

ΠΡΟΒΛΕΨΗ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΑΖΕΟΤΡΟΠΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΠΟΥ ΜΕΤΕΧΟΥΝ ΣΕ ΧΗΜΙΚΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ

Μ. Παντελή^{1*}, Β. Κουλοχέρης¹, Ε. Πετροπούλου¹, Ε. Βουτσάς¹

¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(*me.panteli@gmail.com)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι αντιδράσεις σύνθεσης ενώσεων που χρησιμοποιούνται στη χημική και πετρελαϊκή βιομηχανία πολλές φορές συνοδεύονται από εμφάνιση αζεοτρόπων μεταξύ των συστατικών που μετέχουν σε αυτές. Στην κατηγορία αυτή εντάσσονται διάφορες αντιδράσεις εστεροποίησης οργανικών οξέων, καθώς και αντιδράσεις αιθεροποίησης όπως αυτή της παραγωγής MTBE, το οποίο χρησιμοποιείται ευρέως ως πρόσθετο της βενζίνης. Ο διαχωρισμός τέτοιων συστημάτων με απόσταξη μετά την αποκατάσταση της χημικής ισορροπίας καθίσταται ιδιαίτερα δύσκολος, σε ορισμένα όμως συστήματα έχει παρατηρηθεί ότι αυτός ευνοείται όταν πραγματοποιείται με ταυτόχρονη χημική αντίδραση.^[1] Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η απόσταξη με ταυτόχρονη χημική αντίδραση (reactive distillation).

Για τη διερεύνηση της εφικτότητας του διαχωρισμού τέτοιων μιγμάτων πραγματοποιείται μελέτη της ταυτόχρονης επίλυσης της ισορροπίας φάσεων και της χημικής ισορροπίας (CPE). Τα συστήματα που μελετώνται εμφανίζουν μεγάλες αποκλίσεις από την ιδανικότητα που οφείλονται στην παρουσία πολικών συστατικών που αναπτύσσουν και δεσμούς υδρογόνου, όπως είναι οι αλκοόλες, το νερό, οι εστέρες και τα καρβοξυλικά οξέα. Συνεπώς, η επιλογή κατάλληλου θερμοδυναμικού μοντέλου για την ακριβή περιγραφή της ισορροπίας φάσεων είναι ιδιαίτερα σημαντική. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται μοντέλα συντελεστή ενεργότητας, όπως είναι τα NRTL, UNIQUAC και UNIFAC, που χρησιμοποιούνται κατά κόρον για τέτοιους υπολογισμούς, καθώς και ένα μοντέλο που ανήκει στην κατηγορία των EoS/G^E, το UMR-PRU^[2]. Το τελευταίο αναπτύχθηκε στο Εργαστήριο Θερμοδυναμικής και Φαινομένων Μεταφοράς του ΕΜΠ και συνδυάζει την καταστατική εξίσωση Peng-Robinson με το μοντέλο συντελεστή ενεργότητας UNIFAC.

Στην παρούσα μελέτη θα περιγραφεί ο αλγόριθμος επίλυσης της ισορροπίας φάσεων παρουσία χημικής αντίδρασης, ο οποίος θα αξιολογηθεί στη μελέτη ενός συστήματος που δεν παρουσιάζει αζεοτροπική συμπεριφορά.^[3] Έπειτα, ο αλγόριθμος θα χρησιμοποιηθεί στην πρόβλεψη της ισορροπίας φάσεων με ταυτόχρονη χημική αντίδραση σε συστήματα που εμφανίζουν αζεότροπα.^[1]

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] Ung, S.; Doherty, M. F. *AIChE J.* (1995), 41 (11), 2383-2392.

[2] Voutsas, E.; Magoulas, K.; Tassios, D. *Ind. Eng. Chem. Res.* (2004), 43 (19), 6238-6246.

[3] Lee, M.-J.; Chen, S.-L.; Kang, C.-H.; Lin, H.-m. *Ind. Eng. Chem. Res.* (2000), 39 (11), 4383-4391.