аппарат, машина, установка) непрерывным потоком.

Свойства непрерывных процессов:

1. Технологическая переменная "Г" является функцией пространства.
2. Отсутствие цикличности. Процесс при соблюдении условия является стационарным, т.е. установившимся во времени.

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \tau} = 0 ,$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

ОСНОВЫ СОСТАВЛЕНИЯ БАЛАНСОВ

Для анализа работы технологической схемы, отдельных аппаратов, при проектировании новых производств, разработке и проектировании новых аппаратов, для отыскания важнейших технологических показателей, составляют материальный и тепловой балансы либо всего технологического производства, либо той его части, которая непосредственно связана с конструированием аппарата или определяемым показателем.

На основе знаний о закономерностях и ходе рассчитываемого химико-технологического процесса с учетом известных для данного процесса величин, составляется методика расчета, зависящая от:

- рода производства;
- способа переработки исходных материалов;
- качества сырьевых материалов;
- режима работы аппаратов;
- условий производства;
- и других факторов.

В основе всех химико-технологических процессов лежат законы сохранения!

(массы, энергии и импульса)

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

ОСНОВЫ СОСТАВЛЕНИЯ БАЛАНСОВ

Закон сохранения в покоеющейся (закрытой) системе

Закон сохранения массы и энергии в покоеющейся системе означает, что они могут превращаться внутри системы (т.е. выступать в различных формах), но совокупности их остаются неизменными.

Рассмотрим систему в которой не происходит химических превращений.

Допустим в системе имеется несколько компонентов "К" и только одна фаза ($\varphi = 1$), то согласно закону сохранения массы, сумма масс всех компонентов должна быть равна массе всей системы m , т.е.

$$m_1 + m_2 + m_k = m$$

или

$$\sum_{i=1}^K m_i = m$$

В другом предельном случае система должна иметь несколько фаз ($\varphi \neq 1$) и только один компонент ($K=1$).

Закон сохранения массы при этом выражается несколько иначе:

$$N^{f_1} + N^{f_2} + \dots N^{f_\varphi} = N$$

$$\sum_{i=1}^{\varphi} N^{f_i} = N$$

2. Основные закономерности

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

ОСНОВЫ СОСТАВЛЕНИЯ БАЛАНСОВ

Закон сохранения в покоеющейся (закрытой) системе

Закон сохранения массы и энергии в покоеющейся системе означает, что они могут превращаться внутри системы (т.е. выступать в различных формах), но совокупности их остаются неизменными.

Рассмотрим систему в которой не происходит химических превращений.

Допустим в системе имеется несколько компонентов "К" и только одна фаза ($\varphi = 1$), то согласно закону сохранения массы, сумма масс всех компонентов должна быть равна массе всей системы m , т.е.

$$m_1 + m_2 + m_k = m$$

или

$$\sum_{i=1}^K m_i = m$$

В другом предельном случае система должна иметь несколько фаз ($\varphi \neq 1$) и только один компонент ($K=1$).

Закон сохранения массы при этом выражается несколько иначе:

$$N^{f_1} + N^{f_2} + \dots N^{f_\varphi} = N$$

$$\sum_{i=1}^{\varphi} N^{f_i} = N$$