

როსტომ გაფრინდაშვილი

საქართველოს ტექნიკური
უნივერსიტეტი

rostop gafrindaSvili

ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის
მაგალითები და ამოცანები

ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის
მაგალითები და ამოცანები

დამტკიცებულია სტუ-ს
სარედაქციო-საგამომცემლო
საბჭოს მიერ

„ტექნიკური უნივერსიტეტი“

თბილისი
2020

შაკ 66.0

წარმოდგენილია მაგალითები და ამოცანები, რომლებიც განკუთვნილია „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის“ თეორიული კურსის ძირითადი ნაწილების მასალის განმტკიცებისა და იმ მრავალფეროვანი გაანგარიშებების მეთოდების პრაქტიკულად შეთვისებისათვის, რომლებიც ხვდება ტექნოლოგს წარმოებაში.

განკუთვნილია ქიმიური ტექნოლოგიისა და მონათესავე სპეციალობების უმაღლესი სასწავლებლების სტუდენტებისათვის.

რეცენზენტი პროფესორი ნ. მუმლაძე

© საგამომცემლო სახლი „ტექნიკური უნივერსიტეტი“, 2020
ISBN
<http://gtu.ge/publishinghouse/>

ქიმიკოს-ტექნოლოგების მომზადება ითვალისწინებს ქიმიურ-ტექნოლოგიური პროცესების ზოგადი მეცნიერული საფუძვლებისა და კანონზომიერებების შესწავლას. ამ ამოცანას ემსახურება „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის“ კურსი.

ლექციების კურსი უთავსდება პრაქტიკულ მეცადინეობებს, რომლებზედაც შეითვისება და მტკიცდება თეორიული მასალა ქიმიურ-ტექნოლოგიური პროცესების კონკრეტული ამოცანების გაანგარიშებათა გადაწყვეტის გზით.

დამხმარე სახელმძღვანელო „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის მაგალითები და ამოცანები“ არის „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის“ სახელმძღვანელოს დამატება. იგი მოიცავს „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის“ დისციპლინის ძირითად ნაწილებს – ქიმიური პროცესების ფიზიკურ-ქიმიურ საფუძვლებს, ქიმიურ პროცესებსა და რეაქტორებს. კურსის ძირითადი მიმართულების შესაბამისად ძირითადი ყურადღება ეთმობა ისეთი პროცესების გაანგარიშებებს, რომლებიც ქიმიური გარდაქმნებით მიმდინარეობს. შემდეგ წარმოდგენილია საანგარიშო მასალა თანამიმდევრობით „კერძოდან ზოგადისაკენ“: ქიმიურ-ტექნოლოგიური პროცესების კანონზომიერებები, ქიმიური რეაქტორისა და რეაქტორთა სისტემის გაანგარიშება და ა. შ. ყოველი ნაწილი შეიცავს მოკლე ცნობებს პროცესის შესახებ და ძირითად გამოსათვლელ ფორმულებს, გაანგარიშებათ მაგალითებსა და ამოცანებს დამოუკიდებელი ამონხსნისათვის.

დამხმარე სახელმძღვანელო შედგენილია სტუ-ის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტზე ამჟამად მოქმედი „ზოგადი ქიმიური ტექნოლოგიის“ პროგრამის შესაბამისად.

პირობითი აღნიშვნები

ქვემოთ მოგვყავს მხოლოდ ძირითადი პარამეტრებისა და ცვლადების აღნიშვნები, რომლებიც იხმარება სამეცნიერო და ტექნიკურ ლიტერატურაში და, ცხადია, ამ დამხმარე სახელმძღვანელოში; მოყვანილია, აგრეთვე, ზოგიერთი საყოველთაოდ მიღებული აღნიშვნა.

- A, B, \dots, R, S – ამოსავალი ნივთიერებები და რეაქციის პროდუქტები
- $^{\circ}C$ - ცელსიუსის გრადუსი
- C_i - i -ური ნივთიერების მიმდინარე კონცენტრაცია, მოლ/ლ
- C_{i0} - i -ური ნივთიერების საწყისი კონცენტრაცია, მოლ/ლ
- C_p - ხვედრითი სითბოტევადობა: მოლური – ჯ/(მოლ · K),
მასური – ჯ/კგ · K, მოცულობითი – ჯ/(მ³ · K)
- D - დიფუზიის კოეფიციენტი, მ²/წმ; დიამეტრი, მ
- E_i - i -ური პროდუქტის გამოსავალი
- E - აქტივაციის ენერგია, ჯ/მოლ
- F - რეაქტორის კვეთი; თბოცვლის საერთო ფართობი, მ²
- H - ენთალპია, ჯ/მოლ; აპარატის სიმაღლე, მ
- k - რეაქციის სიჩქარის კონსტანტა, გარდაქმნის სიჩქარის კონსტანტა
- K - კელვინის გრადუსი
- K_f - წონასწორობის კონსტანტა
- K_g - მასაგადაცემის კოეფიციენტი, მ/წმ
- K_T - სითბოგადაცემის კოეფიციენტი, ჯ/(მ² · წმ · K)
- n - რეაქციის რიგი
- N - ნივთიერების რაოდენობა, მოლური ნაკადი, მოლ/წმ
- P - საერთო წნევა, პა
- P_i - i -ური კომპონენტის პარციალური წნევა აირში, პა
- Q, q - თბური ნაკადი, ჯ/წმ
- Q_r - რეაქციის თბური ეფექტი, ჯ/წმ
- R - აირების მუდმივა, ჯ/(მოლ · K); მყარი ნაწილაკის დიამეტრი, მ
- u - რეაქციის სიჩქარე

- S - პროცესის სელექციურობა პროდუქტის მიმართ, ფაზათა კონტაქტის ზედაპირი, მ²
- S_i - დიფერენციალური სელექციურობა i -ური პროდუქტის მიმართ
- T - ტემპერატურა, K
- v - რეაქტორის, კატალიზატორის მოცულობა, მ³
- v_i - i -ური კომპონენტის სტექიომეტრიული კოეფიციენტი
- V_0 - საწყისი მოცულობითი ნაკადი, მ³/წმ
- x - გარდაქმნის ხარისხი
- t - დაყოვნების პირობითი დრო, წმ

ქიმიური წარმოების ძირითადი ტექნოლოგიური მაჩვენებლები

1.1. საანგარიშო ფორმულები

პროცესის ან წარმოების ტექნიკური სრულყოფა განისაზღვრება მისი ტექნიკური მაჩვენებლებით.

წარმოების სიმძლავრე, ანუ მწარმოებლურობა Π , Π განსაზღვრავს დროის ერთეულში გამოშვებული პროდუქტის (ან გადამუშავებული ნედლეულის) რაოდენობას და, ჩვეულებრივ, გამოიხატება ტონებით დღე-ღამეში, ათას ტონებით წელიწადში, ან კილოგრამებით საათში.

ქიმიური წარმოება წელიწადში 300-330 დღე-ღამე მუშაობს, ე. ი. გარდა იმ დღეებისა, რომლებიც გათვალისწინებულია გეგმიური გამაფრთხილებელი რემონტისა და შესაძლებელი ავარიული გაჩერებებისათვის. ამრიგად,

$$\Pi [\text{ტ/დღ-ღ}] = 0,3 \Pi [\text{ათასი ტ/წდ}].$$

საათური მწარმოებლურობის გაანგარიშების დროს გულისხმობენ, რომ წარმოება მუშაობს წელიწადში 8000 საათი, ე. ი.

$$\Pi [\text{ტ/დღ-ღ}] = \Pi [\text{ათასი ტ/წდ}] / 8.$$

ხარჯვითი კოეფიციენტი K . K განსაზღვრავს ნედლეულის, წყლის, სათბობის, ელექტროენერჯის, ორთქლის ხარჯს წარმოებული პროდუქციის ერთეულზე:

$$K = G_{\text{აძის}}/G,$$

სადაც $G_{\text{აძის}}$ არის ნედლეულის, სათბობის, ენერჯის და ხანარჯები G რაოდენობის პროდუქტის წარმოების დროს.

ხარჯვითი კოეფიციენტები შეიძლება გაიზომოს ნედლეულის ტონებით ტონა პროდუქტზე, აირის კუბური მეტრებით ტონა პროდუქტზე, ელექტროენერჯის კილოვატ-საათებით ტონა პროდუქტზე და ა. შ. ხარჯვითი კოეფიციენტი ასახავს მოცემული ტექნოლოგიის ეფექტურობას, ნედლეულის მიხედვით რესურსებითა და ენერჯით უზრუნველყოფას და ხშირად არის წარმოების ეფექტურობის განმსაზღვრელი მაჩვენებელი.

თეორიული ხარჯვითი კოეფიციენტი $K_{\text{თ}}$ ითვალისწინებს სტექიომეტრიულ თანაფარდობებს, რომელთა შესაბამისადაც ამოსავალი ნივთიერებები მზა პროდუქტად გარდაიქმნება. ამისათვის იყენებენ ქიმიური გარდაქმნის სტექიომეტრიულ განტოლებას

$$v_A A + v_B B + \dots = v_R R + v_S S + \dots,$$

რომელიც გვიჩვენებს თუ რა თანაფარდობით ურთიერთქმედებენ ქიმიურად ერთმანეთთან ნივთიერებები. თუ გარდაიქმნა A ნივთიერების N_A მოლი, დახარჯულია B ნივთიერების $N_A(v_B/v_A)$ მოლი და წარმოიქმნება R პროდუქტის $N_A(v_R/v_A)$ მოლი და S პროდუქტის $N_S(v_R/v_A)$ მოლი.

პრაქტიკული ხარჯვითი კოეფიციენტი ითვალისწინებს საწარმოო დანაკარგებს პროცესის ყველა სტადიაზე და, აგრეთვე, თანაურ რეაქციებს, თუ ასეთები მიმდინარეობს. თუ $E_{\text{დან}}$ არის პროდუქტის დანაკარგები (დახარჯული რაოდენობის წილებით გამოსახული), მაშინ

$$K_{\text{პრ}}/K_{\text{თ}} = 1 + E_{\text{დან}}$$

პროდუქტის გამოსავალი E თეორიული სიდიდის მიხედვით არის პროცესის სრულყოფის მაჩვენებელი და გამოხატავს მიღებული G პროდუქტის რაოდენობის ფარდობას მის თეორიულ $G_{\text{თეორ}}$ რაოდენობასთან, რომელიც შეიძლება წარმოქმნილიყო იგივე რაოდენობის ნედლეულიდან პროცესის იდეალურად ორგანიზების შემთხვევაში:

$$G/G_{\text{თეორ}}$$

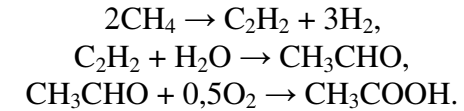
$G_{\text{თეორ}}$ -ს საზღვრავენ პროცესის პირობებში ამოსავალი ნივთიერების წონასწორული გარდაქმნიდან ან პროდუქტად მისი სრული გარდაქმნის მიხედვით, გამორიცხავენ რა თანაური პროდუქტების წარმოქმნას.

პროდუქტის გამოსავლის განსაზღვრაში გაითვალისწინება ამოსავალი ნივთიერების არასრული გარდაქმნა, ხოლო პრაქტიკული ხარჯვითი კოეფიციენტის განსაზღვრაში – ამოსავალი ნივთიერების როგორც არასრული გარდაქმნა, ასევე საწარმოო დანაკარგები.

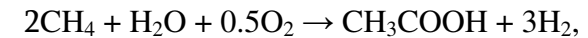
1.2. გაანგარიშების მაგალითი

გამოითვალეთ ხარჯვითი კოეფიციენტი ბუნებრივი აირის მიხედვით აცეტალდეჰიდიდან ძმარმჟავას წარმოებაში. ბუნებრივი აირი შეიცავს 97% (მოც) მეთანს. აცეტილენის გამოსავალი მეთანიდან $E_{\text{აც}}=15\%$, აცეტალდეჰიდის გამოსავალი აცეტილენიდან $E_{\text{ალდ}}=60\%$, ხოლო ძმარმჟავას გამოსავალი აცეტალდეჰიდიდან – $E_{\text{მმ}}=90\%$. ნივთიერებათა მოლეკულური მასები: $\text{C}_2\text{H}_2 - 26$; $\text{CH}_3\text{CHO} - 44$; $\text{CH}_3\text{COOH} - 60$; $\text{CH}_4 - 16$.

ამოხსნა. ძმარმჟავას ლეზულობენ მრავალსტადიანი პროცესით, რომელშიც თანამიმდევრულად მიმდინარეობს შემდეგი რეაქციები:



ეთანის თეორიული ხარჯი 1 ტ ძმარმჟავაზე, გამოთვლილი ბრუტო-რეაქციის



მიხედვით, შეადგენს:

$$K_{\text{CH}_4, \text{თეორ}} = \frac{G_{\text{მმ}} v_{\text{CH}_4} M_{\text{CH}_4}}{v_{\text{მმ}} M_{\text{მმ}}} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 16}{1 \cdot 60} = 0,534 \text{ ტ მეთანი/ტ ძმარმჟავა}$$

გამოვითვალოთ მეთანის პრაქტიკული ხარჯი (ხარჯვითი კოეფიციენტი მეთანის მიმართ K_{CH_4}) სტადიების მიხედვით გამოსავლები გათვალისწინებით:

$$\begin{aligned} K_{\text{CH}_4, \text{პრაქ}} &= \frac{K_{\text{CH}_4, \text{თეორ}}}{E_{\text{აც}} E_{\text{ალდ}} E_{\text{მმ}}} = \frac{0,534}{0,15 \cdot 0,6 \cdot 0,90} = \\ &= 6,59 \text{ ტ მეთანი/ტ ძმარმჟავა} \end{aligned}$$

$$\text{ან } \frac{6,59 \cdot 1000 \cdot 22,4}{M_{\text{CH}_4}} = 9226 \text{ მ}^3 \text{ მეთანი/ტ ძმარმჟავა.}$$

ბუნებრივ აირში მეთანის შემცველობის გათვალისწინებით ვანგარიშობთ მის ხარჯვით კოეფიციენტებს:

$$K_{\text{ბ.ა.}} = \frac{K_{CH_4, \text{პრაქ}}}{C_{CH_4}} = \frac{6,59}{0,97} = 6,79 \text{ ტ ბუნ. აირი/ტ ძმარმჟავა. ანუ}$$

$\approx 9506 \text{ მ}^3 \text{ ბუნებრივი აირი/ტ ძმარმჟავაზე.}$

1.3. ამოცანები

1.3-1. ფანჯრის მინის (სილიკატურის) ქიმიური შედგენილობა გამოიხატება ფორმულით: $Na_2O \cdot CaO \cdot 6SiO_2$, ე. ი. ის შედგება სოდისა – Na_2O , კირქვისა – CaO და ქვიშისაგან – SiO_2 . გამოიანგარიშეთ თეორიული ხარჯვითი კოეფიციენტები ნელეულის მიხედვით, თუ სოდა შეიცავს 93,8% Na_2CO_3 -ს, კირქვა – 90,5% $CaCO_3$ -ს, ხოლო ქვიშა – 99,0% SiO_2 -ს.

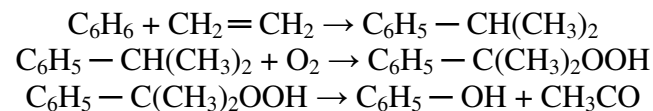
1.3-2. რამდენი რკინის სულფატი $FeSO_4 \cdot 7H_2O$ და ქრომის ანჰიდრიდი CrO_3 იქნება საჭირო 1 ტ ნახშირის ოქსიდის კონვერსიის კატალიზატორის მისაღებად, თუ მისი შედგენილობა ასეთია: 90% Fe_2O_3 , 10% Cr_2O_3 ?

1.3-3. ჩაუმქრალი კირი შეიცავს 94% CaO -ს, 1,2% CO_2 -სა და 4,8% მინარევებს. იგი მიიღება კირქვის გამოწვით, რომელიც 89% $CaCO_3$ -ს შეიცავს. CO_2 ჩაუმქრალ კირში წარმოიქმნება მასში კარბონატების არსებობის გამო, რომელთა რაოდენობასაც განსაზღვრავს კირქვის გამოწვის ხარისხი. განსაზღვრეთ კირქვის ხარჯვითი კოეფიციენტი 1 ტ მოცემული შედგენილობის კირის მისაღებად და კირქვის გამოწვის ხარისხი.

1.3-4. გამოიანგარიშეთ 40% S-ის შემცველი ალმადნის ხარჯი 1 ტ H_2SO_4 -ზე, თუ S-ისა და გოგირდოვანი ანჰიდ-

რიდის დანაკარგები გოგირდმჟავას წარმოებაში 3%-ს შეადგენს, ხოლო აბსორბციის ხარისხი – 99%-ს.

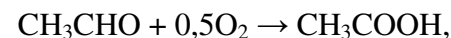
1.3-5. გამოიანგარიშეთ ბენზოლისა და კრეკინგის აირების ხარჯვითი კოეფიციენტები პროპან-პროპილენის ფრაქციის მიხედვით ფენოლის წარმოებისათვის. კრეკინგის აირები შეიცავს 30% (მოც) პროპილენსა და 70% პროპანს. ბენზოლისა და პროპილენისაგან ფენოლის მიღების პროცესი სამი სტადიისაგან შედგება:



ბენზოლიდან იზოპროპილბენზოლის გამოსავალი 90%-ია, ხოლო ფენოლისა იზოპროპილბენზოლიდან – 93%.

1.3-6. გამოიანგარიშეთ ხარჯვითი კოეფიციენტები ტექნიკური კალციუმის კარბიდის წარმოებაში: $CaO + 3C \rightarrow CaC_2 + CO$. ტექნიკური კალციუმის კარბიდის შედგენილობა ასეთია: 78% CaC_2 , 15% CaO , 3% C, სხვა მინარევები – 4%. კირი შეიცავს 96,5% CaO -ს. კოქსში შედის 4% ნაცარი, 4% აქროლალები, 3% ტენი.

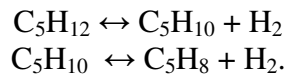
1.3-7. გამოიანგარიშეთ 98% CH_3CHO -ს შემცველი ტექნიკური აცეტალდეჰიდის ხარჯვითი კოეფიციენტი 1 ტ ძმარმჟავას მისაღებად მისი დაჟანგვის პროცესში, რომელიც მიმდინარეობს შემდეგი რეაქციით:



თუ მჟავას გამოსავალი ალდეჰიდის მიხედვით 89,3%-ს შეადგენს.

1.3-8. გამოითვალეთ ხარჯვითი კოეფიციენტები 1 ტ ამონიუმის ფოსფატის $(\text{NH}_4)_3\text{PO}_4$ წარმოებაში. ფოსფორმჟავა 58%-იანია, ხოლო ამიაკი 2% ტენს შეიცავს.

1.3-9. გამოიანგარიშეთ 97%-იანი იზოპენტანის თეორიული და პრაქტიკული ხარჯვითი კოეფიციენტები 1 ტ იზოპრენის წარმოებაში. იზოპენტანის კატალიზური დეჰიდრირების პროცესი ხორციელდება რეაქციებით:



იზოამილენის გამოსავალი 73%-ია, იზოპრენისა კი – 65% (თეორიულთან შედარებით).

II თავი

ქიმიური პროცესების ფიზიკურ-ქიმიური კანონზომიერებები

2.1. სტექიომეტრია ქიმიური პროცესების გაანგარიშებებში

2.1.1. საანგარიშო ფორმულები

მორეაგირე ნარევის შედგენილობა იცვლება რეაქციების სტექიომეტრიული განტოლებების შესაბამისად. სტექიომეტრიული განტოლება გვიჩვენებს რა თანაფარდობებით ურთიერთქმედებენ რეაგენტები ერთმანეთთან; მას ასეთი სახე აქვს:

$$v_A A + v_B B + \dots = v_R R + v_S S + \dots \quad (2.1)$$

ეს განტოლება გვიჩვენებს, რომ A , B რეაგენტები იხარჯება, ხოლო R , S პროდუქტები წარმოიქმნება მათი სტექიომეტრიული კოეფიციენტების v_A , v_B , v_R , v_S და ა. შ. შესაბამისად.

აღსანიშნავია, რომ სტექიომეტრიული განტოლება ჯამურია და შეიძლება არ შეესაბამებოდეს ქიმიური გარდაქმნის მიმდინარეობის ჭეშმარიტ მიმართულებას.

აღვნიშნოთ A , B , R , S ნივთიერებების საწყისი რაოდენობები N_{A0} , N_{B0} , N_{R0} , N_{S0} –ით; მათი მიმდინარე რაოდენობები დროის რომელიმე მომენტისათვის N_A , N_B , N_R , N_S –ით.

სტექიომეტრიული განტოლების შესაბამისად მივიღებთ სტექიომეტრიულ საბალანსო თანაფარდობას

$$\frac{N_{A0} - N_A}{v_A} = \frac{N_{B0} - N_B}{v_B} = \frac{N_R - N_{R0}}{v_R} = \frac{N_S - N_{S0}}{v_S}, \quad (2.2)$$

სადაც $(N_{A0} - N_A)$, $(N_{B0} - N_B)$ არის გარდაქმნილი A და B ნივთიერებების რაოდენობები; $(N_R - N_{R0})$, $(N_S - N_{S0})$ - წარმოქმნილი R და S პროდუქტების რაოდენობები.

განტოლება (2.1) მოსახერხებელია წარმოვადგინოთ ალგებრული გამოსახულების სახით

$$\sum v_i A_i = 0, \quad (2.3)$$

სადაც v_i სტექიომეტრიული კოეფიციენტებია; ამავე დროს $v_i < 0$ ამოსავალი ნივთიერებებისათვის და $v_i > 0$ პროდუქტებისათვის. A_i ნივთიერებათა აღნიშვნაა რომლებიც ურიერთქმედებენ ან წარმოიქმნებიან რეაქციის მიმდინარეობისას. მაშინ:

$$(2.4)$$

სადაც N_i და N_{i0} არის i -ური ნივთიერების რაოდენობა გარდაქმნამდე და გარდაქმნის შემდეგ, შესაბამისად.

თუ გარდაქმნა ერთი სტექიომეტრიული განტოლებით გამოისახება, ასეთ რეაქციას ქიმიურ ტექნოლოგიაში *მარტივი* ეწოდება.

თუ რეაქცია რამდენიმე სტექიომეტრიული განტოლებით გამოიხატება და მიზნობრივთან ერთად თანაური პროდუქტებიც წარმოიქმნება, ასეთ რეაქციას *რთული* ეწოდება.

რთული რეაქცია შედგება რამდენიმე კერძო რეაქციისაგან, რომლებიც შემდეგი ტიპის სტექიომეტრიული განტოლებებით აღიწერება:

$$v_{Aj} A + v_{Bj} B + \dots = v_{Rj} R + v_{Sj} S + \dots, \quad j = 1, \dots, j,$$

$$\text{ან} \quad \sum v_{ij} A_i = 0, \quad (2.5)$$

სადაც ინდექსი j აღნიშნავს j -ურ კერძო რეაქციას.

(2.5) განტოლებაში კოეფიციენტი v_{ij} შეიძლება ნულის ტოლი იყოს, თუ ეს ნივთიერება არ მონაწილეობს მოცემულ რეაქციაში.

რეაგენტებს შორის სტექიომეტრიული რაოდენობრივი კავშირის საფუძველზე შეიძლება ქიმიურ გარდაქმნაში მონაწილე სარეაქციო ნარევის შედგენილობის გამოანგარიშება. ამრიგად, სტექიომეტრიული განტოლება არის მატერიალური ბალანსის შედგენისა და, შესაბამისად, თბური ბალანსისა და ძირითადი ტექნოლოგიური მაჩვენებლების გაანგარიშების საფუძველი.

მატერიალური ბალანსის შესადგენად აუცილებელია გამოვიყენოთ მხოლოდ *სტექიომეტრიული დამოუკიდებელი* განტოლებები, ე. ი. განტოლებათა *მსუქნი* სისტემა, რომელშიც არც ერთი მათგანი არ მიიღება სხვების წრფივი კომბინაციით.

სტექიომეტრიული განტოლებების ბაზისური სისტემა, რომელიც ერთმნიშვნელოვნად და სრულად აღწერს პროცესს, უნდა შეიცავდეს სტექიომეტრიულად დამოუკიდებელ განტოლებებს; მათი რიცხვი:

ჟანგვა-არდგენითი რეაქციებისათვის

$$\delta = \epsilon - \mu;$$

მიმოცვლითი რეაქციებისათვის;

$$\delta = \epsilon - \eta + 1,$$

სადაც δ არის განტოლებათა რიცხვი ბაზისურ სისტემაში; ϵ – ქიმიურ გარდაქმნაში მონაწილე ნივთიერებათა რაოდენობა; η – ქიმიური ელემენტების რიცხვი, რომელთაგანაც შედგება ნივთიერებები.

რადგანაც განტოლებათ რიცხვი δ ნაკლებია ნივთიერებათა ϵ რიცხვზე, კავშირი ყველა ნივთიერებათა რაოდენობებს შორის განისაზღვრება იმ ამოსავალი ნივთიერების – *საკვანძო კომპონენტის* – გარდაქმნის ხარისხის საშუალებით, რომელიც არასაკმარისი რაოდენობით არის აღებული. მაშინ შეიძლება შემოვიტანოთ ამ ნივთიერების x_j გარდაქმნის ხარისხის ცნება.

ნივთიერების გარდაქმნის ხარისხი არის გარდაქმნილი ნივთიერების რაოდენობის შეფარდება მის პირველდაწყებით რაოდენობასთან:

$$x_A = (N_{A0} - N_A)/N_{A0}. \quad (2.6)$$

გამოვიყენებთ რა გარდაქმნის ხარისხის (2.6) განსაზღვრას და (2.4) თანაფარდობას გარდაქმნილი კომპონენტების რაოდენობებს შორის, მივიღებთ განტოლებებს ნებისმიერი ნივთიერების მოლების გასაანგარიშებლად სარეაქციო ნარევეში მარტივი რეაქციების მიმდინარეობის დროს:

$$N_i = N_{i0} - \frac{\nu}{\nu_A \cdot N_A \cdot x_A}$$

ნივთიერების კონცენტრაცია C_i , მოლურ წილებში

$$C_i = N_i / \sum N_i \quad (2.7)$$

სადაც $\sum N_i$ არის ყველა ნივთიერებათა ჯამური რაოდენობა (ინერტულების ჩათვლით, რომლებიც რეაქციაში არ მონაწილეობს).

მარტივი აირფაზური რეაქციისათვის

$$\sum N_i = \sum N_{i0} - \Delta \nu / (\nu_A \cdot N_{A0} \cdot x_A);$$

$$C_i = \frac{C_{i0} + \frac{\nu_i}{\nu_A} C_{A0} x_A}{1 + \frac{\Delta \nu}{\nu_A} C_{A0} x_A}, \quad (2.8)$$

სადაც $DV = \sum \nu_i = \nu_R + \nu_S - \nu_A - \nu_B$ არის რეაქციაში ნივთიერების რაოდენობის ცვლილება.

გარდაქმნის ხარისხი (2.8) განტოლებიდან

$$x_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0} \left(1 + \frac{\Delta \nu}{\nu_A} C_A \right)}. \quad (2.8a)$$

თუ რეაქცია მიმდინარეობს სარეაქციო ნარევის მოცულობის უცვლელად ან არ იცვლება მორეაგირე ნივთიერებების საერთო რაოდენობა, გარდაქმნის ხარისხი შეიძლება გამოითვალოს კონცენტრაციების საშუალებით:

$$x_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}$$

საიდანაც

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

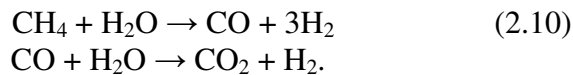
$$C_i = C_{i0} - \frac{v_i}{v_A} C_{A0} x_A, \quad (2.9)$$

სადაც C_{A0} , C_A არის A ნივთიერების საწყისი და მიმდინარე კონცენტრაციები, შესაბამისად; C_{i0} , C_i – i -ური ნივთიერების საწყისი და მიმდინარე კონცენტრაციები, შესაბამისად.

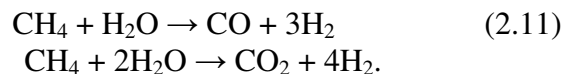
სტექიომეტრიული საბალანსო თანაფარდობები (2.2) შეიძლება ასე წარმოვადგინოთ:

$$\frac{N_{A0} x_A}{v_A} = \frac{N_{B0} x_B}{v_B} = \dots \quad (2.9a)$$

რთული რეაქცია ხელსაყრელია წარმოვადგინოთ ისეთი სტექიომეტრიულად დამოუკიდებელი განტოლებების სისტემის სახით, რომ ყოველი მათგანის მარცხენა ნაწილში იყოს ნივთიერების ერთი და იგივე რაოდენობა. ამის გაკეთება შეიძლება სტექიომეტრიული განტოლებების წრფივი გარდაქმნებით. მაგალითად ორთქლით მეთანის კონვერსიის დროს მიმდინარეობს ორი რეაქცია:



ბაზისური სისტემა მოიცავს ორ სტექიომეტრიულ განტოლებას: $\delta=6-3=3=2$. საკვანძო კომპონენტი არის CH_4 , რომელიც შედის მხოლოდ პირველ სტექიომეტრიულ განტოლებაში. საბალანსო გაანგარიშებებისათვის მოსახერხებელია ორი ასეთი განტოლებით სარგებლობა:



ყოველი სტექიომეტრიული განტოლებისათვის შემოიყვანება საკვანძო კომპონენტის გარდაქმნის ხარისხი x_A როგორც კერძო რეაქციის j -ური ნაწილისათვის. სარეაქციო ნარევეში i -ური ნივთიერების რაოდენობა N_i გამოითვლება განტოლებით:

$$N_i = N_{i0} + \sum (v_{ij}/v_A) N_{A0} x_{Aj}.$$

შემდეგ შეიძლება კონცენტრაციის გამოანგარიშება (2.7) განტოლების გამოყენებით.

ქიმიური პროცესის სხვა მაჩვენებლებია პროდუქტის გამოსავალი და ინტეგრალური სელექციურობა.

პროდუქტის გამოსავალი არის ამ პროდუქტად გარდაქმნილი ამოსავალი ნივთიერების, მაგალითად, A-ს ფარდობითი რაოდენობა.

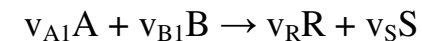
R პროდუქტისათვის

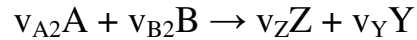
$$\text{მარტივი რეაქციისათვის } E_R = x_A.$$

რთული რეაქციისათვის, როცა ამოსავალი ნივთიერების გარდაქმნა შესაძლებელია რამდენიმე მიმართულებით, $E \neq x_A$, და მიზნობრივი რეაქციის დასახასიათებლად შემოგვაქვს სელექციურობის ცნება.

ინტეგრალური სელექციურობა პროდუქტის მიხედვით არის ამ პროდუქტად გარდაქმნილი ამოსავალი ნივთიერების რაოდენობის ფარდობა გარდაქმნილი რეაგენტის მთელ რაოდენობასთან.

მაგალითად, ორი პარალელური რეაქციისათვის:





ინტეგრალური სელექციურობა R პროდუქტის მიმართ (როცა $N_{R0} = 0$)

$$S_R = (v_{A1}/v_R)N_R(N_{A0} - N_A).$$

ორი თანამიმდევრული რეაქციისათვის



ინტეგრალური სელექციურობა R პროდუქტის მიმართ (როცა $N_{R0} = 0$)

$$S_R = (v_A/v_R)(N_R)/(N_{A0} - N_A).$$

განტოლება, რომელიც ერთმანეთთან აკავშირებს ამოსავალი ნივთიერების გარდაქმნის ხარისხს, პროდუქტის გამოსავალსა და მის ინტეგრალურ სელექციურობას, ასეთია

$$E_R = S_R x_A.$$

სტექიომეტრიული ანგარიშები ასახავს მატერიალური ნაკადების ცვლილებას, რომელიც ხდება მორეაგირე სისტემაში და ამიტომ არის საფუძველი მატერიალური და თბური ბალანსების შესადგენად.

ქიმიური გარდაქმნების დროს იცვლება მორეაგირე სისტემის ენთალპია:

$$v_A A + v_B B + \dots = v_R R + v_S S + \dots - \Delta H. \quad (2.12)$$

(2.12) განტოლებას აგრეთვე თერმოქიმიურ განტოლებას უწოდებენ, რომელიც გვიჩვენებს არა მარტო ურთიერთმო-

ქმედი ნივთიერებების რაოდენობას, არამედ ამ დროს გამოყოფილი (ან შთანთქმული) სითბოს რაოდენობასაც. თუ ენთალპია მცირდება, სითბო გამოიყოფა. ტექნიკაში ხშირად ხმარობენ ცნებას „რეაქციის სითბო“ Q_r , ამასთან $Q_r = -DH$, ასე, რომ

$$v_A A + v_B B + \dots = v_R R + v_S S + \dots + Q_r. \quad (2.13)$$

თუ $Q_r > 0$ ($DH < 0$) რეაქცია ეგზოთერმულია, ხოლო როცა $Q_r < 0$ ($DH > 0$) – ენდოთერმული. ცნობარებში სითბური ეფექტი შეიძლება ორგვარად იყოს მოცემული:

- სითბოს საერთო რაოდენობით, რომელიც გვიჩვენებს რამდენი სითბო გამოიყოფა (შთანთქმება) როცა გარდაიქმნება A ნივთიერების v_A მოლი (ან B ნივთიერების v_B მოლი, ან წარმოიქმნება R ნივთიერების v_R მოლი) (2.13) განტოლების თანახმად.
- სითბოს რაოდენობით, რომელიც გამოიყოფა A ნივთიერების 1 მოლის გარდაქმნის დროს. აღენიშნოთ იგი Q_{rA} -ით. ცხადია, $Q_r = v_A Q_{rA}$. გამოყოფილი სითბოს რაოდენობა Q_r განისაზღვრება გარდაქმნილი ნივთიერების ΔN_A რაოდენობით:

$$Q_r = Q_{rA} \Delta N_A \quad \text{ან} \quad Q_r = Q_{rA} N_{A0} x_A$$

რთული რეაქციის მიმდინარეობის დროს უნდა შეიკრიბოს ყველა კერძო რეაქციის გამოყოფილი სითბო:

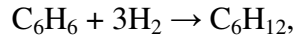
$$Q_r = \sum Q_{rA} N_{A0} x_A.$$

სარეაქციო ნარევის ტემპერატურის ΔT ცვლილება განისაზღვრება $Q_r = VC_p \Delta T$ განტოლებიდან.

აქ $C_{აგ0} = 1$ მოლურ წილს, $C_{აგ} = 0,05$ მოლურ წილს, $Dv = 1$.
 (2.8) ფორმულიდან

$$C_{აგ} = \frac{C_{აგ0} x_{აგ}}{1 + \frac{\Delta v}{v_{აგ}} C_{აგ0} x_{აგ}} = 0,475 \text{ მოლური წილი}$$

მაგალითი 2.1-5. ბენზოლის ჰიდრირების რეაქციისათვის



რომელიც ტარდება რეაგენტების ასეთი მოლური თანაფარდობით $H_2 : C_6H_6 = 10 : 1$, ბენზოლის გარდაქმნის ხარისხი $x_{ბენზ} = 0,95$. გამოიანგარიშეთ ნარევის მოლური შედგენილობა, თუ ბენზოლის საწყისი რაოდენობა $N_{0ბენზ} = 10$ მოლ.

ამოხსნა. რეაქციაში შეუსვლელი ბენზოლის შემცველობა ნარევაში

$$N_{ბენზ} = N_{0ბენზ}(1 - x_{ბენზ}) = 0,5 \text{ მოლ.}$$

წყალბადის გარდაქმნის ხარისხი

$$x_{H_2} = (3/1)(1/10)0,95 = 0,285;$$

წყალბადის საწყისი რაოდენობა

$$N_{H_2,0} = 10N_{ბენზ,0} = 100 \text{ მოლ.}$$

რეაქციაში შეუსვლელი წყალბადის რაოდენობა სარეაქციო ნარევაში

$$N_{H_2} = N_{H_2,0}(1 - x_{H_2}) = 71,5 \text{ მოლ.}$$

ციკლოპექსანის რაოდენობა

$$N_{C_6} = N_{0ბენზ} \cdot x_{ბენზ} = 9,5 \text{ მოლ.}$$

მაგალითი 2.1-6. პარალელური რეაქციებისათვის $2A \rightarrow R$ და $A \rightarrow 4S$, რომლებიც მიმდინარეობს მოცულობის უცვლელად, განსაზღვრეთ A რეაგენტის გარდაქმნის ხარისხი, გამოსავალი და სელექციურობა მიზნობრივი R პროდუქტის მიხედვით, თუ რეაქციის დამთავრების შემდეგ ნივთიერებათა კონცენტრაციებია (კმოლ/მ³): $C_A = 2$; $C_R = 3$; $C_S = 4$.

ამოხსნა. პროცესის მაჩვენებლების გამოსაანგარიშებლად საჭიროა A რეაგენტის საწყისი კონცენტრაციის განსაზღვრა. ვითვალისწინებთ რა რეაქციის სტექიომეტრიას, საბალანსო განტოლებიდან ვპოულობთ, რომ 3 კმოლი R პროდუქტის წარმოქმნისათვის საჭიროა 6 კმოლი A ნივთიერება, ხოლო 4 კმოლი S-ის წარმოქმნისათვის – 0,25. ამრიგად საწყისი კონცენტრაცია იქნება:

$$C_{A0} = 6 + 0,25 + 2 = 8,25 \text{ კმოლ/მ}^3,$$

გარდაქმნის ხარისხი

$$x_A = (C_{A0} - C_A) / C_{A0} = 0,76;$$

პროდუქტის გამოსავალი

$$E_R = v_A C_R / (v_R C_{A0}) = 0,73;$$

სელექციურობა

$$S_R = v_A C_R / [v_R (C_{A0} - C_A)] = 0,96.$$

2.1.3. ამოცანები

2.1-1. აკუმულატორის მჟავა (H_2SO_4 -ის კონცენტრაცია – 92,5%) უნდა გაზავდეს წყლით (H_2SO_4 -ის 38% შემცველობამდე. რამდენი წყალია საჭირო 180 კგ გაზავებული მჟავის მისაღებად?

2.1-2. რამდენი აჯასპის ზეთი (96%-იანი H_2SO_4) და 64%-იანი გოგირდმჟავაა საჭირო 2800 კგ 83%-იანი H_2SO_4 -ის მისაღებად?

2.1-3. სუფრის მარილის ხსნარების, კონცენტრაციით 310 და 230 გ/ლ, რა რაოდენობები უნდა ავიღოთ რომ დავამზადოთ 250 ლ ხსნარი კონცენტრაციით 280 გ/ლ?

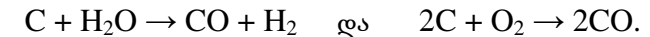
2.1-4. 58%-იანი აზოტმჟავა უნდა გავაზავოთ წყლით 46% კონცენტრაციამდე. რამდენი წყალი იქნება საჭირო 2000 კგ გაზავებული მჟავას მისაღებად?

2.1-5. საწყობში შენახვის დროს 150 კგ ქვანახშირის სინესტე შეიცვალა ა) 8,4-დან 3,9%-მდე; ბ) 0,2-დან 4%-მდე. როგორ შეიცვალა ნახშირის მასა?

2.1-6. 200კგ გოგირდის ალმადნის სინესტე ჰაერზე შენახვისას შეიცვალა 3-დან 6%-მდე (მასური წილი). როგორ შეიცვალა ამ დროს ალმადნის მასა?

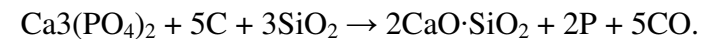
2.1-7. 300 კგ კირის სინესტე ჰაერზე შენახვისას შეცვალა 2-დან 5%-მდე (მასური წილი). როგორ შეიცვალა ამ დროს კირის მასა?

2.1-8. განსაზღვრეთ მურა ნახშირის (70% C, მასური წილი), წყლის ორთქლისა და ჰაერის ხარჯი 1000 მ³ გენერატორის აირის მიღების დროს, თუ მისი შედგენილობა მოც. %-ში: CO – 40, H₂ – 18, N₂ – 42. მყარი სათბობის გაზიფიკაციის პროცესი ორ ძირითად სტადიას მოიცავს:



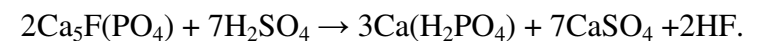
2.1-9. განსაზღვრეთ ხარჯვითი კოეფიციენტები ტექნიკური კალციუმის კარბიდის წარმოებაში, რომელიც შეიცავს წონით %-ში: CaC₂ – 85, CaO – 5, C – 3, მინარევებს – დანარჩენი. კირი შეიცავს 96,5% CaO-ს, დანარჩენი მინარევებია. კოქსი შეიცავს წონით %-ში: ნაცარს – 4, აქროლადებს – 4, ტენს – 3, დანარჩენი ნახშირბადაა. ანგარიში შეასრულეთ 1 ტ პროდუქტზე. რეაქცია: $CaO + 3C \rightarrow CaC_2 + CO$.

2.1-10. გამოიანგარიშეთ ხარჯვითი კოეფიციენტები ფოსფორიტული კონცენტრატის დაშლით 1 ტ ფოსფორის წარმოების დროს. პროცესი აღიწერება განტოლებით:



კონცენტრატი შეიცავს 25% P₂O₅-ს, კოქსი – 94,5% ნახშირბადს; ფოსფორის აღდგენის კოეფიციენტი 0,85%-ია.

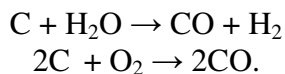
2.1-11. გამოითვალეთ 68%-იანი H_2SO_4 -ის აუცილებელი მოცულობა 39% P₂O₅-ის შემცველი 100 გ აპატიტის კონცენტრატის დასაშლელად. 68%-იანი H_2SO_4 -ის სიმკვრივეა 1,5874 გ/სმ³. დაშლის რეაქცია:



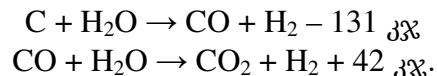
2.1-12 გამოიანგარიშეთ კაზმის შედგენილობა თიხამიწის წარმოებაში, სადაც მას ამზადებენ ბოქსიტის, სოდისა და კირქვის შეცნობის მეთოდით. ამოსავალი ბოქსიტი შეიცავს წონითი %-ით: Al_2O_3 -ს – 50; SiO_2 -ს - 10; Fe_2O_3 -ს – 20. კომპონენტების მთლიანი თანაფარდობა (მოდული) შენაცნობში: $M_1 = Na_3O/(SiO_2+Fe_2O_3) = 1$; $M_2 = CaO/SiO_2 = 2$. კირქვა შეიცავს 90% $CaCO_3$ -ს; ტექნიკური სოდა – 96% Na_2CO_3 -ს. გაანგარიშება ჩაატარეთ 1000 კგ ბოქსიტზე.

2.1-13. განსაზღვრეთ ხარჯვითი კოეფიციენტი ტექნიკური კალციუმის კარბიდის მიხედვით აცეტილენის წარმოებაში. ტექნიკურ პროდუქტში შედის 83% CaC_2 , ხოლო მისი გარდაქმნის ხარისხი არის 0,88.

2.1-14. განსაზღვრეთ მურა ნახშირის (შეიცავს 70% ნახშირბადს, წომითი %), წყლის ორთქლისა და ჰაერის ხარჯი 1000 მ³ გენერატორის აორის მისაღებად, რომელშიც შედის წონითი %-ით: CO – 40, H_2 – 18, და N_2 – 43. გაზიფიკაციის პროცესი მიმდინარეობს რეაქციებით:



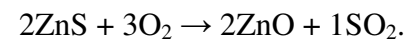
2.1-15. შეადგინეთ 1 ტ კოქსის გაზიფიკაციის პროცესის მატერიალური ბალანსი, რომელიც მიმდინარეობს რეაქციებით:



კოქსი შეიცავს 3% (მასური) ნაცრის მინარევებს; მასური თანაფარდობა ორთქლი/კოქსი=1,5; ნახშირბადის კოქ-

სად გარდაქმნის ხარისხი – 0,98; ნახშირის ოქსიდის გამოსავალი – 0,90. გამოთვალეთ, აგრეთვე, მიწოდებული სითბოს რაოდენობა.

2.1-16. შეადგინეთ მატერიალური ბალანსი და გამოითვალეთ SO_2 -ის გამოსავალი 1000 კგ მადნის გამოწვის დროს, რომელიც შეიცავს 22% (მასური) გოგირდს თუთიის სულფიდის სახით (დანარჩენი უწვადი მინარევებია), თუ გამოსაწვავად მიეწოდება სტექიომეტრიულთან შედარებით 1,5-ჯერ ჭარბი ჰაერი. გამოწვის რეაქცია:



ნამწვში რჩება 0,5% (მასური) გამოუწვავი გოგირდი.

2.1-17. კირქვის გამოწვის დროს წარმოიქმნება შემდეგი შედეგების მყარი პროდუქტი:

	CaO	CO ₂	ბალასტი
I ვარიანტი	92	2,4	დანარჩენი
II ვარიანტი	94	1,2	დანარჩენი

ამოსავალ ნედლეულში $CaCO_3$ -ს შემცველობა (მასური წილი) %-ში: I ვარიანტი – 91; II ვარიანტი – 89.

განსაზღვრეთ კირქვის ხარჯვითი კოეფიციენტი მიზნობრივი პროდუქტის - CaO -ს – მიმართ და $CaCO_3$ -ის გარდაქმნის ხარისხი.

2.1-18. ნამწვი აირი, რომელიც შეიცავს 8% SO_2 -ს, 12% O_2 -სა (მოცულობითი წილი) და დანარჩენ აზოტს დაჟანგვს კატალიზატორზე. SO_2 -ის დაჟანგვის ხარისხი 88%-ია. განსა-

ზღვრეთ აირის პროცენტული შედგენილობა დაჟანგვის შემდეგ.

2.1-19. ბრძმელთან მიყვანილი ჰაერის %-ული (მოცულობითი) შედგენილობა ასეთია: $O_2 - 21,1$; $N_2 - 77,2$; წყლის ორთქლი - 1,6. რამდენი ჟანგბადი უნდა დაემატოს ჰაერს, რომ მისი კონცენტრაცია გაიზარდოს 25%-მდე?

2.1-20. აირნარევი შეიცავს მოლურ წილებსა და მოცულობით %-ში, შესაბამისად H_2 -ს 27,3 (44,9); O_2 -ს - 49,9 (25,4); CO_2 -ს - 5,3 (21,9); N_2 -ს - 17,5 (7,8). ნარევის რაოდენობა 350 კმოლია (2750 კგ). გამოიანგარიშეთ ნარევის საბოლოო შედგენილობა მასურ და მოცულობით %-ებში, თუ მას მოაცილეს 320 კგ (146 მ³) CO_2 , 2900 კგ (280 მ³) O_2 და დაუმატეს 37 კგ (25 კმოლი) მეთანი.

2.1-21. აირნარევის საწყისი მასური და მოცულობითი %-ული შედგენილობაა (შესაბამისად): $CH_4 - 16,5$ (20,7); $C_2H_6 - 9,7$ (22, 9); $O_2 - 44,9$ (18,6); $N_2 - 28,9$ (37,8). ნარევის რაოდენობაა 1000 კგ (1000 მ³). გაიანგარიშეთ მისი საბოლოო მასური და მოცულობითი %-ული შედგენილობა, თუ მოაცილეს: $CH_4 - 105$ კგ (150 მ³); $O_2 - 300$ მ³ (150 კგ); დაუმატეს წყლის ორთქლი - 200 მ³ (100 კგ)?

III თავი

$$u = f(T)\psi(C) \quad (2)$$

ქიმიური რეაქტორები

$$k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}} \quad (3)$$

3.1. შესავალი

ქიმიური რეაქტორის გაანგარიშება ნიშნავს შევარჩიოთ მოცემული პროცესისასთვის მისი მოდელი, განვსაზღვროთ ზომები, რომლებიც აუცილებელი იქნება მოცემული რაოდენობის პროდუქტის მისაღებად. ამისათვის იყენებენ მახასიათებელ განტოლებებს, რომლებიც გამოსახავს ფუნქციონალურ დამოკიდებულებას რეაქტორში რეაგენტების დაყოვნების τ დროსა და სხვა ფაქტორებს შორის:

$$\tau = f(x, C, u) \quad (1)$$

სადაც x არის მოცემული გარდაქმნის ხარისხი;

C - ამოსავალი რეაგენტის საწყისი კონცენტრაცია;

u - ქიმიური რეაქციის სიჩქარე.

განვსაზღვრავთ რა პროცესის ჩატარებისათვის აუცილებელ დროს, შეიძლება გამოვიანგარიშოთ რეაქტორის მოცულობა მოცემული მწარმოებლურობისათვის.

მახასიათებელი განტოლებები ამოიხსნება იმ კინეტიკურ განტოლებებთან ერთად, რომლებიც რეაქტორში მიმდინარე ქიმიურ გარდაქმნებს აღწერს.

სრული კინეტიკური განტოლება წარმოგვიდგენს ქიმიური გარდაქმნის ფუნქციონალურ დამოკიდებულებას რეაგენტის ტემპერატურასა და კონცენტრაციაზე.

ტემპერატურული დამოკიდებულება არენიუსის განტოლებით აღიწერება:

სადაც k არის ქიმიური რეაქციის სიჩქარის კონსტანტა.

კონცენტრაციისაგან დამოკიდებულება განისაზღვრება რეაქციის რიგით (n).

$nA \rightarrow R$ ტიპის მარტივი შეუქცევადი რეაქციისათვის კინეტიკურ განტოლებას ასეთი სახე აქვს:

რეაქტორში ოპტიმალური რეჟიმის შერჩევის, მისი შენარჩუნების მეთოდების დამუშავების, რეაქტორისა და თბომცვლელი აპარატურის გაანგარიშებისათვის აუცილებელია ერთობლივად ამოიხსნას მატერიალური და თბური ბალანსების განტოლებები.

მატერიალური და თბური ბალანსის განტოლებების ერთობლივ ამოხსნაში დამაკავშირებელი რგოლია ზემოთ მოყვანილი სრული კინეტიკური განტოლებები (2; 4). რეაქტორების გაანგარიშების სინთეზულ ფაქტორზე დამოკიდებული: ქიმიური რეაქციის ტიპზე, მის თერმოდინამიკურ ხასიათზე, გარემოსთან თბოცვლის სიჩქარეზე, ნივთიერებისა და სითბოს განაწილებაზე მოცულობაში. ამ რთული ამოცანის გასამარტივებლად რეაქტორების გაანგარიშებას ეცნობიან ორ ეტაპად:

1. რეაქტორებს გაიანგარიშებენ ტემპერატურის გავლენის გაუთვალისწინებლად, იმ კინეტიკური განტოლებების საფუძველზე, რომლებიც გამოხატავს ქიმიური რეაქციის სიჩქარის ფუნქციონალურ დამოკიდებულებას მხოლოდ რეაგენტების კონცენტრაციაზე, ე. ი. $u = f(C_A)$. მიჩნეულია, რომ ამ დროს ტემპერატურული რეჟიმი იზოთერმულია ($T = const$) და, შესაბამისად, ქიმიური რეაქციის სიჩქარის მუდმივა (k) მუდმივა გარდაქმნის მთელი პროცესის განმავლობაში.

2. ქიმიური რეაქტორების გაანგარიშება ტემპერატურის გავლენის გათვალისწინებით სხვადასხვა თბური რეჟიმების დროს.

პირველ ნაწილში მოცემული იქნება ქიმიური რეაქტორების გაანგარიშების მაგალითები ტემპერატურის გავლენის გაუთვალისწინებლად.

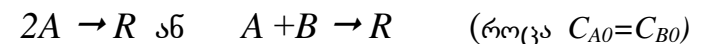
3.1 ცხრილში მოცემულია მატერიალური განტოლებების ზოგიერთი ზოგადი და კერძო ფორმები სხვადასხვა ტიპის რეაქტორებისათვის.

ზოგადი საანგარიშო განტოლებები სამართლიანია როგორც იზოთერმული, ასევე არაიზოთერმული პირობებისათვის, და აგრეთვე ნებისმიერი ქიმიური რეაქციისათვის.

ცხრილის მარჯვენა ნაწილში მოყვანილი განტოლებების გამოყენება შეიძლება მხოლოდ n -ური რიგის მარტივი შეუქცევადი რეაქციებისათვის, რომლებსაც შეესაბამება კინეტიკური განტოლება

იზოთერმული პირობებისათვის, როცა $k = const$.

ნულოვანი, პირველი და მეორე რიგის რეაქციებისათვის ამ განტოლებებს 3.2 ცხრილში მოყვანილი სახე აქვთ და შედარებით ადვილად ამოიხსნებიან ანალიზურად. უნდა აღვნიშნოთ, რომ განტოლებები მეორე რიგის რეაქციებისათვის შეიძლება გამოვიყენოთ მხოლოდ მაშინ, როცა გვაქვს რეაქცია ერთი ამოსავალი რეაგენტით, ან ორი რეაგენტით, რომელთა კონცენტრაციები რეაქტორის შესასვლელში ერთმანეთის ტოლია, ე. ი. შემდეგი ტიპის რეაქციებისათვის:



მეორე რიგის სხვა რეაქციებისათვის განტოლებებს სხვა სახე ექნებათ.

ისეთი რეაქციების შემთხვევაში, რომლებიც უფრო რთული კინეტიკური განტოლებებით აღიწერება, მიზანშეწონილია გრაფიკული ინტეგრირების მეთოდით სარგებლობა. ამისათვის აგებენ გრაფიკს კოორდინატებში $(1/u_A) = f(x_A)$ და ზომავენ ფართობს, რომელიც შემოსაზღვრულია მრუდით, აბსცისთა ღერძით და აბსცისა x_A -ს ცვლილებების შესაბამისი ზღვრებით.

პერიოდული მოქმედების რეაქტორის გაანგარიშებისას უნდა გავითვალისწინოთ, რომ მახასიათებელი განტოლებით განისაზღვრება მუშა დრო, რომელიც უზრუნველყოფს რეაქტორში ჩატვირთული რეაგენტების მოცემულ გარდაქმნის ხარისხს. პროცესის ჩატარების სრული დრო შედგება მუშა დროისა და რეაგენტების ჩატვირთვა-გამოტვირთვაზე დახარჯული დამხმარე დროისაგან:

უწყვეტი მოქმედების რეაქტორებისათვის სარგებლობენ რეაქტორში რეაგენტების დაყოვნების პირობითი დროის ცნებით, რომელიც განისაზღვრება განტოლებით:

სადაც τ არის დაყოვნების დრო;

$V_{რეაქტ}$ – რეაქტორის მოცულობა;

V_0 - სარეაქციო ნარევის რაოდენობა, რომელიც რეაქტორში შედის დროის ერთეულში (რეაგენტების მოცულობითი ხარჯი).

თუ ვისარგებლებთ დამოკიდებულებით მოცულობით და მოლურ ხარჯებს შორის

სადაც B_{A0} არის A რეაგენტის მოლური ხარჯი (მაგალითად, მოლ/სთ);

C_{A0} – A რეაგენტის საწყისი კონცენტრაცია.

(5) განტოლება შეიძლება ასე წარმოვადგინოთ:

რეაქტორის მოცულობის გასაანგარიშებლად, ჩვეულებრივ, იძლევიან მწარმოებლურობას (რეაგენტების მოლურ ან მოცულობით ხარჯს), ხოლო რეაქტორში დაყოვნების დროს საზღვრავენ მოცემული ტიპის რეაქტორის შესაბამისი მახასიათებელი განტოლების მიხედვით (ცხრილები 3.1; 3.2), რის შემდეგაც (5) განტოლებით პოულობენ რეაქტორის მოცულობას.

ამ დამხმარე სახელმძღვანელოში მოცემულია იდეალური რეაქტორების გაანგარიშების მეთოდები ჰომოგენური რეაქციების მაგალითზე.

$$\tau = \frac{V_{რეაქტ}}{V} \quad (5)$$

$$V_0 = \frac{B_{A0}}{C_{A0}} \quad (6)$$

ცხრილი 3.1.

რეაქტორების ტიპები	საანგარიშო განტოლებები	
	ზოგადი	n -ური რიგის მარტივი შეუქცევადი რეაქციისათვის
პერიოდული მოქმედების იდეალური შერევის რეაქტორები პ-იშრ	$\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dx_A}{-u_A}$	$\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$
იდეალური გამოღვენის რეაქტორები იგრ $\tau = \frac{V_r}{V_0}$	$\tau = C_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dx_A}{-u_A}$	<p>ა) მოცულობის უცვლელად, ($\varepsilon_A = 0$)</p> $\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1-X_A)^n}$ <p>ბ) მოცულობის ცვლილებით $\varepsilon_A \neq 0$)</p> $\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \int_0^{X_A} \frac{(1 + \varepsilon_A X_A)^n dX_A}{(1-X_A)^n}$

იდეალური შერევის უწყვეტი მოქმედების რეაქტორები უ-იშრ $\tau = \frac{V_r}{V_0}$	$\tau = C_{A0} \frac{X_A - X_{A0}}{-u_A}$	<p>ა) მოცულობის უცვლელად, ($\varepsilon_A = 0$)</p> $\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \cdot \frac{X_A}{(1-X_A)^n}$ <p>ბ) მოცულობის ცვლილებით $\varepsilon_A \neq 0$)</p> $\tau = \frac{1}{kC_{A0}^{n-1}} \cdot \frac{(1 + \varepsilon_A X_A)^n X_A}{(1-X_A)^n}$
--	---	---

ცხრილი 3.2.

რეაქტორების ტიპები	საანგარიშო ფორმულები სხვადასხვა რიგის მარტივი შეუქცევადი რეაქციებისათვის (იზოთერმული პირობები) ($-u_A = kC_A^n$)		
	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
პ-იშრ	$\tau = \frac{1}{k} C_{A0} X_A$	$\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1-X_A}$	$\tau = \frac{1}{kC_{A0}} \cdot \frac{X_A}{(1-X_A)}$

<p>ივრ</p> $\tau = \frac{V_{\sigma}}{V_0}$	<p>მოცულობის უცვლელად</p> $\tau = \frac{1}{k} C_{A0} X_A$ <p>მოცულობის ცვლილებით</p> $\tau = \frac{1}{k} C_{A0} X_A$	<p>მოცულობის უცვლელად</p> $\tau = \frac{1}{k} \ln \frac{1}{1 - X_A}$ <p>მოცულობის ცვლილებით</p> $\tau = \frac{1}{k} [(1 + \varepsilon_A) \ln \frac{1}{1 - X_A} - \varepsilon_A X_A]$	<p>მოცულობის უცვლელად ($\varepsilon_A = 0$)</p> $\tau = \frac{1}{k C_{A0}} \cdot \frac{X_A}{(1 - X_A)}$ <p>მოცულობის ცვლილებით ($\varepsilon_A \neq 0$)</p> $\tau = \frac{1}{k C_{A0}} [2\varepsilon_A (1 + \varepsilon_A) \ln(1 - X_A) + \varepsilon_A^2 X_A + (\varepsilon_A + 1)^2 \frac{X_A}{1 - X_A}]$
<p>უ-იშრ</p> $\tau = \frac{V_{\sigma}}{V_0}$	<p>მოცულობის უცვლელად</p> $\tau = \frac{1}{k} C_{A0} X_A$ <p>მოცულობის ცვლილებით</p> $\tau = \frac{1}{k} C_{A0} X_A$	<p>მოცულობის უცვლელად</p> $\tau = \frac{1}{k} \cdot \frac{X_A}{1 - X_A}$ <p>მოცულობის ცვლილებით</p> $\tau = \frac{1}{k} \cdot \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)}{1 - X_A}$	<p>მოცულობის უცვლელად ($\varepsilon_A = 0$)</p> $\tau = \frac{1}{k C_{A0}} \cdot \frac{X_A}{(1 - X_A)^2}$ <p>მოცულობის ცვლილებით $\varepsilon_A \neq 0$)</p> $\tau = \frac{X_A (1 + \varepsilon_A X_A)^2}{k C_{A0} (1 - X_A)^2}$