
ΧΗΜΙΚΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ II

Χημικές Διεργασίες

Σύγκριση Ιδανικών αντιδραστήρων

Βασικά στοιχεία μη ιδανικής ροής.

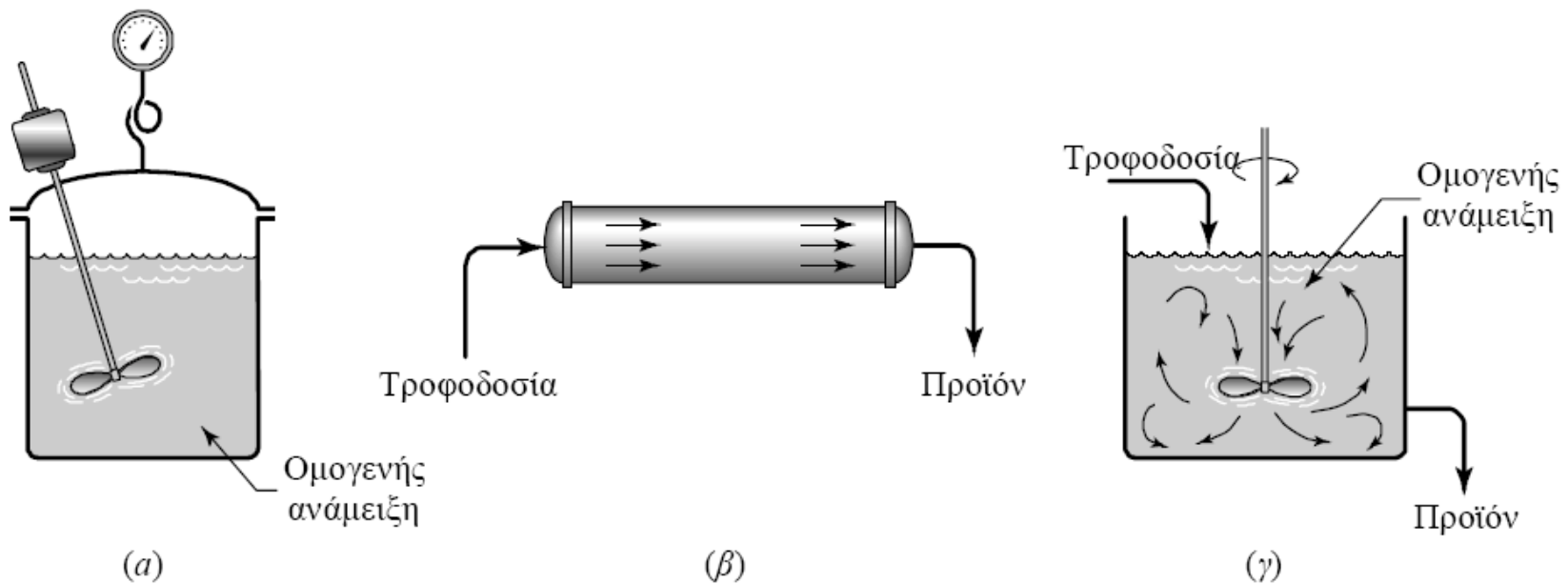
Ετερογενείς χημικές αντιδράσεις.

Χημικές αντιδράσεις καταλυόμενες από στερεούς καταλύτες.

Καταλυτικοί αντιδραστήρες.

Συστήματα βιοχημικών αντιδράσεων.

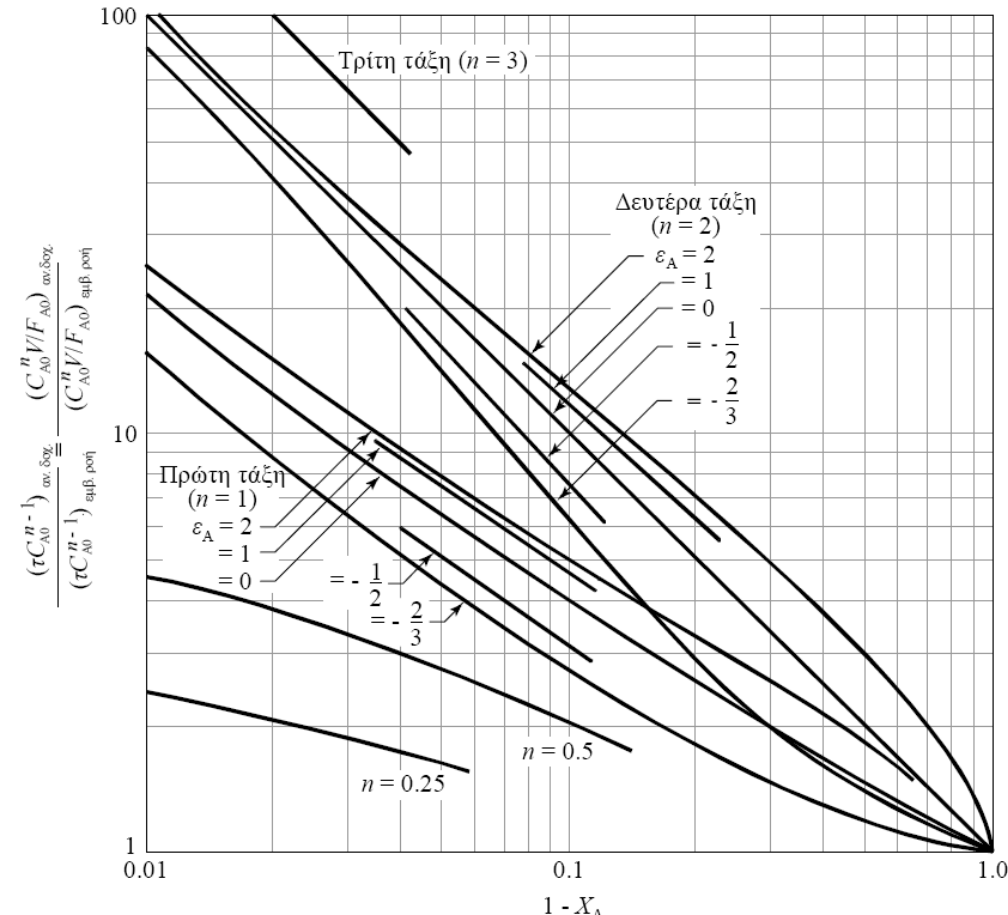
Ιδανικοί Αντιδραστήρες



Σχήμα 5.1 Οι τρεις τύποι ιδανικών αντιδραστήρων: (α) αντιδραστήρας διακοπτόμενης λειτουργίας, ή Batch Reactor - BR (β) αντιδραστήρας εμβολικής ροής, ή Plug Flow Reactor - PFR και (γ) αντιδραστήρας μεικτής ροής, ή Mixed Flow Reactor - MFR.

Ιδανικοί Αντιδραστήρες για Απλές Χημικές Αντιδράσεις

Σύγκριση μεγέθους MFR – PFR



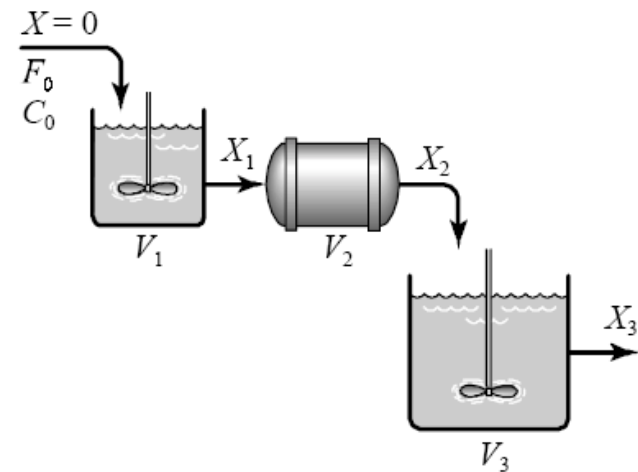
1. Σε όλες τις περιπτώσεις και για όλες τις τάξεις αντίδρασης, ο όγκος του αντιδραστήρα αναδεδυόμενου δοχείου συνεχούς ροής είναι μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο όγκο του αντιδραστήρα εμβολικής ροής.

2. Όταν ο βαθμός μετατροπής είναι μικρός, η απόδοση του αντιδραστήρα επηρεάζεται ελάχιστα από το είδος της ροής. Ο λόγος των αποδόσεων αυξάνεται πολύ γρήγορα σε υψηλούς βαθμούς μετατροπής. Είναι επομένως απαραίτητος ο καθορισμός του είδους της ροής σε αυτή την περιοχή της μετατροπής.

3. Η μεταβολή της πυκνότητας κατά τη διάρκεια της αντίδρασης επηρεάζει το σχεδιασμό. Είναι όμως δευτερεύουσας σημασίας σε σχέση με τη μεταβολή του είδους της ροής.

Ιδανικοί Αντιδραστήρες για Απλές Χημικές Αντιδράσεις

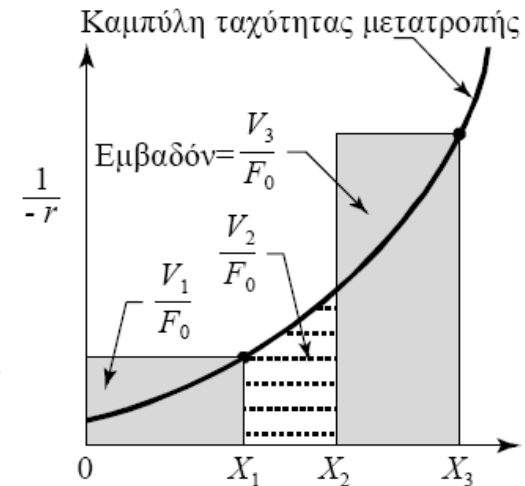
Αποτελεσματικότητα συστοιχίας αντιδραστήρων διαφορετικού τύπου σε σειρά



$$\frac{V_1}{F_0} = \frac{X_1 - X_0}{(-r)_1}$$

$$\frac{V_2}{F_0} = \int_{X_1}^{X_2} \frac{dX}{-r}$$

$$\frac{V_3}{F_0} = \frac{X_3 - X_2}{(-r)_3}$$



Για την πραγματοποίηση μιας αντίδρασης, της οποίας η καμπύλη ταχύτητας - συγκέντρωσης αυξάνεται μονότονα ($n > 0$), οι αντιδραστήρες θα πρέπει να ενωθούν σε σειρά. Θα πρέπει να διατάσσονται με τέτοιο τρόπο, ώστε η συγκέντρωση του αντιδρώντος να διατηρείται όσο το δυνατόν υψηλότερη εάν η καμπύλη ταχύτητας - συγκέντρωσης είναι κοίλη ($n > 1$), και όσο το δυνατόν χαμηλότερη αν η καμπύλη είναι κυρτή ($n < 1$). Για παράδειγμα, στην περίπτωση του παραπάνω σχήματος η διάταξη των μονάδων θα πρέπει να είναι: εμβολικής ροής, μικρό αναδευόμενο δοχείο, μεγάλο αναδευόμενο δοχείο, για $n > 1$. Η αντίθετη διάταξη πρέπει να χρησιμοποιείται όταν $n < 1$.

Σχεδιασμός Αντιδραστήρων για Παράλληλες Χημικές Αντιδράσεις

Πολλαπλές Χημικές Αντιδράσεις

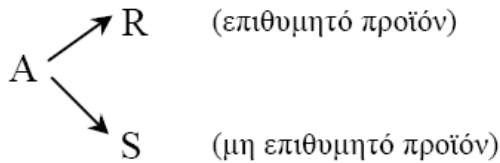
- Παράλληλες Χημικές Αντιδράσεις
- Διαδοχικές Χημικές Αντιδράσεις

Χρειαζόμαστε περισσότερες από μία εξισώσεις ταχύτητας

Μεθοδολογία

- $r=f(C)$
- Απαλείφουμε το χρόνο διαιρώντας κατά μέλη τις εξισώσεις ταχύτητας
- Τα ζητούμενα είναι δύο:
 - ✓ Η ελαχιστοποίηση του όγκου του αντιδραστήρα
 - ✓ Η μεγιστοποίηση της απόδοσης της διεργασίας ως προς το επιθυμητό προϊόν

Ποιοτική Συζήτηση για την Κατανομή των Προϊόντων



$$r_R = \frac{dC_R}{dt} = k_1 C_A^{\alpha_1}$$

$$r_S = \frac{dC_S}{dt} = k_2 C_A^{\alpha_2}$$

$$\frac{r_R}{r_S} = \frac{dC_R}{dC_S} = \frac{k_1}{k_2} C_A^{\alpha_1 - \alpha_2}$$

$$\alpha_1 < \alpha_2:$$

$C_A \downarrow$

- MFR
- $X_A \nearrow$
- Αδρανή στην τροφοδοσία
- P \searrow

$$\alpha_1 > \alpha_2:$$

$C_A \uparrow$

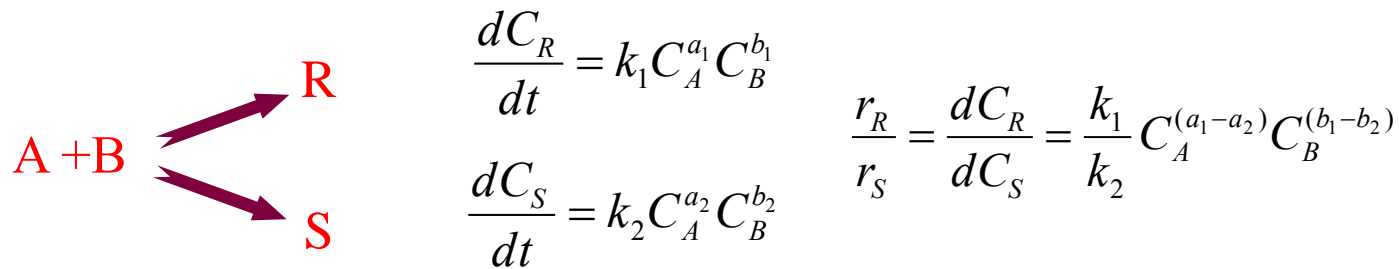
- PFR ή BR
- $X_A \searrow$
- Αδρανή στην τροφοδοσία
- P \nearrow

Συμπέρασμα

Για αντιδράσεις παράλληλες, η συγκέντρωση των αντιδρώντων είναι το κλειδί για τον κατάλληλο έλεγχο της κατανομής των προϊόντων. Μια υψηλή συγκέντρωση αντιδρώντος ευνοεί την αντίδραση υψηλότερης τάξης, μια χαμηλή συγκέντρωση ευνοεί την αντίδραση χαμηλότερης τάξης, ενώ το επίπεδο της συγκέντρωσης δεν έχει καμιά επίδραση στην κατανομή των προϊόντων για αντιδράσεις της ίδιας τάξης.

$$\alpha_1 = \alpha_2: \quad \frac{r_R}{r_S} = \frac{dC_R}{dC_S} = \frac{k_1}{k_2} = \text{σταθερό}$$

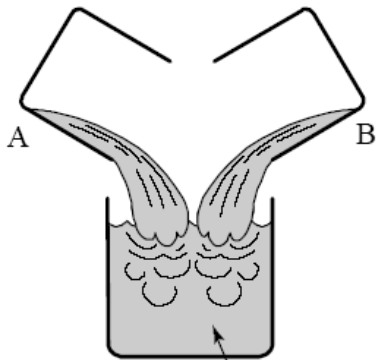
Ποιοτική Συζήτηση για την Κατανομή των Προϊόντων



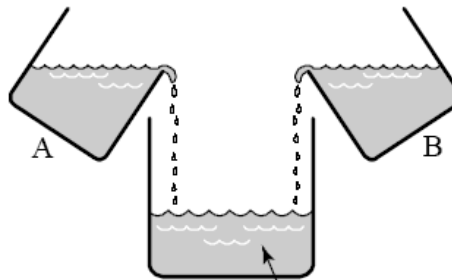
C_A, C_B υψηλές

C_A, C_B χαμηλές

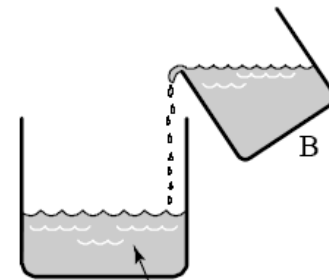
C_A υψηλή, C_B χαμηλή



Προσθήκη όλης της ποσότητας των A και B από την αρχή

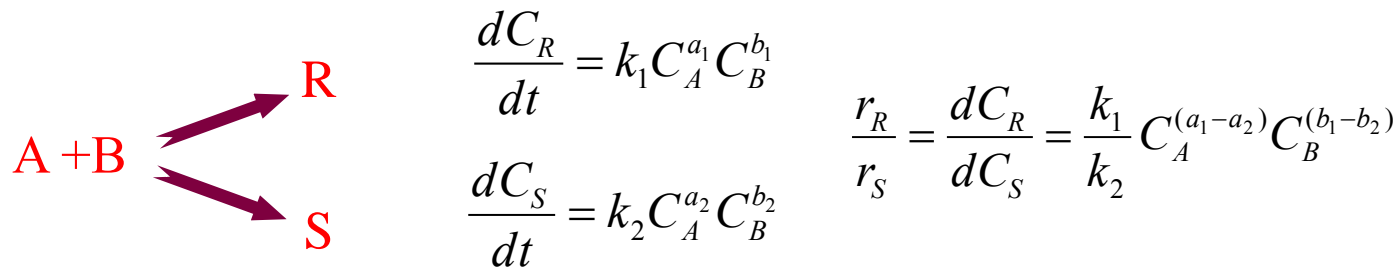


Βραδεία ανάμειξη των A και B



Εκκίνηση με A. Αργή προσθήκη του B.

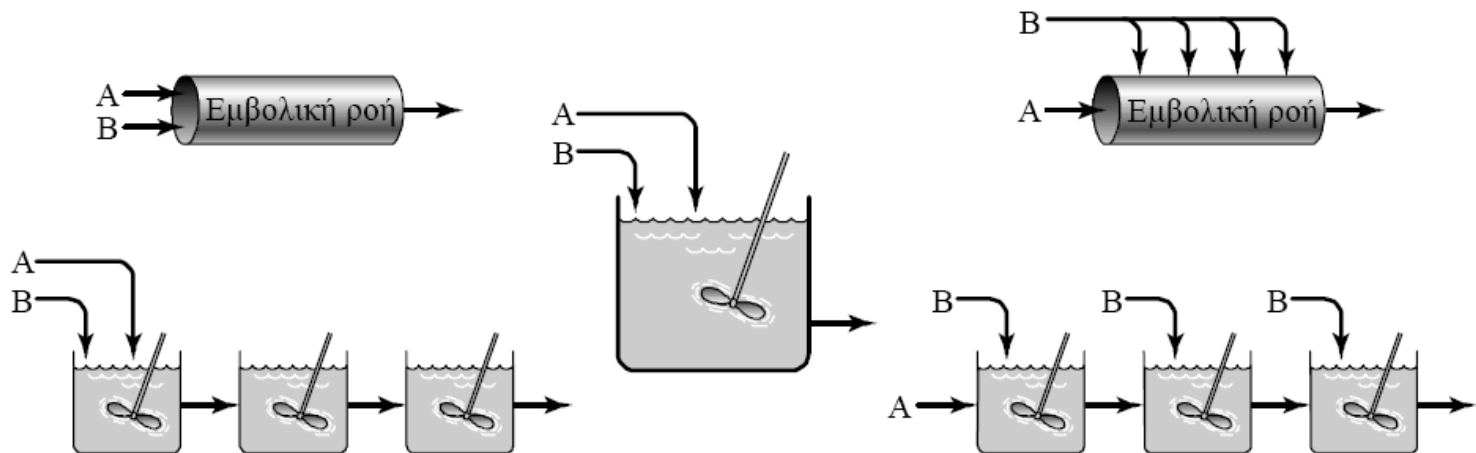
Ποιοτική Συζήτηση για την Κατανομή των Προϊόντων



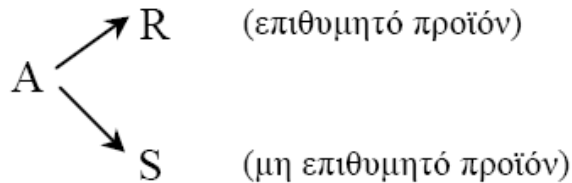
C_A, C_B υψηλές

C_A, C_B χαμηλές

C_A υψηλή C_B χαμηλή



Ποσοτική Επεξεργασία Κατανομής Προϊόντων & Μεγέθους του Αντιδραστήρα



Προϋπόθεση: Γνωστές εξισώσεις ταχύτητας

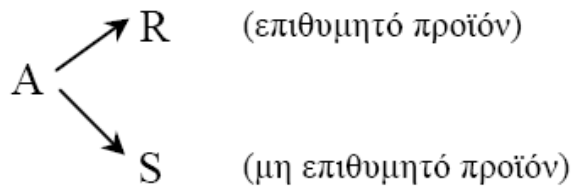
Στιγμαία κλασματική απόδοση

$$\varphi = \left(\frac{\text{moles R που σχηματίστηκαν}}{\text{moles A που αντέδρασαν}} \right) = \frac{dC_R}{-dC_A}$$

Ολική κλασματική απόδοση

$$\Phi = \left(\frac{\text{ολικό σχηματιζόμενο R}}{\text{ολικό αντιδρών A}} \right) = \frac{C_{R_f}}{C_{A0} - C_{A_f}} = \frac{C_{R_f}}{(-\Delta C_A)} = \bar{\varphi}_{\text{στον αντιδραστήρα}}$$

Ποσοτική Επεξεργασία Κατανομής Προϊόντων & Μεγέθους του Αντιδραστήρα



Στιγμαία κλασματική απόδοση

$$\varphi = \left(\frac{\text{moles R που σχηματίστηκαν}}{\text{moles A που αντέδρασαν}} \right) = \frac{dC_R}{-dC_A}$$

Ολική κλασματική απόδοση

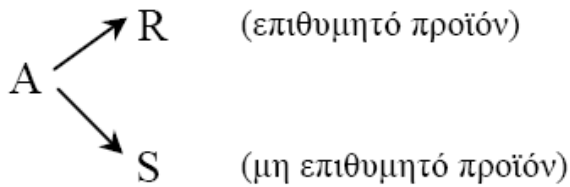
$$\Phi = \left(\frac{\text{ολικό σχηματιζόμενο R}}{\text{ολικό αντιδρών A}} \right) = \frac{C_{Rf}}{C_{A0} - C_{Af}} = \frac{C_{Rf}}{(-\Delta C_A)} = \bar{\varphi}_{\text{στον αντιδραστήρα}}$$

Για PFR: $\Phi_p = \frac{-1}{C_{A0} - C_{Af}} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi dC_A$

Για MFR: $\Phi_m = \varphi_{\text{υπολογισμένο σε } C_{Af}}$

$$\Phi_{N \text{ αναμ.}} = \frac{\varphi_1(C_{A0} - C_{A1}) + \varphi_2(C_{A1} - C_{A2}) + \dots + \varphi_N(C_{A,N-1} - C_{AN})}{C_{A0} - C_{AN}}$$

Ποσοτική Επεξεργασία Κατανομής Προϊόντων & Μεγέθους του Αντιδραστήρα

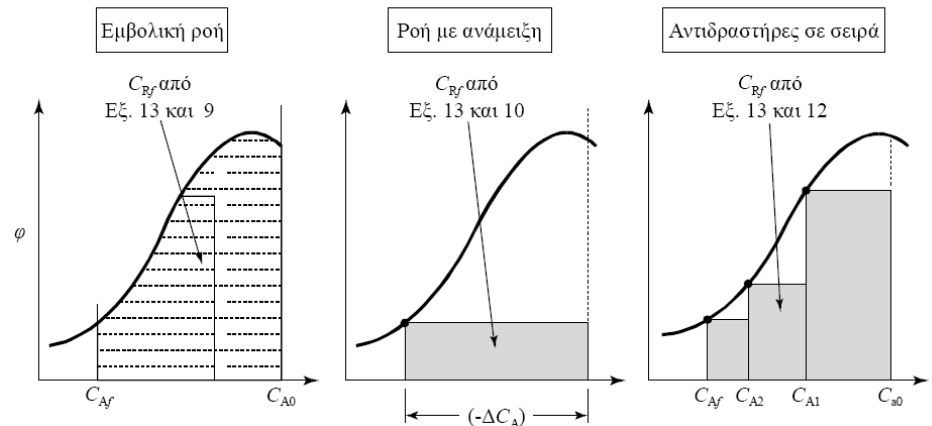


Για PFR:
$$\Phi_p = \frac{-1}{C_{A0} - C_{Af}} \int_{C_{A0}}^{C_{Af}} \varphi dC_A$$

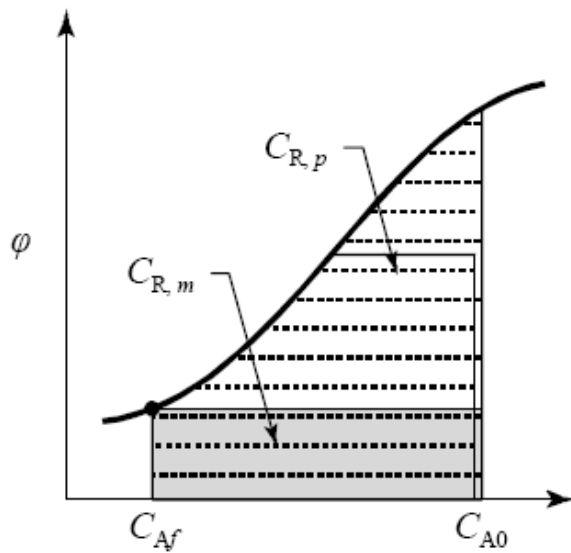
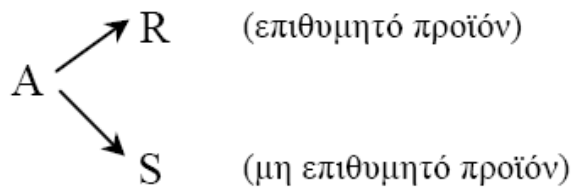
Για MFR:
$$\Phi_m = \varphi_{\text{υπολογισμένο σε } C_{Af}}$$

$$\Phi_{N \text{ αναμ.}} = \frac{\varphi_1(C_{A0} - C_{A1}) + \varphi_2(C_{A1} - C_{A2}) + \dots + \varphi_N(C_{A,N-1} - C_{AN})}{C_{A0} - C_{AN}}$$

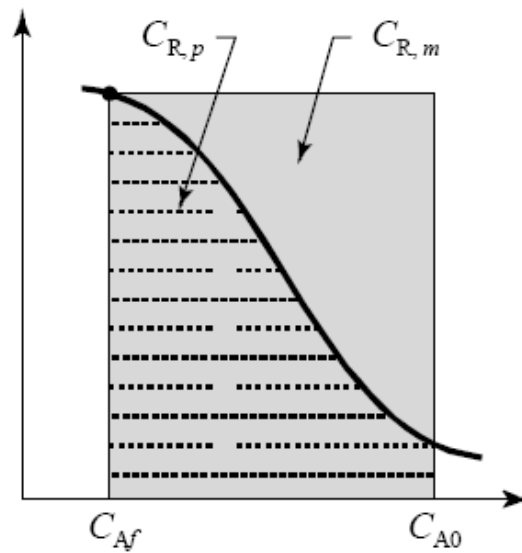
$$C_{Rf} = \Phi (C_{A0} - C_{Af})$$



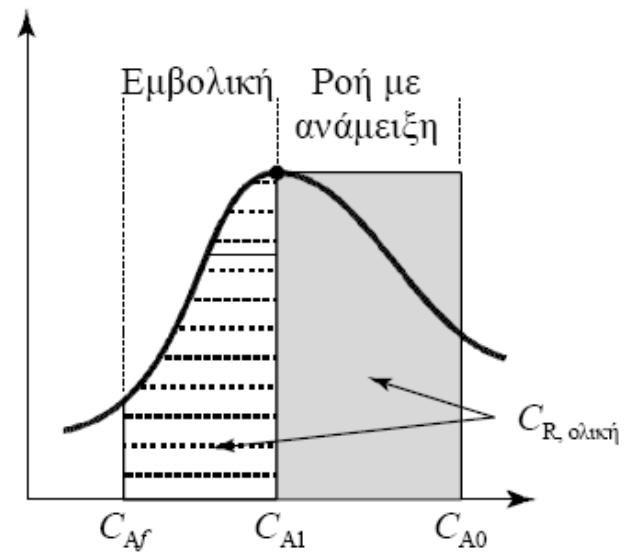
Ποσοτική Επεξεργασία Κατανομής Προϊόντων & Μεγέθους του Αντιδραστήρα



(α)

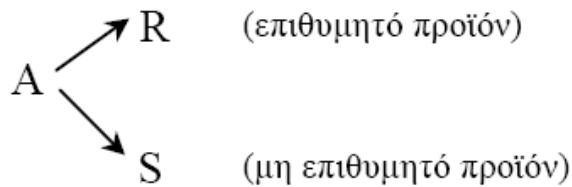


(β)



(γ)

Ποσοτική Επεξεργασία Κατανομής Προϊόντων & Μεγέθους του Αντιδραστήρα



$$\text{εκλεκτικότητα} = \left(\frac{\text{moles επιθυμητού σχηματιζόμενου προϊόντος}}{\text{moles μη επιθυμητού σχηματιζόμενου προϊόντος}} \right)$$

