

Χημικές Διεργασίες: Εισαγωγή

Ορολογία

“Μοναδιαίες” Διεργασίες (Unit Processes)

- Οξείδωση
- Υδρογόνωση
- Αφυδρογόνωση
- Πυρόλυση
- Ενυδάτωση
- κλπ

Ορολογία

“Μοναδιαίες” Διεργασίες (Unit Processes)

- Οξείδωση
- Υδρογόνωση
- Αφυδρογόνωση
- Πυρόλυση
- Ενυδάτωση
- κλπ

Διεργασίες μετατροπής με κοινά γνωρίσματα,
αν και υπάρχουν σε πολυποίκιλες παραγωγικές εγκαταστάσεις

Ορολογία

“Μοναδιαίες” Διεργασίες (Unit Processes)

- Οξείδωση
- Υδρογόνωση
- Αφυδρογόνωση
- Πυρόλυση
- Ενυδάτωση
- κλπ

Διεργασίες μετατροπής με κοινά γνωρίσματα,
αν και υπάρχουν σε πολυποίκιλες παραγωγικές εγκαταστάσεις

Μπορούν να μελετηθούν γενικά

Ορολογία

Οι “Μοναδιαίες” Διεργασίες αναλύονται σε απλές ενέργειες.

“Μοναδιαίοι” Χειρισμοί ή Λειτουργίες (Unit Operations)

- Ελάττωση μεγέθους
- Θέρμανση/ψύξη
- Απόσταξη
- Εκχύλιση
- Ξήρανση
- κλπ

Ορολογία

Οι “Μοναδιαίες” Διεργασίες αναλύονται σε απλές ενέργειες.

“Μοναδιαίοι” Χειρισμοί ή Λειτουργίες (Unit Operations)

- Ελάττωση μεγέθους
- Θέρμανση/ψύξη
- Απόσταξη
- Εκχύλιση
- Ξήρανση
- κλπ

Διεργασίες χειρισμού με κοινά γνωρίσματα,
αν και υπάρχουν σε πολυποίκιλες παραγωγικές εγκαταστάσεις

Ορολογία

Οι “Μοναδιαίες” Διεργασίες αναλύονται σε απλές ενέργειες.

“Μοναδιαίοι” Χειρισμοί ή Λειτουργίες (Unit Operations)

- Ελάττωση μεγέθους
- Θέρμανση/ψύξη
- Απόσταξη
- Εκχύλιση
- Ξήρανση
- κλπ

Διεργασίες χειρισμού με κοινά γνωρίσματα,
αν και υπάρχουν σε πολυποίκιλες παραγωγικές εγκαταστάσεις

Μπορούν και αυτές να μελετηθούν γενικά

Ορολογία

Η θεωρητική μελέτη των “μοναδιαίων” διεργασιών και χειρισμών επιτρέπει το σχεδιασμό εγκαταστάσεων με συνδυασμό των παραπάνω “μονάδων”

Όροι που επικράτησαν στα ελληνικά:

Unit Operations

Unit Processes

Ορολογία

Η θεωρητική μελέτη των “μοναδιαίων” διεργασιών και χειρισμών επιτρέπει το σχεδιασμό εγκαταστάσεων με συνδυασμό των παραπάνω “μονάδων”

Όροι που επικράτησαν στα ελληνικά:

Unit Operations → Φυσικές Διεργασίες

Unit Processes

Ορολογία

Η θεωρητική μελέτη των “μοναδιαίων” διεργασιών και χειρισμών επιτρέπει το σχεδιασμό εγκαταστάσεων με συνδυασμό των παραπάνω “μονάδων”

Όροι που επικράτησαν στα ελληνικά:

Unit Operations → Φυσικές Διεργασίες

Unit Processes → **Χημικές Διεργασίες**

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Επίκεντρο της ανάλυσης: **Ισοζύγια**

- μάζας
- ενέργειας (θερμότητα)

Ισοζύγιο Μάζας Φυσικών Διεργασιών

Εισερχόμενα + Εξερχόμενα = Συσσώρευση

(στη μόνιμη κατάσταση -steady state- Συσσώρευση = 0)

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Επίκεντρο της ανάλυσης: Ισοζύγια

- μάζας
- ενέργειας (θερμότητα)

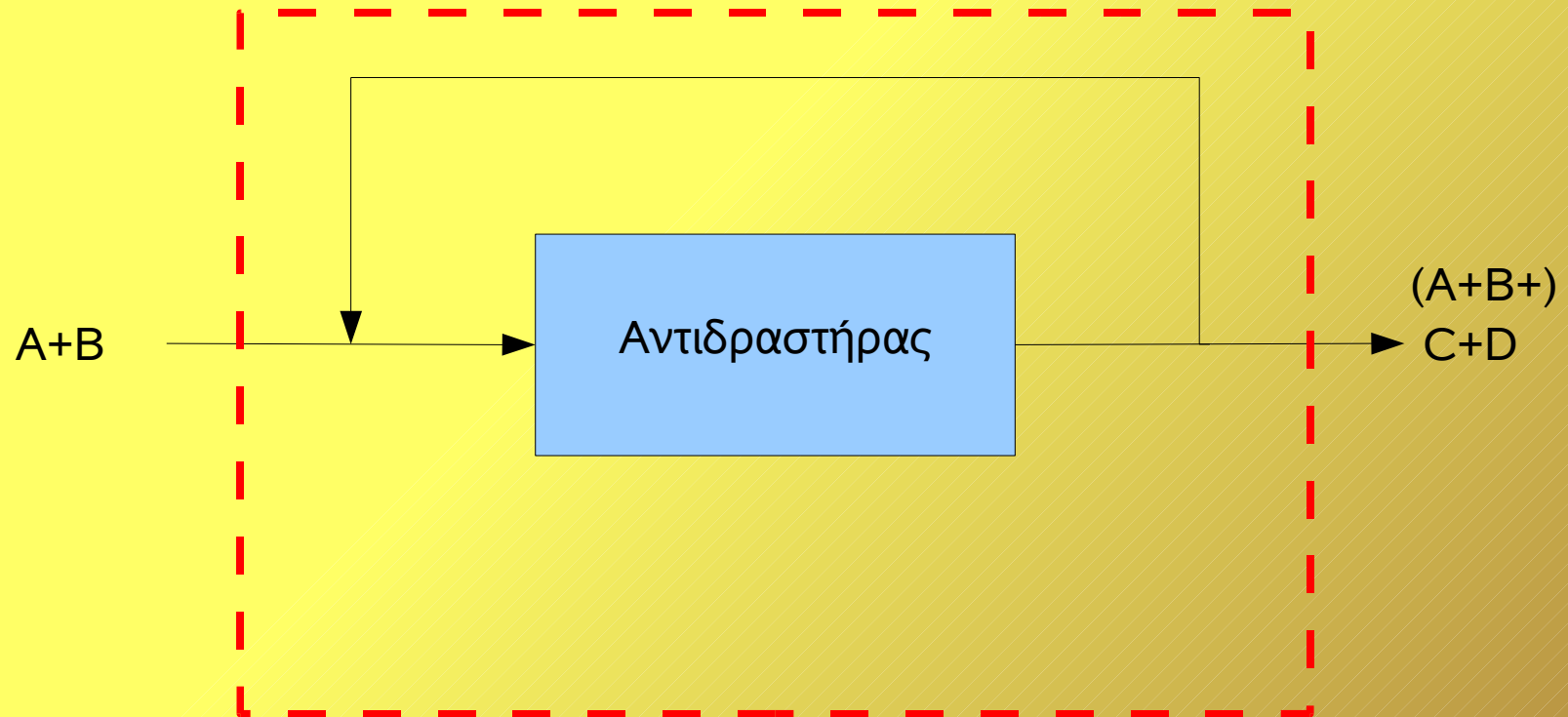
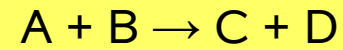
Ισοζύγιο Μάζας **Χημικών** Διεργασιών

Εισερχόμενα + Εξερχόμενα + **Παραγωγή** + **Κατανάλωση** = Συσσώρευση

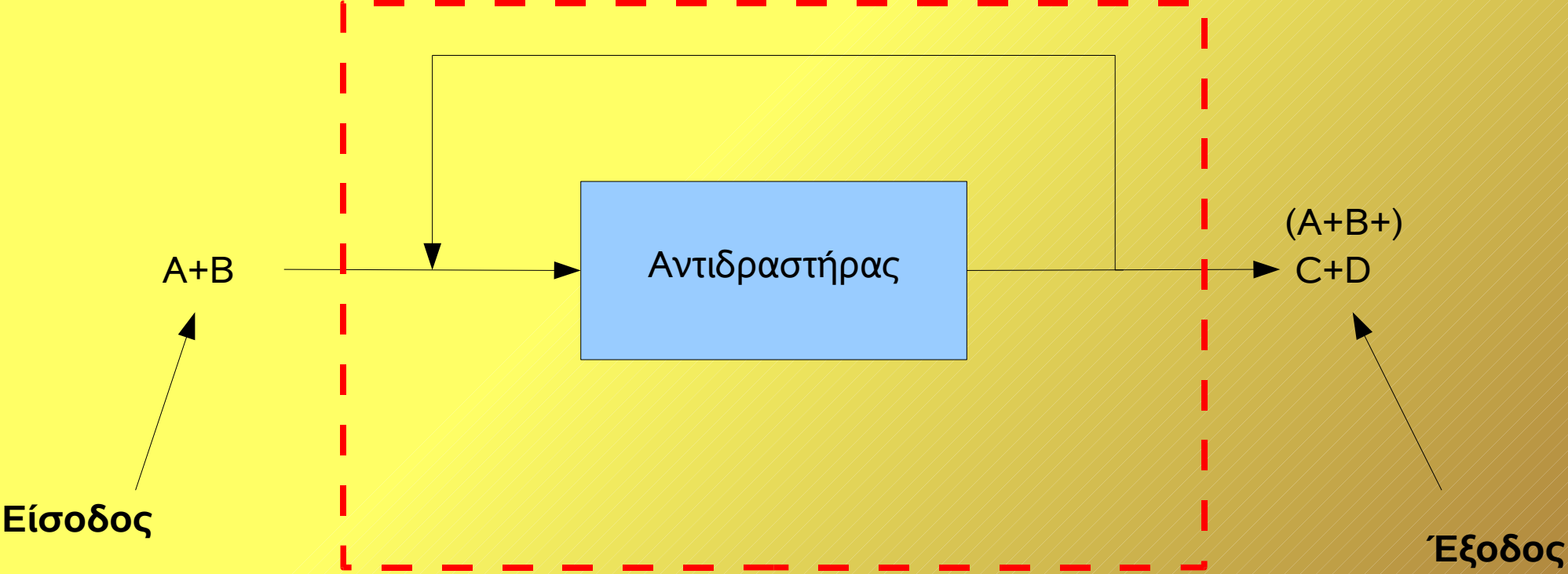
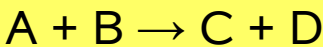
(στη μόνιμη κατάσταση -steady state- Συσσώρευση = 0)

Παραγωγή, κατανάλωση: χημικές αντιδράσεις

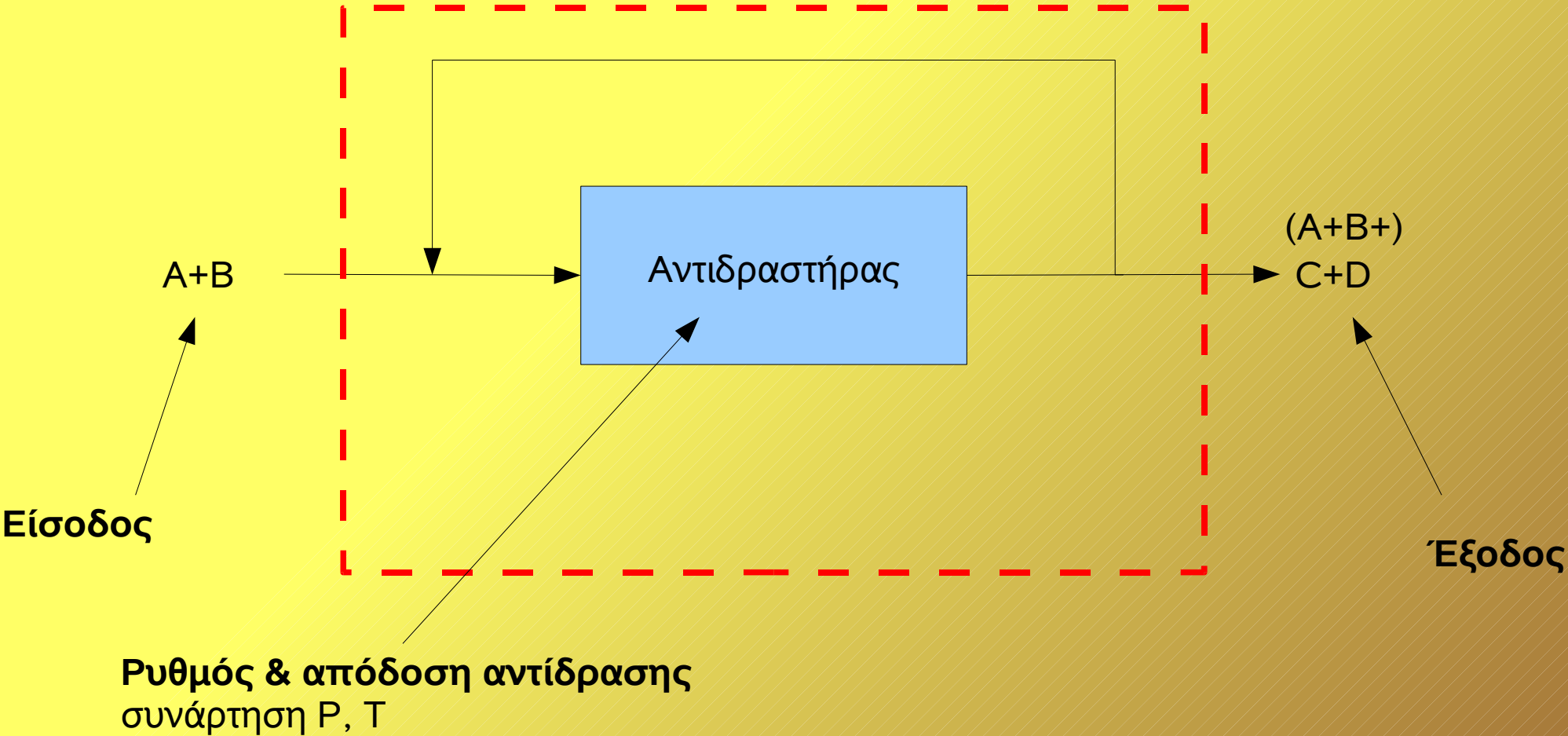
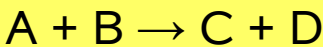
Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες



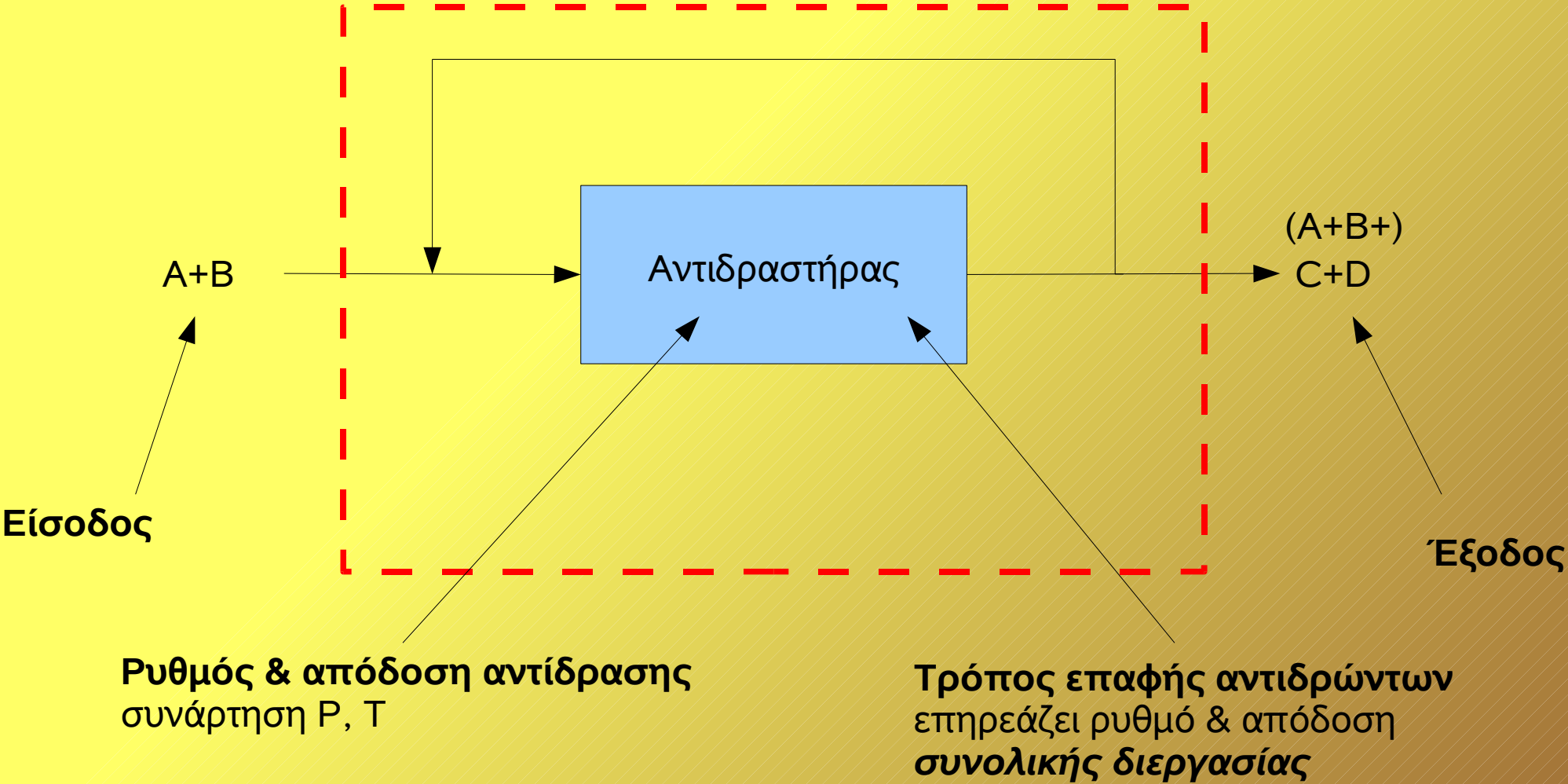
Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες



Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες



Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες
 $A + B \rightarrow C + D$



Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Απόδοση του Αντιδραστήρα:

Έξοδος = f (Είσοδος, Κινητική, Τρόπος αλληλεπίδρασης)

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Απόδοση του Αντιδραστήρα:

Έξοδος = f (Είσοδος, Κινητική, Τρόπος αλληλεπίδρασης)

* **Έξοδος:** ρυθμός και σύσταση εξερχομένων προϊόντων

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Απόδοση του Αντιδραστήρα:

Έξοδος = f (Είσοδος, Κινητική, Τρόπος αλληλεπίδρασης)

- * **Εξοδος:** ρυθμός και σύσταση εξερχομένων προϊόντων
- * **Είσοδος:** ρυθμός, σύσταση εισερχομένων αντιδρώντων

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Απόδοση του Αντιδραστήρα:

Έξοδος = f (Είσοδος, Κινητική, Τρόπος αλληλεπίδρασης)

- * **Έξοδος:** ρυθμός και σύσταση εξερχομένων προϊόντων
- * **Είσοδος:** ρυθμός, σύσταση εισερχομένων αντιδρώντων
- * **Κινητική:** ρυθμός αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα.
 - υψηλός ρυθμός => γνώση χημικής ισορροπίας αρκεί για καθορισμό σύστασης εξόδου
 - χαμηλός ρυθμός => *φαινόμενα μεταφοράς μάζας/θερμότητας* συμμετέχουν στον καθορισμό της εξόδου

Εισαγωγή στις Χημικές Διεργασίες

Απόδοση του Αντιδραστήρα:

Έξοδος = f (Είσοδος, Κινητική, Τρόπος αλληλεπίδρασης)

- * **Εξοδος:** ρυθμός και σύσταση εξερχομένων προϊόντων
- * **Είσοδος:** ρυθμός, σύσταση εισερχομένων αντιδρώντων
- * **Κινητική:** ρυθμός αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα.
 - υψηλός ρυθμός => γνώση χημικής ισορροπίας αρκεί για καθορισμό σύστασης εξόδου
 - χαμηλός ρυθμός => *φαινόμενα μεταφοράς μάζας/θερμότητας* συμμετέχουν στον καθορισμό της εξόδου
- * **Τρόπος αλληλεπίδρασης:** πώς και με τι ρυθμό έρχονται σε επαφή τα αντιδρώντα
 - ομογενή συστήματα
 - ετερογενή συστήματα
 - αντιδραστήρες συνεχούς/διαλείποντος έργου
 - πλήρης ανάμιξη
 - εμβολική ροή

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

* **Ομογενείς** (μία φάση)

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * **Ομογενείς** (μία φάση)
- * **Ετερογενείς** (φάσεις δύο και άνω)

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * Ομογενείς (μία φάση)
- * Ετερογενείς (φάσεις δύο και άνω)
- * Διάκριση **όχι πάντα σαφής!**

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * Ομογενείς (μία φάση)
- * Ετερογενείς (φάσεις δύο και άνω)
- * Διάκριση όχι πάντα σαφής!
 - Αντιδράσεις ενζύμου + υποστρώματος. Περιλαμβάνουν μόρια μεγέθους κολλοειδούς διασποράς

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * Ομογενείς (μία φάση)
- * Ετερογενείς (φάσεις δύο και άνω)
- * Διάκριση όχι πάντα σαφής!
 - Αντιδράσεις ενζύμου + υποστρώματος. Περιλαμβάνουν μόρια μεγέθους κολλοειδούς διασποράς
 - Φλόγα καιόμενου αερίου. Πολύ μεγάλη ανομοιογένεια θερμοκρασίας και σύστασης

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * Ομογενείς (μία φάση)
- * Ετερογενείς (φάσεις δύο και άνω)
- * Διάκριση όχι πάντα σαφής!
 - Αντιδράσεις ενζύμου + υποστρώματος. Περιλαμβάνουν μόρια μεγέθους κολλοειδούς διασποράς
 - Φλόγα καιόμενου αερίου. Πολύ μεγάλη ανομοιογένεια θερμοκρασίας και σύστασης
 - Επιλέγουμε την κατηγορία που πιστεύουμε ότι περιγράφει καλύτερα

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Κατάταξη αντιδράσεων:

- * Ομογενείς (μία φάση)
- * Ετερογενείς (φάσεις δύο και άνω)
- * Διάκριση όχι πάντα σαφής!
 - Αντιδράσεις ενζύμου + υποστρώματος. Περιλαμβάνουν μόρια μεγέθους κολλοειδούς διασποράς
 - Φλόγα καιόμενου αερίου. Πολύ μεγάλη ανομοιογένεια θερμοκρασίας και σύστασης
 - Επιλέγουμε την κατηγορία που πιστεύουμε ότι περιγράφει καλύτερα

Άλλη κατάταξη:

- Καταλυτικά συστήματα
- Μη καταλυτικά

Ο καταλύτης επιταχύνει ή επιβραδύνει χωρίς να είναι ούτε αντιδρόν ούτε προϊόν· στο τέλος μένει σχεδόν αναλλοίωτος.

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

	Μη καταλυτικές	Καταλυτικές
Ομογενείς	Περισσότερες αντιδράσεις στην αέρια φάση	Περισσότερες αντιδράσεις στην υγρή φάση
	Ταχείες αντιδράσεις όπως καύση σε φλόγα	Σε κολλοειδή συστήματα Ενζυμικές/μικροβιακές
Ετερογενείς	Καύση άνθρακα Μεταλλουργία Διάβρωση στερεών από οξέα Απορρόφηση αερίου-υγρού με αντίδραση Αναγωγή iron ore σε σίδηρο και χάλυβα	Σύνθεση αμμωνίας Οξείδωση αμμωνίας προς νιτρικό οξύ Cracking αργού πετρελαίου Οξείδωση SO2 προς SO3

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κινητικής:

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κινητικής:

Στάδιο 1 – συλλογή δεδομένων

- μελέτη της συνολικής κινητικής σε πρότυπο αντιδραστήρα,
- προσδιορισμός των ρυθμών των φυσικών διεργασιών
- αφαίρεσή τους από τον παρατηρούμενο συνολικό για την εύρεση της καθαυτό κινητικής της αντίδρασης.

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κινητικής:

Στάδιο 1 – συλλογή δεδομένων

- μελέτη της συνολικής κινητικής σε πρότυπο αντιδραστήρα,
- προσδιορισμός των ρυθμών των φυσικών διεργασιών
- αφαίρεσή τους από τον παρατηρούμενο συνολικό για την εύρεση της καθαυτό κινητικής της αντίδρασης.

Στάδιο 2 – σχεδιασμός βιομηχανικής κλίμακας

Συνυπολογίζονται:

- υπολογισμένος καθαυτό ρυθμός
- ρυθμοί μεταφοράς μάζας και θερμότητας

Βρίσκεται:

- ρυθμός και απόδοση συνολικής διεργασίας.

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κλίμακας (scale up):

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κλίμακας (scale up):

* Πιλοτικός αντιδραστήρας απολύτως όμοιος με βιομηχανικό (εκτός από μέγεθος)

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κλίμακας (scale up):

* Πιλοτικός αντιδραστήρας απολύτως όμοιος με βιομηχανικό (εκτός από μέγεθος) => εργαστηριακά αποτελέσματα μπορούν να προεκβληθούν σε βιομηχ. κλίμακα χωρίς διαχωρισμό επιμέρους συνεισφορών (μεταφορά θερμότητας, διάχυση, καθαυτό αντίδραση).

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κλίμακας (scale up):

* Πιλοτικός αντιδραστήρας απολύτως όμοιος με βιομηχανικό (εκτός από μέγεθος) => εργαστηριακά αποτελέσματα μπορούν να προεκβληθούν σε βιομηχ. κλίμακα χωρίς διαχωρισμό επιμέρους συνεισφορών (μεταφορά θερμότητας, διάχυση, καθαυτό αντίδραση).

* Συνήθως δύσκολο για τεχνικούς λόγους

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Μελέτη Χημικού Αντιδραστήρα βάσει κλίμακας (scale up):

- * Πιλοτικός αντιδραστήρας απολύτως όμοιος με βιομηχανικό (εκτός από μέγεθος) => εργαστηριακά αποτελέσματα μπορούν να προεκβληθούν σε βιομηχ. κλίμακα χωρίς διαχωρισμό επιμέρους συνεισφορών (μεταφορά θερμότητας, διάχυση, καθαυτό αντίδραση).
- * Συνήθως δύσκολο για τεχνικούς λόγους
- * Μπορεί να παράσχει μια πρώτη χονδρική εκτίμηση

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

* Γενικά: P, T, σύσταση

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

- * Γενικά: P , T , σύσταση

- * Ετερογενή συστήματα: προστίθενται και άλλοι παράγοντες.

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

- * Γενικά: P , T , σύσταση

- * Ετερογενή συστήματα: προστίθενται και άλλοι παράγοντες.
 - αν απαιτείται απομάκρυνση προϊόντος για διατήρηση υψηλού ρυθμού, τότε η μεταφορά μάζας δρα περιοριστικά

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

* Γενικά: P, T, σύσταση

- * Ετερογενή συστήματα: προστίθενται και άλλοι παράγοντες.
 - αν απαιτείται απομάκρυνση προϊόντος για διατήρηση υψηλού ρυθμού, τότε η μεταφορά μάζας δρα περιοριστικά
 - αέριο + στερεό: εξώθερμη => ανισοκατανομή θερμοκρασίας και διαφορετικούς ρυθμούς στο εσωτερικό και στην επιφάνεια

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Παράγοντες που επηρεάζουν το ρυθμό αντίδρασης:

* Γενικά: P, T, σύσταση

* Ετερογενή συστήματα: προστίθενται και άλλοι παράγοντες.

- αν απαιτείται απομάκρυνση προϊόντος για διατήρηση υψηλού ρυθμού, τότε η μεταφορά μάζας δρα περιοριστικά
- αέριο + στερεό: εξώθερμη => ανισοκατανομή θερμοκρασίας και διαφορετικούς ρυθμούς στο εσωτερικό και στην επιφάνεια
- αέριο + στερεό: σχηματισμός επιφανειακού στρώματος οξειδίου εμποδίζει διάχυση αερίου στο εσωτερικό του κόκκου

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Ποσοτική περιγραφή ρυθμού αντίδρασης:

Βάσει μονάδας του όγκου του αντιδρώντος ρευστού

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{mol } i \text{ που σχηματίστηκαν}}{(\text{όγκος ρευστού})(\text{χρόνος})}$$

Βάσει της μονάδας μάζας στερεού σε συστήματα στερεού-ρευστού

$$r'_i = \frac{1}{W} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{mol } i \text{ που σχηματίστηκαν}}{(\text{μάζα στερεού})(\text{χρόνος})}$$

Βάσει της μονάδας εμβαδού διεπιφάνειας σε συστήματα δύο ρευστών ή βάσει μονάδας επιφάνειας στερεού-ρευστού σε συστήματα στερεού-αερίου

$$r''_i = \frac{1}{S} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{mol } i \text{ που σχηματίστηκαν}}{(\text{επιφάνεια})(\text{χρόνος})}$$

Βάσει μονάδας όγκου στερεού σε συστήματα στερεού-αερίου

$$r'''_i = \frac{1}{V_s} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{mol } i \text{ που σχηματίστηκαν}}{(\text{όγκος στερεού})(\text{χρόνος})}$$

Βάσει μονάδας όγκου του αντιδραστήρα, αν διαφέρει από το ρυθμό βάσει μονάδας όγκου ρευστού

$$r''''_i = \frac{1}{V_r} \frac{dN_i}{dt} = \frac{\text{mol } i \text{ που σχηματίστηκαν}}{(\text{όγκος αντιδραστήρα})(\text{χρόνος})}$$

Χημικές Αντιδράσεις – Χημική Κινητική

Ποσοτική περιγραφή ρυθμού αντίδρασης:

- * Ομογενή συστήματα: όγκος ρευστού $\equiv$ όγκος αντιδραστήρα
- * Σχέση μεταξύ διαφόρων ποσοτικών περιγραφών ρυθμού:

$$V r_i = W r'_i = S r''_i = V_s r'''_i = V_r r''''_i$$

- * Εύρος τιμών ρυθμών αντίδρασης: (κλάσματα δευτερολέπτου, χρόνια)
Συχνά (όχι πάντα!):
 - ανόργανες = πλήρους μετατροπής, ταχείες
 - οργανικές = ισορροπία αντιδρώντων/προϊόντων, σχετικά πιο αργές