

AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASI TƏHSİL NAZİRLİYİ

AZƏRBAYCAN DÖVLƏT NEFT VƏ SƏNAYE

UNİVERSİTETİ

**Atayev M.Ş., Hüseynov A.S., Qəzvini K.A.,
Quliyeva S.N.**

TEXNOLOJİ PROSESLƏRİN HESABLANMASI

(Dərs vəsaiti)

**Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye
Universiteti təsdiq etmişdir.**

Əmr № 01-I/18, “07” İyul- 2022

Tallinn- 2022

UOT 665.6.620(07)

Müəlliflər: dosent, t.e.n. Atayev M.Ş., dosent, t.e.n. Hüseynov A.S., assistent Qəzvini K.A., dosent t.ü.f.d. Quliyeva S.N. “Texnoloji proseslərin hesablanması” fənnindən mühazirə dərsləri üçün rəhbərlik. Bakı ADNSU- nin nəşri, 2022, 126 səh.

Redaktor: Rövşen Guliyev Türkiyə Ardahan Universiteti “Ətraf mühit Mühəndisliyi” kafedrasının müdiri, Doc. Dr.

Rəy verənlər:

BQU-nin “Yüksəkmolekullu birləşmələr kimyası” kafedrasının müdiri, kimya elmlər doktoru Rasim Alosmanov Mirəli.

ADNSU-nin Neft-kimya texnologiyası və sənaye ekologiyası kafedrasının dosenti R.K.Babayev

Dərs vəsaiti ADNSU-nin Azİİ e Kitab Evi-nin bibliografi Həsənli Könül İmamverdi qızı tərəfindən korrektə olunmuşdur.

“Texnoloji proseslərin hesablanması” dərs vəsaiti mövcud tədris planına uyğun olaraq 060641-Kimya mühəndisliyi ixtisası üzrə magistratura təhsil səviyyəsi üçün hazırlanmışdır. Dərs vəsaiti texnoloji proseslərin maddi hesabının əsasları, sərf əmsalları, texnoloji proseslərin tarazlığı, tarazlıq sabiti, texnoloji proseslərin istilik hesabı, texnoloji proseslərin kinetikasi, temperaturun reaksiya sürətinə təsiri, kinetik parametrlərin hesabı, optimal temperaturun təyini, reaktorların əsas riyazi modelləri, heterogen katalitik proseslər, katalitik reaktorların hesabının xüsusiyyətləri, kütlə mübadiləsi proseslərinin hesabının əsasları, kütlə mübadiləsi avadanlıqları

və onların konstruksiyası, elektrokimyəvi proseslərin hesabının əsasları bölmələrini özündə birləşdirməklə müasir mühəndislik elminin öyrənilməsində xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Təqdim edilən dərəcə vəsaitinin 060641- Kimya mühəndisliyi ixtisası üzrə magistratura təhsil səviyyəsində mühəndislik vərdişlərinin aşılmasında müstəsna vasitə olması imkanları vardır. Vəsaitdən uyğun ixtisaslarda təhsil alan tələbələr, mühəndislər, layihə işlərini yerinə yetirən mütəxəssislər istifadə edə bilər.

MÜNDƏRİCAT

Səh.

GİRİŞ	6
1. Texnoloji proseslərin maddi hesabının əsasları.....	8
2. Sərf əmsalları	10
3. Texnoloji proseslərin tarazlığı. tarazlıq sabiti.....	14
4. Texnoloji proseslərin istilik hesabı.....	20
5. Texnoloji proseslərin kinetikası.....	26
6. Temperaturun reaksiya sürətinə təsiri.....	36
7. Kinetik parametrlərin hesabı	40
8. Optimal temperaturun təyini.....	44
9. Reaktorların əsas riyazi modelləri.....	50
10. Heterogen katalitik proseslər.....	83
11. Katalitik reaktorların hesabının xüsusiyyətləri.....	92
12. Kütlə mübadiləsi proseslərinin hesabının əsasları.....	96
13. Kütlə mübadiləsi avadanlıqları və onların konstruksiyası.....	101
14. Elektrokimyəvi proseslərin hesabının əsasları.....	119
ƏDƏBİYYAT	123

GİRİŞ

Son illərdə ölkəmizdə motor yanacaqları, habelə kimya, neft kimyası və mikrobiologiya sənayesi üçün xammal istehsalının xeyli artırılması, sürtkü yağları keyfiyyətinin yaxşılaşdırılması, onların istehsalının genişləndirilməsi neft-kimya sənayesinin qarşısında duran əsas prioritet məsələlərdir.

Qeyd etmək lazımdır ki, kimya, neft emalı, neft-kimya sənayesində müxtəlif kimyəvi-texnoloji proseslərin həyata keçirilməsi ilə xeyli sayda məhsullar alınır. Bu proseslər içərisində emal edilən maddənin kimyəvi çevrilməsi və ya fiziki-kimyəvi xassələrinin dəyişməsi ilə gedən proseslərə kimyəvi-texnoloji proseslər deyilir.

Kimyəvi-texnoloji proseslərin aparılması zamanı müxtəlif aparatlardan və maşınlardan istifadə olunur. Prosesin getməsi üçün istifadə edilən quruluş aparat adlanır, verilən enerjini faydalı işə çevirən mexanizm isə maşın adlanır. Hazırkı vəsaitdə müxtəlif kimya texnologiyaya sahələrində tətbiq və istifadə edilən proseslərin nəzəri əsasları verilmiş və hesablanması üsulları müvafiq aparatlar üçün müəyyənləşdirilmişdir.

Bütövlükdə neft-kimya texnologiyası insanlara zəruri olan məhsullar istehsalı və o cümlədən səmərəli istehsal prosesləri yaradılması ilə məşğul olan bir sahədir. “Texnoloji proseslərin hesablanması” fənni neft-kimya texnologiyası sahəsində konkret mühəndis məsələlərinin həll edilməsini, texnoloji prosesləri və onların qarşılıqlı əlaqələrini, texnoloji proseslərin tipik qanunauyğunluqlarını öyrənir. Tələbə fənni öyrənməklə mühüm əhəmiyyət kəsb edən hesablama metodlarını mənimsəyir və onları tətbiq etmək bacarığını əldə edir. Mühəndislik elmləri içərisində xüsusi əhəmiyyəti olan “Texnoloji proseslərin hesablanması” fənni yeni texnoloji proseslərin yaradılmasında, mövcud texnoloji proseslərin daha da təkmilləşdirilməsində, layihələndirmə işlərinin hesablama hissəsinin yerinə yetirilməsində tətbiq oluna bilər.

Texnoloji proseslərin hesablanması istənilən kimya istehsalının layihə edilməsində daha çox zəhmət tələb edən hissəni təşkil edir. Eyni zamanda texnoloji proseslərin hesablanması laboratoriya tədqiqatının yekun mərhələsi olmaqla mövcud qurğuların tədqiq edilməsində də istifadə olunur. Belə hesablamaların məqsədi istehsalın optimal parametrlərinin və kinetik sabitlərin təyin edilməsi və ya reaksiya həcmələrinin və kimyəvi reaktorların əsas ölçülərinin hesablanması kimi məsələlərdən ibarət olur [1].

Ölkə iqtisadiyyatının müasir inkişaf mərhələsində buraxılan məhsulların keyfiyyətinin yüksəldilməsi və növlərinin çoxaldılması, ətraf mühiti qorumaq üçün tullantısız texnoloji proseslərin yaradılması, sənayeyə mütərəqqi texnoloji proseslərin tətbiq edilməsi, zavod avadanlığının etibarlılığının artırılması, mövcud proseslərin intensivləşdirilməsi, həmçinin texniki göstəricilərinin yaxşılaşdırılması, eyni zamanda sosial-iqtisadi əhəmiyyətə malik olan məsələlərin həll edilməsində hazırkı vəsaitin xüsusi rolu vardır. Bununla əlaqədar olaraq kimya, neft emalı və neft-kimya sənayesinin yüksək ixtisaslı mühəndis-texniki kadrların yetişdirilməsində vəsaitin müstəsna əhəmiyyəti olacaqdır.

Yüksək ixtisaslı mütəxəssislər hazırlanmasında “Texnoloji proseslərin hesablanması” kursu mühüm yer tutur.

Ümidvarıq ki, “Texnoloji proseslərin hesablanması” fənninin mənimsənilməsində bu dərs vəsaiti tələbələrə yardım göstərəcəkdir.

1. TEXNOLOJİ PROSESLƏRİN MADDİ HESABININ ƏSASLARI

Maddi hesablamalar istilik hesablamaları ilə yanaşı texnoloji hesablamaların əsasını təşkil edir. Onlara əsas və yanaşı məhsulların çıxımını, xammal üzrə sərf əmsallarını, istehsal itkilərini aid etmək olar. Yalnız maddi axınları müəyyən etməklə istehsalın avadanlıqları və kommunikasiyaların zəruri konstruktiv hesablamalarını aparmaq, prosesin iqtisadi səmərəliliyini və məqsədə uyğun olmasını qiymətləndirmək olar [2].

Maddi balansın tərtib edilməsi isə həm layihə edilən yeni istehsal üçün, həm də mövcud istehsalın işinin analizi zamanı onun üçün zəruridir. Yeni istehsalın layihə edilməsi zamanı mövcud olan istehsalın təcrübəsindən və müasir tədqiqatların nəticələrindən istifadə olunur.

Mövcud olan istehsalın texniki-iqtisadi analizinin müqayisəsi əsasında daha səmərəli texnoloji sxem, aparatların optimal konstruksiyasını və prosesin daha səmərəli həyata keçirilmə şərtini seçmək olar.

Maddi balans sol tərəfi emala daxil olan bütün xammal və materialların, sağ tərəfi isə alınan məhsulların və sənaye itkilərinin kütləsindən ibarət olan tənlik şəklində verilə bilər:

$$\sum G_{ig} = \sum G_{iç} + G_{itki} \quad (1.1)$$

Burada, G_{ig} - prosesə daxil olan bütün xammal və materialların,

$G_{iç}$ - prosesdən çıxan məhsulların, G_{itki} - sənaye itkilərinin kütləsidir.

Maddi balansın əsasını kütlənin saxlanması qanunu və stexiometrik nisbətlər təşkil edir.

Qeyd etmək lazımdır ki, maddi balans əsas məhsulun kütlə vahidinə görə və vahid zamana görə tənliklər, cədvəllər, diaqramlar şəklində tərtib olunur.

Nəzəri maddi balans reaksiyanın stexiometrik tənliyi əsasında hesablanır. Bunun üçün reaksiya tənliyini və komponentlərin molekul kütlələrini bilmək kifayətdir.

Praktiki maddi balans tərtib olunduqda başlanğıc xammalın və hazır məhsulun tərkibi, xammalın komponentlərinin hər hansı birinin izafi miqdarda olması, çevrilmə dərəcəsi, xammal və hazır məhsulun itkiləri nəzərə alınır.

Maddi balansın dəlilləri əsasında aparatın, sexin məhsuldarlığına görə xammal və köməkçi materialların sərfini, məhsulun maya dəyərini, məhsulların çıxımını, reaksiya zonasının həcmi, reaktorların sayını, istehsalat itkilərini tapmaq mümkündür.

Maddi balans əsasında yanacağa olan tələbatı, istilik mübadilə səthinin sahəsini, istilikdaşıyıcı və soyuducu agentlərin sərfini müəyyən etməyə imkan verən istilik balansı tərtib olunur.

2. SƏRF ƏMSALLARI

Müxtəlif xammal növlərinin, suyun, yanacaq, elektrik enerjisinin, buxarın istehsal edilən məhsulun vahid miqdarına düşən sərfini xarakterizə edən kəmiyyətlərə sərf əmsalları deyilir.

Aparatların konstruksiya edilməsi və texnoloji rejim parametrlərinin müəyyən edilməsi zamanı şərait elə planlaşdırılır ki, prosesin yüksək məhsuldarlığı və intensivliyi məhsulun yüksək keyfiyyəti və mümkün olan daha aşağı maya dəyəri ilə uzlaşsın.

Məhsul vahidinin hazırlanmasına və satışına müəssisə tərəfindən çəkilən xərclərin pul ilə ifadəsi maya dəyəri adlanır.

Maya dəyərinin kalkulyasiyasının, daha doğrusu, məhsul vahidinə çəkilən xərclərin hesablanması üçün xərc maddələri, o cümlədən xammal, material, yanacaq və enerji üzrə sərf əmsalları onların qiymətləri nəzərə alınmaqla müəyyən edilir və kalkulyasiya hesablanır [3].

Sərf əmsalları kiçik olduqca proses o qədər qənaətli olur və məhsulun maya dəyəri də aşağı olur. Lakin sərf əmsallarının müəyyən olunmuş minimum həddən aşağı salınması ilkin materialların təmizliyinin, ayrılma dərəcəsinin, məhsulun çıxımının yüksəldilməsi zərurəti ilə əlaqədardır ki, bu da əhəmiyyətli xərclər tələb etdiyi üçün məhsulun maya dəyərinin yüksəlməsinə gətirib çıxara bilər.

Xammal üzrə sərf əmsalları mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Belə ki, kimya istehsalının böyük əksəriyyətində məhsulun maya dəyərində bu maddə 60-70% təşkil edir.

Sərf əmsallarını hesablamaq üçün texnoloji prosesin ilkin xammalın hazır məhsula çevrilməsinin baş verdiyi bütün mərhələlərini bilmək zəruridir.

Nəzəri sərf əmsallarında xammalın məhsula çevrilməsinin stexiometrik nisbəti nəzərə alınır. Praktiki sərf

əmsallarında isə bundan başqa prosesin bütün mərhələlərində istehsalat itkiləri, həmçinin yanaşı reaksiyalar nəzərə alınır.

Eyni bir məhsul üçün sərf əmsalları xammalın tərkibindən asılı olaraq bir-birindən fərqlənə bilər.

Ona görə də istehsal və xammal bir-birindən ayrı olduğu hallarda bu və ya digər xammalın istifadə olunmasının iqtisadi cəhətdən məqsədəuyğunluğunu müəyyən etmək məqsədi ilə sərf əmsalları üzrə ilkin qiymətləndirmə zəruridir.

Sərf əmsallarının hesalanmasına aydınlıq gətirmək üçün bir sıra nümunələrə baxaq:

1.Çuqunun əridilərək tökülməsi prosesində tərkibində boş süxur və qarışıq olmaması şərti ilə 92% Fe olan aşağıdakı dəmir filizləri üçün nəzəri sərf əmsallarını müəyyən etməli;

Şpat dəmir filizi $FeCO_3$	mol.küt.	115,8
Limonit $2Fe_2O_3 \cdot 3H_2O$	--“---	373
Qetit $2Fe_2O_3 \cdot 2H_2O$	--“---	355
Qırmızı dəmir filizi Fe_2O_3	--“---	159,7
Maqnit dəmir filizi Fe_2O_4	--“---	231,5

1 kmol $FeCO_3$ -dən 1 kmol Fe və ya 115,8 kq $FeCO_3$ -dən 55,9 kq Fe almaq mümkündür. Buradan tərkibi 92% Fe-dən ibarət olan çuqun almaq üçün $(1 \cdot 0,92 \cdot 115,8) / 55,9 = 1,9$ t şpat dəmir filizi $FeCO_3$ lazımdır.

Uyğun qaydada digər filizlər üçün də nəzəri sərf əmsallarını müəyyən edirik:

$$(1 \cdot 0,92 \cdot 373) / 4 \cdot 55,9 = 1,55 \text{ t limonit } 2Fe_2O_3 \cdot 3H_2O,$$

$$(1 \cdot 0,92 \cdot 355) / 4 \cdot 55,9 = 1,45 \text{ t Qetit } 2Fe_2O_3 \cdot 2H_2O,$$

$$(1 \cdot 0,92 \cdot 159,7) / 2 \cdot 55,9 = 1,33 \text{ t Qırmızı dəmir filizi } Fe_2O_3,$$

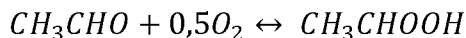
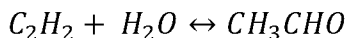
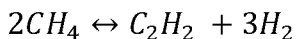
$$(1 \cdot 0,92 \cdot 231,5) / 3 \cdot 55,9 = 1,28 \text{ t Maqnit dəmir filizi } Fe_2O_4$$

lazımdır.

2. Asetaldehiddən sirkə turşusunun istehsalında tərkibində 97% metan (həcm ilə) olan təbii qazın sərf əmsalını hesablamalı.

Asetilenin metandan çıxımı nəzəri mümkün olana nisbətən 15%, asetaldəhidin asetiləndən çıxımı 60%, sirkə turşusunun asetaldehiddən çıxımı 90% (kütlə ilə) təşkil edir.

Məlumdur ki, sirkə turşusu metandan çox mərhələli üsulla alınır. Sxematik olaraq prosesi aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:



$$\text{Mol. kütlələri: } C_2H_2 - 26; CH_3CHO - 44;$$

$$CH_3COOH - 60; CH_4 - 16.$$

1t sirkə turşusu üçün metanın nəzəri sərfi

$$(1000 \cdot 2 \cdot 16) / 60 = 534 \text{ kq təşkil edir.}$$

Mərhələlər üzrə məhsul çıxımını nəzərə alsaq,

$534 / (0,9 \cdot 0,6 \cdot 0,15) = 6590$ kq və yaxud

$(6590 \cdot 22,4) / 16 = 9226$ m³ CH₄

$9226 / 0,97 = 9500$ m³ təbii qaz təşkil edir.

3. TEXNOLOJİ PROSESLƏRİN TARAZLIĞI. TARAZLIQ SABİTİ

Prosesə daxil olan maddələrin arasında baş verən kimyəvi qarşılıqlı təsir-düzünə gedən reaksiya ilə yanaşı reaksiya məhsulları arasında da qarşılıqlı təsir-əks istiqamətdə gedən reaksiya da baş verir.

Düzünə gedən reaksiyanın sürəti prosesin gedişində azalmağa başlayır, bu zaman əks istiqamətdə gedən reaksiyanın sürəti artır. Bu sürətlərin bərabərliyi halında reagentlərin qatılıqlarının, temperaturun və təzyiqin sabit şəraitində dəyişməz kimyəvi tarazlıq başlayır [3].

Reaksiya üçün kütlələrin təsiri qanununa əsasən



Düzünə gedən reaksiyanın sürəti üçün

$$u_1 = k_1[A]^m[B]^n$$

Əks istiqamətdə gedən reaksiyanın sürəti üçün isə

$$u_2 = k_2[C]^p[D]^q$$

Tarazlıq halında isə aşağıdakı nisbət yaranır:

$$[C]^p[D]^q/[A]^m[B]^n = k_1/k_2 = K$$

və yaxud

$$[A]^m[B]^n/[C]^p[D]^q = k_2/k_1 = K' = 1/K \quad (3.1)$$

burada, K-tarazlıq sabitidir. Verilən reaksiya üçün onun qiyməti temperaturdan asılı olaraq dəyişir.

Tarazlıq sabitinin temperaturdan asılılığı Vant-Hoff tənliyi ilə müəyyən olunur:

$$d \ln K_p / dT = q_p / RT^2 \quad (3.2)$$

burada, q_p - reaksiyanın istilik effektidir. Onun temperaturdan asılılığı Kirxhof tənliyi ilə müəyyən olunur.

Tarazlıq sabitinin temperaturdan asılılığını hesablamaq üçün $q_p = f(T)$ -nin qiymətini (3.2) tənliyində nəzərə alırıq və inteqrallamadan sonra sabit inteqrallama ilə sona çatan üstlü sıra əldə edirik.

Xammal və son məhsullardan ibarət olan reagentlərin qatılıqlarının hansı vahidlərlə ifadə olunmasından asılı olaraq tarazlıq sabiti aşağıdakı tənliklə müəyyən edilə bilər:

$$K_c = [C_c]^p [C_D]^q / [C_A]^m [C_B]^n \quad (3.3)$$

(3.3) tənliyində qatılıqlar mol/dm³, k mol/m³ ilə ifadə edilmişdir.

$$K_p = [P_c]^p [P_D]^q / [P_A]^m [P_B]^n \quad (3.4)$$

Burada isə qatılıqlar parsial təzyiqlərlə, Pa, kN/m² ifadə edilmişdir.

$$K_N = [N_c]^p [N_D]^q / [N_A]^m [N_B]^n \quad (3.5)$$

(3.5) tənliyində qatılıqlar % ilə (mol və ya həcmi) ifadə edilmişdir.

K_c , K_p , K_N aşağıdakı asılılıq mövcuddur:

$$K_c = K_p / RT^{\Delta N} = K_p / PV^{\Delta N} = K_N / V^{\Delta N} \quad (3.6)$$

burada, $\Delta N = v_1 - v_2$, $v_1 = q + p$; $v_2 = m + n$; R-universal qaz sabitidir.

İdeal qaz qarışığı üçün K_p təzyiqdən asılı deyil. Real qazlar olduqda isə o təzyiqdən asılı olur. Tədqiqatlar yolu ilə müəyyən olunmuşdur ki, yüksək təzyiq altında həyata keçirilən proseslərdə tarazlıq sabiti təzyiqin artması ilə azalır. Bu halda tarazlıq sabitinin hesablama tənliyinə təzyiqə görə düzəliş əmsalı (β) əlavə edilir. Məsələn, yüksək təzyiq altında həyata keçirilən ammoniyakın sintezi prosesi üçün müxtəlif təzyiqlərdə tarazlıq sabiti, β əmsalı və temperaturun inteqrallanması sabiti arasında qarşılıqlı əlaqə müəyyən olunmuşdur [4].

Yüksək təzyiq şəraitində tarazlıq sabitini komponentlərin uçuculuqları əsasında da hesablamaq mümkündür. Real qazların yüksək təzyiqlərdə ideal haldan kənarlaşması maddənin aktivliyi kəmiyyəti ilə xarakterizə oluna bilər.

Maddənin aktivliyi standart haldan tarazlıq halına keçən bir mol maddənin Hibbs enerjisini müəyyən edir. Maddənin aktivlik əmsalı γ uçuculuqla f mütənasibdir:

$$\gamma = f/P$$

Aşağı təzyiqlərdə uçuculuğu təzyiqə bərabər götürmək olar. Uçuculuq real qazın ideal qazdan fərqlənməsini xarakterizə edir. Real qazlar üçün ideal qaz tənliyində təzyiqin əvəzinə uçuculuğun qiymətini qoymaq olar. Qazın aktivlik əmsalının γ qiyməti həmçinin qazın sıxılma əmsalından c asılıdır:

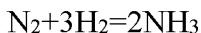
$$C = PV/RT \quad \text{və ya} \quad V = CRT/P$$

Real sistemlər üçün təzyiq $(30-40) \cdot 10^4$ Pa-dan çox olduqda tarazlıq sabiti aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$K_f = K_\gamma P \quad (3.7)$$

K_f əmsalı təzyiqdən asılı deyil. K_p əmsalı isə tarazlıqda olan real qaz qarışığı üçün təzyiqdən asılı olur və təzyiqin azalması ilə K_f əmsalının qiymətinə yaxınlaşır. Belə ki, təzyiqin azalması ideal hala yaxınlaşmanı göstərir.

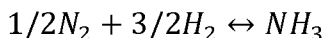
Ammonyakın sintezi reaksiyası üçün



K_p və K_f əmsalları aşağıdakı tənliklərlə ifadə edilə bilər:

$$K_p = P_{NH_3}^2 / P_{N_2} \cdot P_{H_2}^3 \quad \text{və} \quad K_f = f_{NH_3}^2 / f_{N_2} \cdot f_{H_2}^3 \quad (3.8)$$

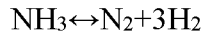
Tarazlıq sabitinin qiyməti reaksiyanın stexiometrik tənliyinin şəklindən asılıdır. Belə ki, ammonyakın sintezi üçün reaksiya tənliyinin şəklini götürsək:



Tarazlıq sabiti üçün başqa bir kəmiyyət alarıq:

$$K'_p = P_{\text{NH}_3} / P_{\text{N}_2}^{1/2} \cdot P_{\text{H}_2}^{3/2} = \sqrt{K_p} \quad (3.9)$$

Əgər dissosiasiya tənliyini yazsaq:



onda,

$$K''_p = P_{\text{N}_2} \cdot P_{\text{H}_2}^3 / P_{\text{NH}_3}^2 = 1 / K_p \quad (3.10)$$

alarıq.

Göründüyü kimi eyni bir reaksiyanın müxtəlif variantlarda yazılışı və eyni bir tarazlıq sabitinin müxtəlif ədədi qiymətlərinin olması mümkündür. Ona görə də tarazlıq sabitinin ədədi qiymətinin yazılışı müvafiq reaksiya tənliyinin və tarazlıq sabitinin yazılışı ilə müşayiət olunmalıdır.

Texnoloji hesablamalar zamanı tarazlıq sabitini çox zaman izotermik potensiallar – sabit təzyiqdə G və sabit həcmdə F Hibbs enerjisi vasitəsi ilə müəyyən edirlər. Standart şəraitdə (qaz şəkilli komponentlərin aktivliyi $\gamma=1$) kəmiyyətçə tarazlıq sabitini müvafiq izotermik potensialın dəyişməsi ilə əlaqələndirən reaksiyanın izoterm tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_p \quad (3.11)$$

$$\Delta F^0 = -RT \ln K_c \quad (3.12)$$

(3.11) və (3.12) tənlikləri istənilən temperaturda tətbiq edilə bilər. Standart hal kimi adətən 25°C (298 K) qəbul edilir. ΔG^0 və ΔF^0 kəmiyyətlərini son məhsul və başlanğıc maddələrin əmələ gəlməsinin izotermik potensiallar fərqi kimi müəyyən edilir.

4. TEXNOLOJİ PROSESLƏRİN İSTİLİK HESABI

İstənilən aparatın energetik (istilik) balansı prosesə (aparata) daxil olan və xaric olan enerjini (istiliyi) əlaqələndirən tənlik şəklində verilə bilər. Məlumdur ki, energetik balans qapalı sistemlərdə bütün növ enerjilərin cəminin sabit olmasına, yəni enerjinin saxlanması qanununa əsaslanır. Texnoloji proseslərdə adətən istilik balansı tərtib edilir. Balans tənliyi aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\sum Q_{\text{məd}} = \sum Q_{\text{məx}} \quad (4.1)$$

və ya

$$\sum Q_{\text{məd}} - \sum Q_{\text{məx}} = 0 \quad (4.2)$$

Göründüyü kimi istilik balansına əsasən aparata (prosesə) daxil bütün növ istilik miqdarlarının cəmi ondan xaric olanların cəminə bərabər olmalıdır. Fasiləsiz işləyən aparatlar (proseslər) üçün istilik balansı zaman vahidinə görə, dövrü işləyənlər üçün isə dövrə uyğun zamana görə tərtib olunur. İstilik balansı maddi balansın dəlilləri əsasında ekzotermik və endotermik proseslər nəzərə alınmaqla hesablanır. Maddi axınlarla aparata (prosesə) daxil olan və aparılan istilik miqdarları məlum olan üsullarla hesablanır. Reaksiya istiliyi isə alınan məhsulların əmələ gəlmə istilikləri cəminin reaksiyaya daxil olan maddələrin əmələ gəlmə istilikləri cəminin fərqi kimi hesablanıla bilər [5].

$$\Delta H = \sum (\Delta H_{\text{ə.g.}})_{\text{məh}} - \sum (\Delta H_{\text{ə.g.}})_{\text{dax}} \quad (4.3)$$

Maddələrin əmələ gəlmə istilikləri standart şərait üçün sorğu məlumat kitablarında verilir. Temperaturun əmələ gəlmə istiliyinə təsirini nəzərə almaq üçün Nernst düsturundan istifadə edilir.

Aparata istilik istilikdaşıyıcı (məsələn su ilə) verildikdə verilən istiliyin miqdarı aşağıdakı kimi hesablanır:

$$Q=G_{su}c_{su}(t_g-t_ç) \quad (4.4)$$

burada, G_{su} –verilən suyun kütlə sərfi, c_{su} – suyun xüsusi istilik tutumu, t_g , $t_ç$ -uyğun olaraq suyun girişdə və çıxışda temperaturudur.

Əgər istilik buxar vasitəsi ilə verilərsə, onda verilən istiliyin miqdarı aşağıdakı kimi hesablanır:

$$Q=G_{bux}r \quad (4.5)$$

burada, G_{bux} - verilən buxarın kütlə sərfi, r – buxarın gizli kondensləşmə istiliyidir.

İstilik prosesə qızdırıcı səth vasitəsi ilə verildikdə istilik miqdarı istilikötürmə düsturu ilə hesablanır:

$$Q=kF(t_i-t_s)\tau \quad (4.6)$$

burada, k – istilikötürmə əmsalı, F -istilik mübadilə səthinin sahəsi, t_i , t_s – uyğun olaraq isti və soyuq axınların orta temperaturu, τ - zamandır.

Qeyd edilənlərdən başqa istilik sobalarda yanacağın yandırılması, elektrik sobaları, tüstü qazları vasitəsi ilə də verilə bilər. Belə hallarda da istilik miqdarı müvafiq üsullarla hesablanır.

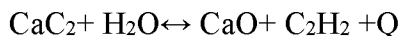
İstilik hesablamalarına aid misallara baxaq:

1.Kalsium karbiddən 100 l asetilen alındıqda ayrılan istilik miqdarını hesablamalı. Maddələrin əmələ gəlmə istilikləri (kC/kmol ilə) aşağıdakı kimidir:

$\text{CaC}_2 \dots 62700$; $\text{CaO} \dots 635100$; $\text{H}_2\text{O} \dots 241840$;

$\text{C}_2\text{H}_2 \dots 226750$

Asetilenin əmələ gəlmə reaksiyası aşağıdakı kimidir



$$Q = 635100 + 226750 - 62700 - 241840 = 557310 \text{ kC/kmol}$$

100 l asetilen əmələ gəldikdə ayrılan istilik miqdarı aşağıdakı kimi olur:

$$(557310 \cdot 100) / (22,4 \cdot 1000) = 2488 \text{ kC}$$

2.Etanın 1m^3 və 1kq -nin yanması zamanı əmələ gələn istilik miqdarını hesablamalı. Standart şəraitdə etanın yanma istiliyi 1559880 kC/kmol -dur.

1m^3 üçün

$$1559880 / 22,4 = 69700 \text{ kC/ m}^3$$

1 kq üçün

$$1559880 / 30 = 52000 \text{ kC/kq}$$

burada, 30 etanın molekül kütləsidir.

Müasir kimya sənayesi ən iri yanacaq və elektrik enerjisi istehlajçılarından biridir. Bu sənaye istilik, elektrik və mexaniki

enerjidən istifadə edir. Bunlardan təxminən 40%-i elektrik, 50%-i istilik (buxar, isti su), 10%-i isə birbaşa yanacaqın işlədilmə payına düşür. Enerji resurslarının əsas növləri yanan faydalı qazıntılar (kömür, torf), ümumi enerji (hidroenerji), biokütlə bə bitki mənşəli xammal, atom enerjisi, bəzi hallarda kütlək enerjisindən də istifadə olunur.

Yüksək potensiala malik istilik enerjisi əsasən xammalın və yarım fabrikatların fiziki-kimyəvi xassələrinin dəyişməsi və kimyəvi reaksiyaların gedişində istifadə olunur. Bu enerji müxtəlif yanacaq növlərinin – daş kömür, koks, koks qazı, maye yanacaq, təbii qaz və s. hesabına əldə edilir.

Orta və aşağı temperaturlu prosesləri təmin etmək üçün əsas enerji daşıyıcısı kimi buxar və isti sudan geniş istifadə olunur. Elektrik enerjisi əsasən elektrokimyəvi prosesləri aparmaq üçün (məhlulların elektrolizi və əridilməsi), qızdırma, yüksək temperaturda sintez prosesləri, əritmə və s. proseslərdə istifadə olunur. Kimya sənayesində elektromaqnit, elektrostatik, elektrokrekinq və s. istifadə olunur. Həmçinin elektrik enerjisi proseslərə nəzarət və prosesləri teleidarəetmə, kimyəvi-texnoloji proseslərin avtomatlaşdırılması və habelə mexaniki enerji almaq üçün də geniş istifadə edilir.

Mexaniki enerji əsasən fiziki əməliyyatları aparmaq (xırdalama, üyütmə, əzmə, sentrofuqlama, nasosların, kompressorların və ventilyatorların işləməsi üçün, və digər köməkçi əməliyyatlar – yüklərin nəql edilməsi və s. istifadə edilir.

Kimya sənayesində ən çox istilik və elektrik enerjisi – ammonyak, plastik və sintetik qətranlar, metanol, sünü liflər, sintetik kauçuk, sulfat turşusu və s. itehsalında istifadə olunur. Bu məhsulların itehsalına 55% elektrik və istilik enerjisi, 95% isə yanacaq sərf olunur.

Enerji resurslarından səmərəli istifadə etmək üçün xammal və köməkçi materiallardan texnoloji proseslərdə

düzgün istifadə əsas şərtidir. Bundan başqa məsələni həll etmək üçün kimya – texnoloji sistemlərin yaradılması zəruridir.

Kimyəvi-texnoloji sistemlərin (KTS) işlənməsi və yaradılmasının ümumi məsələlərinin qoyuluşu aşağıdakı kimidir:

- a) KTS-nin işlənməsində sistemli tədqiqatın metodları və prinsiplərinin istifadəsi
- b) Sistemli yanaşmanın anlayışlarının mənimsənilməsi və prinsiplərinin tətbiqi.

Müasir kimya müəssisələri – müxtəlif aparat və aparatların bir-biri ilə əlaqəsindən ibarət mürəkkəb kimyəvi-texnoloji bir sistem olub ierarxiv struktura malikdir. Bu mürəkkəb sistemlərin effektiv fəaliyyəti üçün layihələndirmə mərhələsində müxtəlif məsələləri həll etmək lazımdır.

KTS-in işlənməsinin əsas məqsədi yüksək effektiv kimya istehsalı yaratmaqla yəni tələb olunan məhsulun alınması ilə yanaşı – həmin məhsulun keyfiyyətinin yüksək alınması üçün əlavə prosesin aparılması iqtisadi cəhətdən də səmərəli olmalıdır.

KTS aşağıdakı şərtləri ödəməlidir:

- 1) Sistemin texnoloji topologiyasının təyini. Texnoloji topologiya dedikdə texnoloji sistemdəki ayrı-ayrı aparatların bir-biri ilə birləşməsi sxemləri və xarakteri nəzərdə tutulur.
- 2) Çıxış parametrlərinin qiymətinin təyini – yəni KTS-dəki xammalın fiziki kəmiyyətlərinin – (təzyiq, temperatur və s.) təyini.
- 3) KTS-in texnoloji parametrlərinin qiymətinin təyini – ayırılma dərəcəsi, kimyəvi reaksiyanın sürət konstantı (əmsalı), kütlə və istilikvermə əmsalının təyini.
- 4) KTS-in konstruktiv parametrlərinin təyini – aparatın həndəsi xarakterik tərtibatı, kimyəvi reaktorun həcmi, müxtəlif kinetik parametrlərin və s.

Qeyd etmək lazımdır ki, KTS-də texnoloji rejimin parametrlərinin seçilməsi (temperatur, təzyiq, katalizatorun

aktivliyi, axında komponentlərin hidrodinamik qarışması) texnoloji prosesin sürətinə – alınan məhsulun çıxımına və keyfiyyətinə təsir göstərir.

İerarxik strukturun birinci – aşağı pilləsi tipik kimyəvi-texnoloji prosesin təsvir edir, (kimyəvi, istilik, mexaniki, hidrodinamiki, diffuzion), həm də sistemin lokal avtomatik idarəetməni təmin edir.

İerarxik sistemin ikinci pilləsi – tipik texnoloji prosesin texnoloji aparat və avadanlıqların bir-biri ilə qarşılıqlı əlaqələrinin mövcudluğunu göstərir. Çox vaxt bu sexlər və onların ayrı-ayrı sahələrinin əlaqələri nəzərdə tutulur.

Bu pillədə qarşıda qoyulmuş məqsədə nail olmaq üçün avtomatik idarəetmə sistemlərindən istifadə edərək aparatların işini və texnoloji axınların optimal bölünməsi koordinasiya olunur.

İerarxik sistemin üçüncü pilləsi kimya istehsalının təşkil edən məqsədli məhsulun alınmasına səbəb olan bir neçə sexləri və istehsalın texnoloji təşkilati funksiyaların və ASU-nu təşkil edir.

Dördüncü pillə – kimyəvi müəssisənin tam avtomatik idarəetmə sistemi təşkil edir (ASUTP) (texnoloji prosesin avt.idarəetmə sistemi).

Texnoloji axının parametrlərinin seçilməsi, sistemin işinin verilmiş rejimdə təmin olunması (maddənin qatılığı, temperaturu, təzyiqi, kütlə sərfi və s.) məsələsinin həll edilməsi vacibdir.

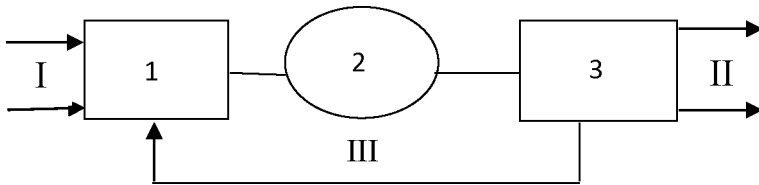
Yuxarıda göstərilənlərə əməl etməklə yanaşı, əlavə digər məsələləri də həll etmək lazımdır. Bunlar konstruktiv materialın seçilməsi, prosesin avtomatlaşdırılması, analitik nəzarət, ekoloji və sanitariya-gigiyenik normalara əməl etmək lazımdır.

5. TEXNOLOJİ PROSESLƏRİN KİNETİKASI

İxtiyari kimya-texnoloji prosesi bir-biri ilə qarşılıqlı əlaqədə olan mərhələlər şəklində aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:

- 1.Reaksiyaya daxil olacaq komponentlərin reaksiya zonasına daxil edilməsi;
- 2.Kimyəvi reaksiyanın aparılması;
- 3.Alınan məhsulların reaksiya zonasından çıxarılması.

Şəkil 5.1-də tipik kimya-texnoloji prosesin sxemi verilmişdir.



Şək 5.1. Tipik kimya-texnoloji prosesin sxemi.

1,3- fiziki əməliyyatlar; 2-kimyəvi çevrilmə; I-başlanğıc maddələr; II-məhsullar; III-resirkulyasiya.

Texnoloji proses həyata keçiriləcək reaktoru layihə edən mühəndis-kimyayaçıya birinci növbədə prosesin kinetikasi haqqında məlumatı olmalıdır. Reaksiya aparatlarının həcmi, məhsuldarlığı və avadanlığın işinin intensivliyi prosesin getmə sürətindən birbaşa asılıdır.

Prosesin sürətinin müxtəlif amillərdən asılılığını bilməklə texnoloq ağıllı şəkildə prosesi idarə edə bilər və həmçinin minimum zaman kəsiyində məhsulun maksimal çıxımını əldə etmək üçün müxtəlif tədbirlər görə bilər [6].

Prosesin ümumi sürəti ayrı-ayrı mərhələlərin sürətlərindən əmələ gəlir və daha yavaş gedən mərhələ (limitləşdirici) ilə müəyyən olunur. Əgər daha yavaş gedən mərhələ başlanğıc maddələrin reaksiya zonasına daxil edilməsi və yaxud məhsulların çıxarılması mərhələsdirsə və o ümumi prosesin sürətini limitləşdirirsə, onda hesab edilir ki, proses *diffuziya sahəsində* gedir. Əgər prosesin ümumi sürətini kimyəvi reaksiyalar və ya onlardan biri limitləşdirirsə, onda hesab edilir ki, proses *kinetik sahədə* gedir. Əgər bütün mərhələlərin sürətləri müqayisə edilə bilərək ortaq ölçülürsə, onda hesab edilir ki, proses *keçid sahəsində* baş verir.

Prosesin hansı sahədə getməyindən asılı olaraq onun sürətinin riyazi yazılışı üçün müxtəlif ifadələr qəbul edilir və prosesin ümumi sürətini artırmaq üçün müxtəlif tədbirlər görülür.

Ümumi halda hesab etmək olar ki, kimya texnoloji prosesin sürəti prosesin hərəkətverici qüvvəsi ilə düz mütənasibdir:

$$u=k\Delta C \quad (5.1)$$

burada, u -kimya texnoloji prosesin sürəti; k -mütənasiblik əmsalı;

ΔC -prosesin hərəkətverici qüvvəsidir.

Prosesin sürətini xarakterizə etdiyi üçün k əmsalı prosesin sürətinin əmsalı və ya sabiti adlanır. Bir qayda olaraq k əmsalı prosesin hərəkətverici qüvvəsində nəzərə alınmayan bütün amillərin təsirini əks etdirir.

Kinetik və diffuziya sahələrində baş verən proseslərin qanunauyğunluqlarına ayrılıqda baxaq.

Reaksiya sürətini hər hansı bir komponentin vahid zamanda vahid faza həcmində (homogen reaksiyalar üçün) və ya

fazaları ayıran səthin vahid sahəsində (heterogen reaksiyalar üçün) mol saylarının dəyişməsi kimi ifadə etmək olar.

Qeyd edilənlər əsasında kinetik sahədə baş verən proseslərin sürəti homogen reaksiyalar üçün

$$u = \pm(1/v)(dN/d\tau) \quad (5.2)$$

heterogen reaksiyalar üçün isə

$$u = \pm(1/F)(dN/d\tau) \quad (5.3)$$

kimi ifadə olunur.

burada, N-əmələ gələn və ya reaksiyaya daxil olan molların sayı; v-reaksiyaya daxil olan maddələrlə tutulan həcm, fazaların həcmi; F- fazaların təmas səthlərinin sahəsi; τ - zamandır.

Reaksiyanın sürəti digər kəmiyyətlərlə də ifadə oluna bilər. Məsələn, fazaların həcmnin v əvəzinə reaktorun həcmi v_r götürmək olar, onda

$$u = \pm(1/v_r)(dN/d\tau) \quad (5.4)$$

olar.

$v = v_r = \text{const}$ olduqda isə

$$u = \pm(dN/v_r)/d\tau = \pm-dC/d\tau \quad (5.5)$$

alınır.

Əgər fazaların həcmi əvəzində maddələrin kütləsindən G istifadə edilərsə, onda

$$u = \pm (1/G)(dN/d\tau) \quad (5.6)$$

alarıq.

Reaksiyanın sürəti sistemin parametrlərinin funksiyasıdır. Sistemin parametrlərindən reaksiya sürətinin asılılığı onun istənilən ifadəsindən istifadə edildiyi zaman eynidir. Reaksiya sürətinin ifadəsinin dəyişməsi zamanı yalnız mütənasiblik əmsali və onların ölçü vahidləri dəyişəcəkdir.

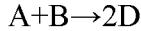
Müəyyən dərəcədə reaksiya sürəti reaksiyaya daxil olan maddələrin qatılıqlarının hasililə düz mütənasibdir. $aA + bB \rightarrow dD$ tipli dönməyən reaksiya üçün yazıla bilər.

$$u = k[A]^\alpha [B]^\beta \quad (5.7)$$

Burada, k-reaksiyanın sürət sabiti yalnız temperaturdan asılıdır. α və β göstəriciləri reaksiyanın tərtibini müəyyən edir. Reaksiyanın tərtibi təcrübi yolla müəyyən edilir və nəzəri surətdə əsaslandırılır. Bunun üçün reaksiyanın mexanizmi aydınlaşdırılır. Çox hallarda reaksiyanın tərtibi reaksiyanın molekulyarlığını əks etdirən reaksiyanın stexiometrik əmsalları ilə üst-üstə düşür.

Əgər stexiometrik tənlik reaksiyanın mexanizmini düzgün əks etdirirsə, onda reaksiyanın tərtibi onun molekulyarlığı ilə üst-üstə düşür. Bu halda bir tərtibli reaksiya monomolekulyar, iki tərtibli bimolekulyar və s. olur.

Reaksiyada iştirak edən müxtəlif komponentlərin çevrilmə sürətləri bir-biri ilə stexiometrik əmsallarla əlaqələndirilir. Məsələn, əgər reaksiyanın stexiometrik tənliyi [7].

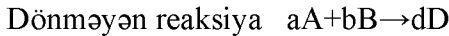


şəklindədirsə, onda komponentlərin çevrilmə sürətləri arasındakı münasibət belə yazılır:

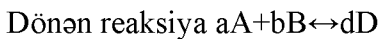
$$dC_D/d\tau = -2dC_A/d\tau = -2dC_B/d\tau \quad (5.8)$$

Buradan görünür ki, D komponentinin mollarının sayının artma sürəti A və B komponentlərinin sərf olunma sürətindən iki dəfə çoxdur. Məhz qeyd edilən səbəbdən reaksiya sürətinin hansı komponentə görə müəyyən edildiyinin göstərilməsi zəruridir. Belə ki, ondan reaksiyanın sürət sabitinin hesablanan qiyməti asılı olacaqdır.

Kimyəvi reaksiyaların sürətinin prinsipcə müxtəlif bir neçə ifadələrinə baxaq:



$$u_D = k[A]^\alpha [B]^\beta \quad (5.9)$$



$$u_D = k_1[A]^\alpha [B]^\beta - k_2[D]^\gamma \quad (5.10)$$

Ümumi şəkildə isə:

$$u_D = k_1[A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma - k_2[A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma \quad (5.11)$$

Göründüyü kimi düzünə və əksinə reaksiyaların sürəti praktiki olaraq qarşılıqlı təsirdə iştirak edən bütün komponentlərin qatılıqlarından asılıdır. Buradan tarazlıq sabiti ilə düzünə və əks reaksiyaların sabitləri arasında olan əlaqədən praktiki istifadə olunması üçün mühüm məsələ meydana çıxır. Belə ki, yuxarıda verilən reaksiya üçün tarazlıq əldə olunduqda.

$$k_1/k_2 = ([D]_t^{\gamma'-\gamma}) / ([A]_t^{\alpha-\alpha'} [B]_t^{\beta-\beta'}) \quad (5.12)$$

olur. Tarazlıq sabiti isə,

$$K = ([D]_t^d) / ([A]_t^a [B]_t^b) \quad (5.13)$$

kimi ifadə olunur.

(5.12) tənliyində k_1/k_2 nisbətində tarazlıq sabiti K -nın funksiyası kimi baxmaq olar.

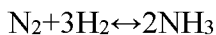
$$k_1/k_2 = K^n \quad (5.14)$$

$$([D]_t^{\gamma'-\gamma}) / ([A]_t^{\alpha-\alpha'} [B]_t^{\beta-\beta'}) = ([D]_t^{dn}) / ([A]_t^{an} [B]_t^{bn}) \quad (5.15)$$

və aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$n = (\alpha - \alpha')/a = (\beta - \beta')/b = (\gamma' - \gamma)/d \quad (5.16)$$

Məsələn, ammonyakın sintezi prosesində aşağıdakı reaksiya baş verir:



Bu reaksiyanın tarazlıq sabiti:

$$K = \frac{[\text{NH}_3]^2}{[\text{H}_2]^3 [\text{N}_2]} \quad (5.17)$$

şəklində olur. Göstərilən reaksiya üçün müəyyən edilən reaksiya sürəti aşağıdakı kimidir:

$$u = k_1 [\text{N}_2] [\text{H}_2]^{1.5} [\text{NH}_3]^{-1} - k_2 [\text{NH}_3]^1 [\text{H}_2]^{-1.5} \quad (5.18)$$

burada,

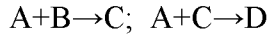
$$n = (1-0)/1 = (1.5 - (-1,5))/3 = (+1+1)/2 = 1$$

İndi isə paralel və ardıcıl reaksiyalara baxaq.

$\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{C}$; $\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{D}$ tipli paralel reaksiyalarda həm A, həm də B komponentinə görə tərtibi vahidə bərabərdirsə, onda yazı bilərik:

$$u_C = k_1 [\text{A}] [\text{B}]; u_D = k_2 [\text{A}] [\text{B}]; u_A = u_B = k_1 [\text{A}] [\text{B}] + k_2 [\text{A}] [\text{B}] \quad (5.19)$$

Müvafiq müzakirəni aşağıdakı ardıcıl reaksiyalar üçün də apara bilərik:



Əgər hesab etsək ki, hər bir iştirak edən komponentə görə reaksiyanın tərtibi vahidə bərabərdir, onda hər bir komponent üçün reaksiya sürətini müəyyən edə bilərik:

$$u_B = k_1[A][B];$$

$$u_D = k_2[A][C];$$

$$u_A = k_1[A][B] + k_2[A][C];$$

$$u_C = k_1[A][B] - k_2[A][C] \quad (5.20)$$

Göründüyü kimi A-nın tələb olunan sərf sürəti birinci və ikinci reaksiyalar üzrə tələb edilənin cəminə bərabərdir. C-nin əmələ gəlmə sürəti əvvəlcə müsbət, sonra sıfıra bərabər ola bilər, nəhayət mənfi də ola bilər. Belə ki, ikinci reaksiyanın sürəti birincidən yüksək ola bilər. Uyğun olaraq C-nin qatılığı maksimumdan keçərək sıfıra qədər azalır [8].

Qeyd etmək lazımdır ki, tənlilərdə maddələrin cari qatılıqları verilir və o da fasiləsiz olaraq dəyişir. Məsələyə aydınlıq gətirmək üçün $A \rightarrow D$ bir tərtibli reaksiya nümunəsində ideal çıxarma rejimində və ya dövrü işləyən reaktorda baxaq:

$$u = -(1/\nu)(dN_A/d\tau) = k[N_A/\nu] \quad (5.21)$$

$\nu = \text{const}$ olduqda;

$$u = -dC_A/d\tau = k[C_A] \quad (5.22)$$

Komponentin qatılığı C_A -nı molların başlanğıc miqdarı a və reaksiyaya daxil olan mollarla X_M ilə ifadə edirik. Onda (5.22) tənliyi aşağıdakı şəkli alır:

$$-(d(a - X_M)/d\tau) = k(a - X_M) \quad \text{və} \quad dX_M/d\tau = k(a - X_M) \quad (5.23)$$

Dəyişənləri ayırıb inteqrallamaqla alırıq:

$$dX_M/(a - X_M) = k d\tau$$

$$k \int_0^\tau d\tau = \int_0^{X_M} \frac{dX_M}{a - X_M} = 1 - \ln(a - X_M) \Big|_0^{X_M} = \frac{\ln a}{a - X_M} = k\tau$$

$$X_M = a(1 - e^{-k\tau}) \quad (5.24)$$

Əgər təcrübi dəlillər əsasında $\tau_1 = X_1$ və $\tau_2 = X_2$ olduğu məlumdursa, onda reaksiya sürətinin sabiti aşağıdakı tənliklə müəyyən olunur:

$$k = (2.3 / (\tau_2 - \tau_1)) \cdot \lg(a - X_1) / (a - X_2) \quad (5.25)$$

Yarımparçalanma müddəti, yəni maddələrin yarısının reaksiyaya girdiyi müddət

$$\tau_{1/2} = 2,3/k \cdot \lg 2 = 0,6932/k \quad (5.26)$$

olacaqdır. Uyğun əməliyyatı digər reaksiyalar üçün də aparmaq olar.

6. TEMPERATURUN REAKSIYA SÜRƏTİNƏ TƏSİRİ

Temperaturun kimyəvi reaksiyanın sürətinə təsirinə baxmaq kimya texnoloji prosesin aparılmasının optimal şəraitinin tapılması üçün zəruridir. İki müxtəlif hala baxaq: 1) proses dönən deyil; 2) proses dönəndir.

Birinci halda temperatur yalnız prosesin sürətinə təsir edəcəkdir. İkinci halda isə həm sürətə, həm də tarazlığa təsir edəcəkdir [9].

Dönməyən reaksiyalar. Reaksiyanın mexanizmini ifadə edən kinetik tənlik:



Kimyəvi reaksiyanın sürət sabitinin temperaturdan asılılığı Arrhenius tənliyi ilə müəyyən edilir:

$$k=k_0e^{-E/RT} \quad (6.2)$$

burada, E-aktivləşmə enerjisi, kC/kmol; R-qaz sabiti; k_0 -eksponensial önü vurğudur. (6.2) tənliyindən istifadə etməklə müəyyən temperatur intervalı üçün T_1 temperaturu üçün k_1 məlum olarsa, reaksiyanın sürət sabitini və ya T_1 və T_2 üçün k_1 və k_2 məlum olarsa, aktivləşmə enerjisini (E_1) müəyyən etmək mümkündür.

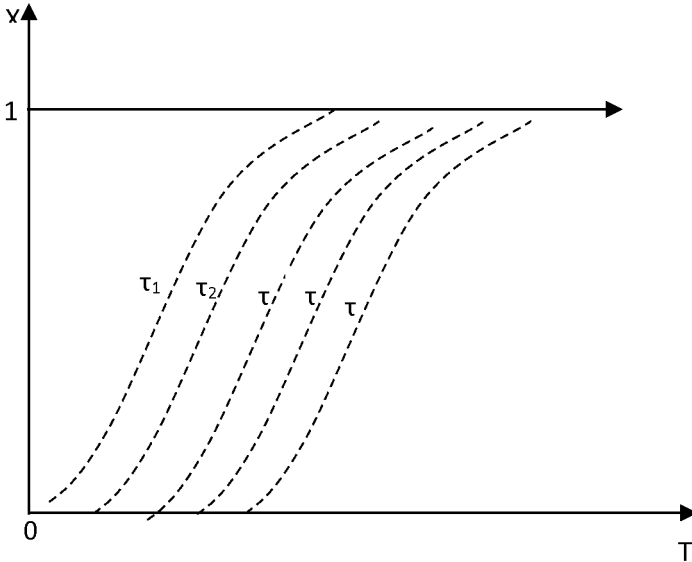
Əgər T_1 temperaturunda reaksiyanın sürət sabiti k_1 , T_2 temperaturunda reaksiyanın sürət sabiti k_2 -dirsə, onda

$$k_1/k_2 = (k_0 e^{-E/RT_1}) / (k_0 e^{-E/RT_2}) = e^{E/R(1/T_2 - 1/T_1)} \quad (6.3)$$

$$\ln k_1/k_2 = E/R(1/T_2 - 1/T_1) \quad (6.4)$$

$$E = (19,1 T_1 T_2) / (T_1 - T_2) \lg k_1/k_2 \quad (6.5)$$

(6.1) və (6.2) tənliklərinə əsasən temperaturun yüksəlməsi ilə reaksiyanın sürət sabiti böyüyür, yəni uyğun olaraq reaksiyanın sürəti artır. Lakin reaksiyanın davam etməsi ilə prosesin hərəkətverici qüvvəsi ($[A]^m[B]^n$) azalır və reaksiyanın sonunda sıfıra yaxınlaşır. Bu halda məhsulun çıxımı maksimuma yaxınlaşır. Diqqət yetirilən mülahizələr şəkil 6.1-də təsvir olunur



Şək. 6.1. Dönməyən reaksiyalar üçün çevrilmə dərəcəsinin temperaturdan asılılığı, $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3 > \tau_4 > \tau_5$

Şəkildən görüldüyü kimi məhsulun reaktorda qalma müddətinin çoxalması həmin temperaturda daha yüksək çevrilmə dərəcəsinin təmin olunmasına imkan verir.

Dönən reaksiya. Dönən reaksiya ekzotermik olduqda reaksiya müddətinin sabitliyi şəraitində çevrilmə dərəcəsi maksimuma çatır, sonra temperaturu artması ilə azalır. Məhsulun maksimum çıxımına uyğun gələn temperatur optimal temperatur adlandırılır.

Maksimumun tapılması ümumi metodların tətbiq edilməsi (funksiyanın törəməsinin sıfıra bərabərləşdirilməsi ilə) yolu ilə həyata keçirilir.

$aA + bB \leftrightarrow dD$ tipli dönən ekzotermik reaksiya üçün optimal temperaturun qiymətini tapaq. Reaksiyanın sürəti (5.11) tənliyi ilə ifadə olunur:

$$u = k_1[A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma - k_2[A]^{\alpha'} [B]^{\beta'} [D]^{\gamma'}$$

Temperatura görə sürətin birinci törəməsini tapaq:

$$du/dT = (dk_1/dT) [A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma - (dk_2/dT) [A]^{\alpha'} [B]^{\beta'} [D]^{\gamma'} = 0$$

$$(dk_1/dT) [A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma = (dk_2/dT) [A]^{\alpha'} [B]^{\beta'} [D]^{\gamma'}$$

$$\text{belə ki, } dk/dT = k(d\ln k/dT)$$

$$(6.2) \text{ tənliyindən } d\ln k/dT = E/RT^2 \text{ onda}$$

$$(E_1 k_1 / RT^2) [A]^\alpha [B]^\beta [D]^\gamma = (E_2 k_2 / RT^2) [A]^{\alpha'} [B]^{\beta'} [D]^{\gamma'}$$

burada, E_1 və E_2 – uyğun olaraq düzünə və əks reaksiyaların aktivləşmə enerjiləridir. Aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$k_1/k_2 = (E_2/E_1) \cdot ([D]^{\gamma'-\gamma} / ([A]^{\alpha'-\alpha} [B]^{\beta'-\beta})) \quad (6.6)$$

Əvvəldə göstərildiyi kimi $k_1/k_2 = K^n$ burada, K – tarazlıq sabitidir, ona görə də

$$K = (k_1/k_2)^{1/n} = ((E_2/E_1)^{1/n}) \cdot ([D]^{(\gamma'-\gamma)/n} / ([A]^{(\alpha'-\alpha)/n} [B]^{(\beta'-\beta)/n}))$$

(5.16) tənliyini nəzərə alıb yekunda alırıq:

$$K = ((E_2/E_1)^{1/n}) \cdot ([D]^d / ([A]^a [B]^b)) \quad (6.7)$$

burada, K – optimal temperatura bərabər temperaturda tarazlıq sabiti; a, b , və d – reaksiyanın stexiometrik əmsallarıdır.

Təcrübədə çox zaman optimal temperaturu tarazlıq temperaturunun qiymətinə görə müəyyən edirlər.

7. KİNETİK PARAMETRLƏRİN HESABI

Kinetik parametrləri müəyyən etmək üçün aşağıdakı nümunələrə baxaq:

1. Kimyəvi reaksiyanın 400⁰C-də sürəti 450⁰C-də olan sürətindən 10 dəfə azdır. Temperaturun dəyişməsi ilə prosesin hərəkətverici qüvvəsinin dəyişmədiyini hal üçün prosesin aktivləşmə enerjisini tapmalı.

Prosesin sürəti aşağıdakı ifadə (5.1) ilə müəyyən edilir:

$$u = k\Delta C$$

Temperaturun dəyişməsi ilə sürət sabiti k dəyişir:

400⁰C-də

$$u_1 = k_1\Delta C$$

450⁰C-də

$$u_2 = k_2\Delta C$$

$u_2 / u_1 = k_2 / k_1 = (k_0 e^{-E/RT_2}) / (k_0 e^{-E/RT_1}) = e^{E/R(1/T_1 - 1/T_2)}$
buradan,

$$E/R(1/T_1 - 1/T_2) \lg e = \lg 10$$

$$E/8,31(1/673 - 1/723) \lg e = 1$$

$$E = 174000 \text{ kC/mol}$$

2. Başlanğıc qatılığı 25,4 mol/l olan hidrogen peroksid katalitik parçalanır. 10 dəqiqədən sonra məhlulda 13,4 mol/l, 10 dəqiqədən sonra məhlulda 7,08 mol/l, 30 dəqiqədən sonra

məhlulda 3,81 mol/l H₂O₂ qalır. Reaksiyanın tərtibini müəyyən edib reaksiyanın sürət sabitini hesablamalı.

Fərz edək ki, reaksiya birinci tərtib üzrə gedir. Onda reaksiya sürəti (5.23) tənliyinə əsasən

$$dX_M/d\tau = k(a - X_M) \quad \text{olar.}$$

Buradan

$$k = (2,3/\tau) \lg(a/(a - X_M))$$

Zamanın müxtəlif anları üçün k-nın qiymətini tapaq:

$$k_1 = (2,3/10) \lg(25,4/13,4) = 0,0634 \text{ dəq}^{-1}$$

$$k_2 = (2,3/20) \lg(25,4/7,08) = 0,0638 \text{ dəq}^{-1}$$

$$k_3 = (2,3/30) \lg(25,4/3,81) = 0,0633 \text{ dəq}^{-1}$$

Hesablamadan alınan nəticələrdən görüldüyü kimi k sabit kəmiyyət kimi qalır. Ona görə də hidrogen peroksidin parçalanması prosesi birinci tərtibli tənlik kimi təsvir olunur. $k = 0,0635 \text{ dəq}^{-1}$ orta qiyməti ilə

$$dX_M/d\tau = 0,0635(a - X_M) \quad \text{olur.}$$

3. Benzol peroksidin dietil efirinə çevrilməsi prosesi (birinci tərtib reaksiya) zamanı 60⁰C-də 10 dəqiqə ərzində 75,2% çevrilmə baş vermişdir. Reaksiyanın sürət sabitini hesablamalı. (5.23) tənliyinə əsasən

$$k=(2,3/\tau)\lg(a/(a- X_M)) = (2,3/10)\lg(100/24,8) = 0,14 \text{ d\`aq}^{-1}$$

Vanadium katalizatoru üzərində SO₂-nin SO₃-ə reaksiyasının aşağıdakı dəlillər əsasında aktivləşmə enerjisini müəyyən etməli [10-15].

t, °C	455	470	490
k, san ⁻¹	6,3	12	26,2

(6.5) tənliyindən istifadə edərək hesablamaları aparaq:

$$E=(19,1 T_1 T_2)/(T_1- T_2)\lg k_1/k_2$$

$$E_1=(19,1 \cdot 728 \cdot 743)/(743-728)\lg 12/6,3 = 193000 \text{ kC/kmol}$$

$$E_2=(19,1 \cdot 728 \cdot 763)/(763-728)\lg 26,2/6,3=188000 \text{ kC/kmol}$$

$$E_3=(19,1 \cdot 743 \cdot 763)/(763-743)\lg 26,2/12 = 184000 \text{ kC/kmol}$$

$$E=(E_1+E_2+E_3)/3 = (193000 + 188000 + 184000) = 188000$$

kC/kmol.

1. A və B maddələri öz aralarında kimyəvi qarşılıqlı təsirdə olurlar. Verilən məlumatlardan istifadə edərək reaksiyanın tərtibini müəyyən etməli.

τ, d\`aq	0,0	10	30
X, %	19,8	46,7	74,0

Fərz edək ki, reaksiya A maddəsi üçün birinci tərtiblə gedir. Onda $k = (2,3/\tau) \lg(a/(a-X))$ tənliyinə əsasən hesablamaya aparaq:

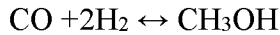
$$k_1 = (2,3/10) \lg(0,802/(0,802 - 0,467)) = 0,088 \text{ dəq}^{-1}$$

$$k_2 = (2,3/30) \lg(0,802/(0,802 - 0,74)) = 0,086 \text{ dəq}^{-1}$$

Praktiki olaraq k sabit qalır, deməli, reaksiyanın tərtibi birincidir.

8. OPTİMAL TEMPERATURUN TƏYİNİ

Metanolun sintezi misalında prosesin optimal temperaturunun təyin edilməsi məsələsinə baxaq. Çıxımın 1%-dən 5% -ə yüksəlməsini təmin edən metanolun sintezi kalonunun hündürlüyü boyu optimal temperaturu hesablamalı. Proses $3,03 \cdot 10^7$ Pa (300 at) təzyiq altında $\text{CO}:\text{H}_2=1:2$ nisbətində aşağıdakı reaksiya üzrə gedir:



Düzünə və əksinə gedən reaksiyaların aktivləşmə enerjiləri uyğun olaraq, $E_1=109000$ kC/kmol, $E_2=155000$ kC/kmol- a bərabərdir. Metanolun sintezi prosesinin məhdudlaşdırıcı (limitləşdirici) mərhələsi kimi bərk katalizatorun səthində hidrogenin adsorbsiyasını qəbul edirik. İnert qazlar 13% (həcm) təşkil edir.

Əgər metanolun sintezi prosesinin məhdudlaşdırıcı (limitləşdirici) mərhələsi kimi bərk katalizatorun səthində hidrogenin adsorbsiyası qəbul edilirsə, onda prosesin sürət tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$u = k_1 p_{\text{H}_2} (p_{\text{CO}}^{0,25} / p_{\text{CO}}^{0,25}) - K_2 (p_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0,25} / p_{\text{CO}}^{0,25}) \quad (8.1)$$

burada, k_1 -düzünə gedən reaksiyanın sürət sabiti; k_2 - əks reaksiyanın sürət sabiti; p_{H_2} , p_{CO} , $p_{\text{CH}_3\text{OH}}$ uyğun olaraq hidrogenin, karbon oksidinin və metanolun parsial təzyiqləridir.

Optimal temperaturu tapmaq üçün (6.7) tənliyindən istifadə edirik.

$$K = ((E_2 / E_1)^{1/n}) \cdot ([D]^d / ([A]^a [B]^b))$$

Belə ki, bu tənlik vasitəsi ilə optimal temperatura uyğun şərait üçün tarazlıq sabiti müəyyən olunur. Beləliklə,

$$K_t = ((E_2/E_1)^{1/n}) \cdot (p_{CH_3OH}/p_{H_2}^2 p_{CO})$$

İndi isə n kəmiyyətini tapaq. Bunun üçün

$$n = (\alpha - \alpha')/a = (\beta - \beta')/b = (\gamma' - \gamma)/d \quad (8.2)$$

tənliyindən istifadə edirik.

$$n = (1 - 0)/2 = (0,25 - (-0,25))/1 = (0,25 - (-0,25))/1 = 1/2$$

Onda,

$$K_t = ((E_2/E_1)^{1/n}) \cdot (p_{CH_3OH}/p_{H_2}^2 p_{CO}) \text{ olur.}$$

Metanolun çıxımına müxtəlif qiymətlər verməklə (1%, 2%, 3%, 4%, 5%) bütün hallar üçün tarazlıq sabitini və ona uyğun optimal temperaturu tapaq.

$$C_{CH_3OH} = 1\%$$

Komponentlərin parsial təzyiqlərini hesablayaq:

$$p_{in,q} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,13 = 0,39 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CH_3OH} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,01 = 3 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$p_{CO+H_2} = 3 \cdot 10^7 - 0,39 \cdot 10^7 - 0,03 \cdot 10^7 = 2,58 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO} = 2,58 \cdot 10^7 / 3 = 0,86 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{H_2} = (2,58 \cdot 10^7 / 3) \cdot 2 = 1,72 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$K_{t1} = (155000 / 109000)^2 \cdot (0,03 \cdot 10^7 / ((1,72 \cdot 10^7)^2 \cdot 0,86 \cdot 10^7)) = 2,39$$

$$\times 10^{-16} \text{ 1/Pa}^2 = (2,39 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2)$$

$$C_{CH_3OH} = 2\%$$

$$p_{CH_3OH} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,02 = 0,06 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO+H_2} = 3 \cdot 10^7 - 0,39 \cdot 10^7 - 0,06 \cdot 10^7 = 2,55 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO} = 2,55 \cdot 10^7 / 3 = 0,85 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{H_2} = (2,55 \cdot 10^7 / 3) \cdot 2 = 1,7 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$K_{t2} = (155000 / 109000)^2 \cdot (0,06 \cdot 10^7 / ((1,7 \cdot 10^7)^2 \cdot 0,85 \cdot 10^7)) = 4,95 \times$$

$$10^{-16} \text{ 1/Pa}^2 = (4,95 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2)$$

$$C_{CH_3OH} = 3\%$$

$$p_{CH_3OH} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,03 = 0,09 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO+H_2} = 3 \cdot 10^7 - 0,39 \cdot 10^7 - 0,09 \cdot 10^7 = 2,52 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO} = 2,52 \cdot 10^7 / 3 = 0,84 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{H_2} = (2,52 \cdot 10^7 / 3) \cdot 2 = 1,68 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$K_{13}=(155000/109000)^2 \cdot (0,09 \cdot 10^7 / ((1,68 \cdot 10^7)^2 \cdot 0,84 \cdot 10^7)) = 7,66$$

$$\times 10^{-16} \text{ 1/Pa}^2 = (7,66 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2)$$

$$C_{CH_3OH} = 4\%$$

$$p_{CH_3OH} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,04 = 0,12 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO+H_2} = 3 \cdot 10^7 - 0,39 \cdot 10^7 - 0,12 \cdot 10^7 = 2,49 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO} = 2,49 \cdot 10^7 / 3 = 0,83 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{H_2} = (2,49 \cdot 10^7 / 3) \cdot 2 = 1,66 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$K_{14}=(155000/109000)^2 \cdot (0,12 \cdot 10^7 / ((1,66 \cdot 10^7)^2 \cdot 0,83 \cdot 10^7)) = 10,6$$

$$\times 10^{-16} \text{ 1/Pa}^2 = (10,6 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2)$$

$$C_{CH_3OH} = 5\%$$

$$p_{CH_3OH} = 3 \cdot 10^7 \cdot 0,05 = 0,15 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO+H_2} = 3 \cdot 10^7 - 0,39 \cdot 10^7 - 0,15 \cdot 10^7 = 2,46 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{CO} = 2,46 \cdot 10^7 / 3 = 0,82 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$p_{H_2} = (2,46 \cdot 10^7 / 3) \cdot 2 = 1,64 \cdot 10^7 \text{ Pa}$$

$$K_{15}=(155000/109000)^2 \cdot (0,15 \cdot 10^7 / ((1,64 \cdot 10^7)^2 \cdot 0,82 \cdot 10^7)) = 13,7$$

$$5 \cdot 10^{-16} \text{ 1/Pa}^2 = (13,75 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2)$$

Optimal temperaturun qiymətini tapmaq üçün tarazlıq sabitinin temperaturdan asılılığından istifadə edək.

Metanolun $3,03 \cdot 10^7$ Pa (300 at) təzyiq altında və 300-400°C temperatur həddində sintezi prosesi üçün optimal temperatur və tarazlıq sabiti arasında təcrübi yolla aşağıdakı empirik asılılıq müəyyən edilmişdir:

$$\left(\left| \lg K_t \right| / 13 \right) + \left((1/T_{\text{opt}}) \cdot 10^3 \right) / 27,6 = 1 \quad (8.3)$$

Bu tənlikdə K_t 1/atm² vahidində verilmişdir. Tarazlıq sabitinin alınan qiymətlərini loqarifmləyib (5.17)-də nəzərə aldıqda optimal temperatur üçün müvafiq qiymətləri alırıq:

$$K_t^I = 2,39 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2 \quad \lg K_t^I = -5,622$$

$$K_t^{II} = 4,95 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2 \quad \lg K_t^{II} = -5,305$$

$$K_t^{III} = 7,66 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2 \quad \lg K_t^{III} = -5,116$$

$$K_t^{IV} = 10,6 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2 \quad \lg K_t^{IV} = -4,974$$

$$K_t^V = 13,75 \cdot 10^{-6} \text{ 1/atm}^2 \quad \lg K_t^V = -4,862$$

$$T_{\text{opt}}^I = 10^3 / 2,76 \left(1 - \left| \lg K_t^I \right| / 13 \right) = 10^3 / 2,76 \left(1 - 5,622 / 13 \right) =$$

$$639\text{K} = 366^\circ\text{C}$$

Həmin qayda ilə

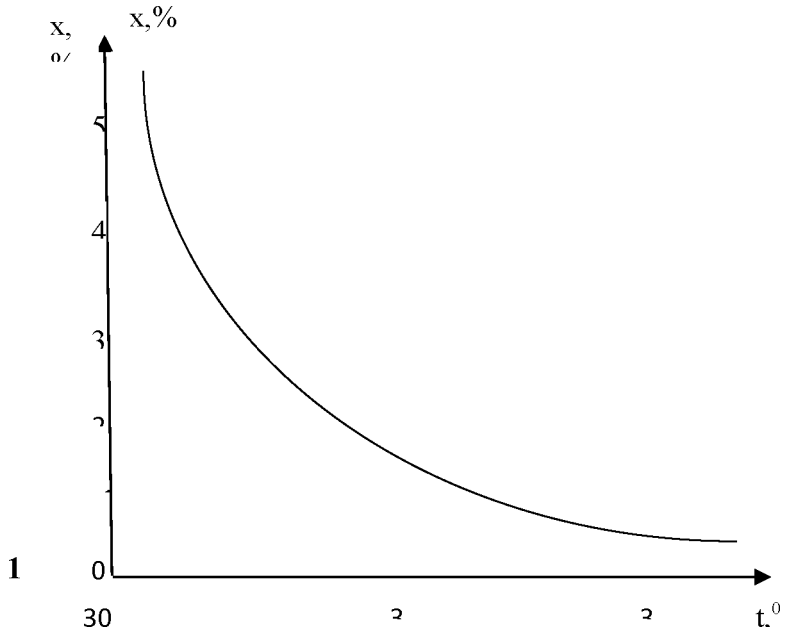
$$T_{\text{opt}}^{II} = 611\text{K} = 338^\circ\text{C}$$

$$T_{\text{opt}}^{III} = 597\text{K} = 324^\circ\text{C}$$

$$T_{\text{opt}}^{\text{IV}}=588\text{K}=315^{\circ}\text{C}$$

$$T_{\text{opt}}^{\text{V}}=580\text{K}=307^{\circ}\text{C}$$

Alınan dəlillər əsasında reaktorun hündürlüyü boyunca metanolun verilən çıxımını təmin edən optimal temperatur əyrisi qurulur (şəkil 8.1).



Şək 8.1. Optimal temperatur əyrisi

9. REAKTORLARIN ƏSAS RİYAZİ MODELƏRİ

İstilik və kütlə mübadiləsi ilə müşayiət olunan kimyəvi reaksiyaların, yəni kimya texnoloji proseslərin həyata keçirildiyi aparat kimyəvi reaktorlar adlanır. Reaktorun tipinin seçilməsinin düzgünlüyündən və onun mükəmməlliyindən bir çox hallarda bütün prosesin səmərəliliyi asılı olur.

Sənaye reaktorlarına müxtəlif tələblər irəli sürülür. Onlardan əsasları aşağıdakılardır:

1. Reaktorun işinin maksimal məhsuldarlığı və intensivliyi;
2. Məhsulun yüksək çıxımı;
3. İstismar zamanı enerji xərclərinin az olması, reaksiyanın istiliyindən daha yaxşı istifadə edilməsi;
4. Qurğunun sadə və hazırlanmasının ucuz olması;
5. İdarə olunmasının asan olması.

Bütün tələblərin eyni zamanda ödənməsi mümkün olmur.

Bütünhallarda reaktorun seçilməsində əsas məsələni iqtisadi səmərə həll edir. Daxilində kimyəvi proseslər həyata keçirilən aparatlar - reaktorlar müxtəlif əlamətlərinə görə fərqlənir. Hazırda sənayedə həyata keçirilən kimyəvi proseslərdə öz iş prinsiplərinə, konstruksiyalarına, rejimlərinə və s. görə bir-birindən xeyli fərqlənən reaktorlar tətbiq edilir.

Reaktorun tipi və onun konstruktiv tərtibatı əsas etibarilə onda aparılan reaksiyanın xarakterinə, katalizatorun olub-olmamasına və növünə, reaksiya maddələrinin faza halına, reaksiya istiliyinin miqdarına və işarəsinə, reaksiyanın aparılma temperaturuna və təzyiqinə görə müəyyən edilir [14].

Kimya reaktorlarını təsnif etdikdə onların konstruktiv xüsusiyyətlərini və işləmə metodlarını göstərən, həm də aparılan kimyəvi reaksiyaları xarakterizə edən əlamətləri nəzərə almaq qəbul edilmişdir.

Məsələn:

1. İş prinsipinə görə reaktorlar fasiləsiz, yarımfasiləsiz və dövri olurlar.

2. Reaksiya maddələrinin (reagentlərin) faza halına görə onlar homogen (birqazalılı) və heterogen (iki və daha çox fazalı) prosesləri aparmaq üçün reaktorlara bölünürlər.

3. İstilik mübadiləsi şəraitinə görə adiabatik, izotermik və politropik (yaxud qismən istilik mübadiləli) reaktorlara ayrılırlar.

4. Hidrodinamik şəraitə görə ideal çıxarma, ideal qarışma və aralıq tipli olurlar.

5. Reaksiya maddələrinin hərəkət sxeminə görə düzaxınlı, əksaxınlı və reaksiya maddələri pilləli verilən reaktorlara ayrılırlar.

6. Konstruksiyalarına görə silindrik (daxili boş, yaxud dənəvər katalizator laylı), borulu, boru boru içərisində tipli, reaksiya sobaları tipli, qarışdırıcı, qaynar laylı, pnevmoqaldırıcı (lift-reaktor) və s. reaktorlar mövcuddurlar.

Bərk katalizator üzərində qaz fazada reaksiya aparmaq üçün reaktorlarda ən mühüm məsələ qazın işçi həcmdə bərabər paylanmasının, daha doğrusu, sürətlər və ya təzyiqlər sahəsinin müntəzəm olmasının təmin edilməsidir. Əks halda reaksiya zonasının bəzi hissələrində proses qeyri-bərabər gedəcəkdir, nəticədə proses optimal rejimdən kənarlaşacaq, istilik mübadiləsi pozulacaq, məhsuldarlıq aşağı düşəcək və prosesin ümumi göstəriciləri pisləşəcəkdir. Bu halların qarşısını almaq üçün qaz axınının reaktorun işçi en kəsiyi boyunca müntəzəm paylanması təmin olunmalıdır. Bu iki əsas üsulla həyata keçirilə bilər:

1) reaktorun işçi kamerasının en kəsiyi boyunca yastı çərçivələr, doldurmalar, səpələnən material təbəqəsi vasitəsi ilə əlavə müqavimətin yaradılması;

2) yönəldici tərtibatların köməyi ilə (axının döndüyü yerlərdə kürəklər və ya lövhələr, qısa diffuzorlarda paylayıcı

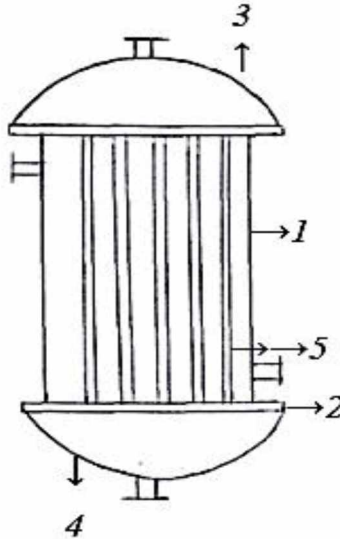
torlar və tərtibatlar qoyulması və s.). Bundan başqa kombine edilmiş qazpaylayıcı tərtibatlardan da istifadə oluna bilər.

İstilik mübadiləsinin həyata keçirilmə üsuluna görə bu reaktorlar iki qrupa: 1) divar vasitəsi ilə istilik mübadiləsində olanlar; 2) bilavasitə katalizatorla kontakt vasitəsi ilə və ya istilik daşıyıcısı ilə qarışma vasitəsi ilə istilik mübadiləsində olan reaktor. Onlar, adətən adiabatik adlanırlar.

Bu reaktorlar katalizatorun vəziyyətinə görə tərpənməz (stasionar) və hərəkətdə olan katalizator laylı reaktorlar kimi də fərqləndirilirlər.

Baxılan proseslərdə fazalar arasında kontakt məsələsi birinci dərəcəli əhəmiyyət kəsb edir, onun həyata keçirilmə üsulu isə maye katalizator üzərində qaz fazada reaksiya aparmaq üçün reaktorların təsnif edilməsinin əsasını qoyur.

Qeyd edilən əlamətlərə görə bu tip reaktorlar aşağıdakı kimi təsnif olunurlar:



Şək. 9.1. Borulu reaktor: 1.gövdə, 2.boru çərçivələri, 3.üst qapaq, 4.alt qapaq,5.borular.

1. qarışdırıcı reaktorlar;
2. mayenin mexaniki püskürdülmesi (səpələnməsi) ilə işləyən reaktorlar; mayenin mexaniki püskürdülmesi (səpələnməsi) ilə işləyən reaktorlar;
3. doldurulmalı və ya boşqablı kalon tipli reaktorlar;
4. barbotaj tipli reaktorlar;
5. təbəqə tipli (təbəqəli) reaktorlar;
6. köpüklü reaktorlar;
7. erlift tipli reaktorlar (havanın köməyi ilə mayenin qaldırılması).
8. Tərpənməz (stasionar) və hərəkətdə olan katalizator laylı reaktorlar Tərpənməz (stasionar) və hərəkətdə olan katalizator laylı reaktorlar

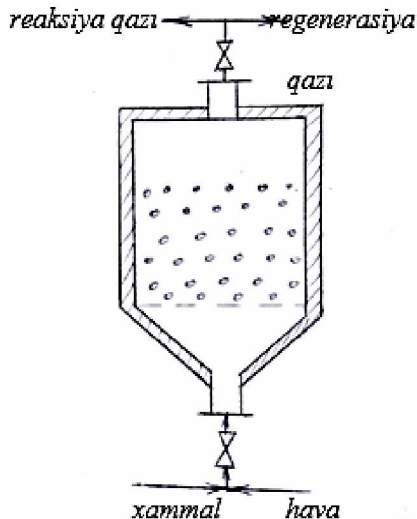
Maye katalizator üzərində qaz fazada reaksiya aparmaq üçün reaktorlara da heterogen proseslər aparılan reaktorlara qoyulan tələblər aiddir (fazalar arasında yaxşı kontakt, prosesin optimal istilik rejimi və s.).

Bütün heterogen proseslərdə olduğu kimi, qaz və maye faza arasındakı reaksiya sürəti maddənin qaz fazadan maye fazaya və əksinə diffuziya sürəti, həmçinin maye faza həcmində kimyəvi reaksiyanın sürəti ilə müəyyən olunur.

Proses diffuziya və kinetik sahələrdə gedə bilər. Prosesi kinetik sahədə aparmaq sərfəlidir, belə ki, bu halda katalizatorun maksimal məhsuldarlığı (1m^3 -dan çıxarma) təmin olunur və yanaşı proseslərin azalması hesabına məqsədli məhsulların çıxımı yaxşılaşır [18].

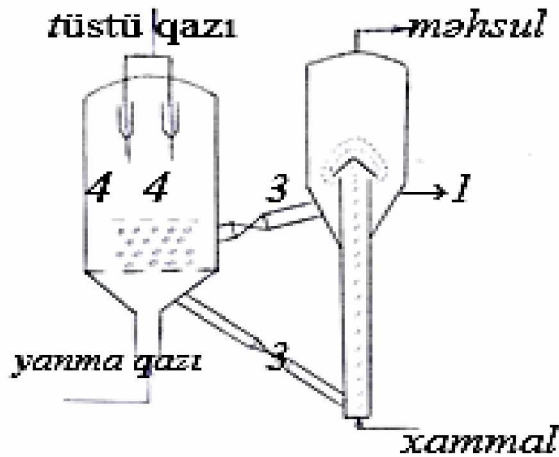
Əvvəldə qeyd etdiyimiz kimi tərpənməz katalizator laylı reaktorlardan divar vasitəsi ilə istilik mübadiləsində olan reaktorlar sənayedə istifadə olunurlar. Bu tip reaktorlara borulu tip reaktorları misal göstərmək olar. Əgər reaktorda katalizator boru daxilində yerləşirsə ona sadəcə borulu, katalizator borular arası fazada yerləşdikdə isə ona gövdə-borulu reaktor deyilir.

Prinsipal sxemdən göründüyü kimi borular daxili və borular arası fəzaların giriş və çıxışları ayrı-ayrıdır. Boru daxilində katalizator olduqda xammal həmin fəzaya verilir, istilik daşıyıcısı isə borular arası fəzaya verilir. Əksinə olduqda isə əksinə. Sənayedə konkret istehsal sahələrində müxtəlif konstruksiyalı borulu və gövdə borulu reaktorlar tətbiq olunurlar. Həmçinin tərپənməz katalizator laylı adiabatik reaktorlar da istifadə olunurlar. Həqiqi adiabatik reaktorlarda optimal rejimin saxlanması mümkün olmadığı üçün az tətbiq olunurlar. Belə reaktorlarda çox vaxt müxtəlif istilikdaşıyıcılarından və soyuducu agentlərdən istifadə olunur. Adiabatik reaktorun prinsipal sxemindən göründüyü kimi belə reaktorlar fasiləli işləyir, onlarda katalizatorun regenerasiyası da həyata keçirilir. Əgər katalizator təbəqəsinin hündürlüyü çox olarsa, reaktorda rəflər yerləşdirilir və bu rəflər üzərində tələb olunan qədər katalizator təbəqələr şəklində yığılır.



Sək. 9.2. Adiabatik reaktorun prinsipal sxemi.

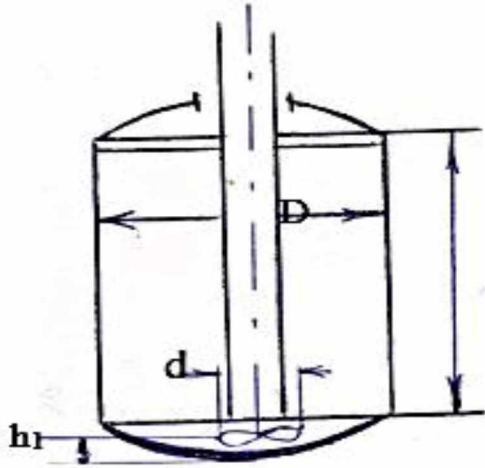
Reaktor bir neçə katalizator laylı ola bilər. Xammalın verilməsi konkret şəraitdən asılı olaraq ardıcıl, paralel, pillələrlə həyata keçirilir. Hərəkətdə olan katalizator laylı reaktorlarda katalizatorun reaksiya zonasında sabit reaksiya həcmində fasiləsiz qarışması onun əsas iş prinsipidir. Bu reaktorlar konstruksiyalarına və prosesin qanunauyğunluqlarına görə bir-birindən kəskin fərqlənirlər. Onlarda istifadə olunan katalizatorlar ölçüləri 3-5mm olan dənələr şəklində və ya 0,01-0,1mm olan toz şəklində ola bilər. Birincilərə dənəvər, ikincilərə isə tozvari katalizator deyilir. Hərəkətdə olan katalizator laylı reaktorlarda prosesin fasiləsizliyini təmin etmək üçün reaktor və regenerator bir qurğuda birləşdirilir.



Şək. 9.3. Reaktor-regenerator bəndinin prinsipal sxemi.
 1.Reaktor 2.Regenerator, 3.Katalizatorun nəqli xəttləri,
 4.Siklonlar.

Göründüyü kimi xammal katalizatorla birlikdə reaktorda hərəkət edir, reaksiya başa çatdıqdan sonra işlənmiş katalizator psevdaqaynar laylı regeneratara verilir, burada ocaqdan gələn isti yanma qazı ilə regenerasiya olunur. Tüstü qazları siklonlardan keçib utilizasiya qazanına verilir.

3) Qarışdırıcı reaktorlar bir çox hallarda maye mühitlərdə reaksiya aparmaq üçün qarışdırıcı ilə təchiz olunmuş reaktorlardan istifadə olunur. Qarışdırıcı tərtibatların əsas tipləri kürəkli, çərçivəli, propellerli, turbinli və xüsusi quluşlardan (yakorlu) ibarətdir.



Şək. 9.4. Qarışdırıcı

Qarışdırıcı reaktorların çox müxtəlif konstruksiyaları mövcuddur. Onların prinsipal sxemin aşağıdakı kimi göstərə bilərik. Qarışma prosesi üçün Reynolds kriteriyası:

$$Re_q = \rho n d^2 / \mu \quad (9.1)$$

burada ρ -mayenin sıxlığı;
 n -qarışdırıcının dövrlər sayı;

d-qarışdırıcının diametri;
 μ -mayenin özlülüğüdür.

Məlumdur ki, Eyer kriteriyası Reynolds kriteriyasının funksiyasıdır:

$$Eu_q = f(Re_q) \quad (9.2)$$

Mayenin sürtünmə qüvvəsinin dəf edilməsinə sərf olunan işçi güc aşağıdakı düsturla tapılır:

$$N = Eu \rho n^3 d^5 \quad (9.3)$$

Oradan

$$Eu = N / \rho n^3 d^5 \quad (9.4)$$

və ya

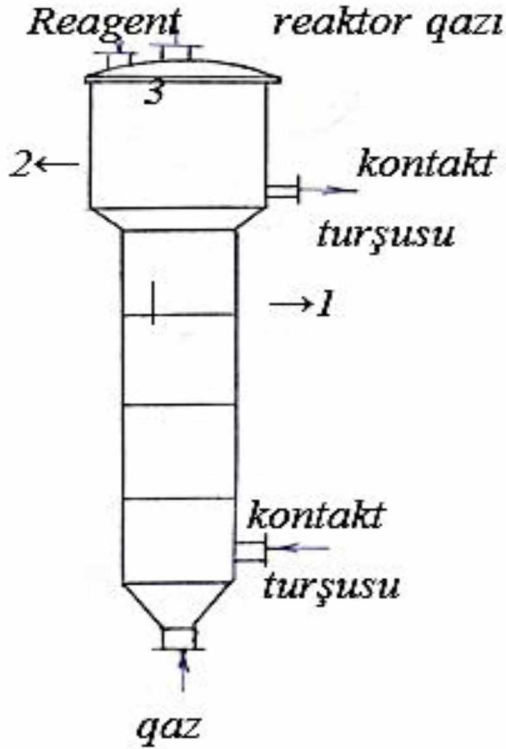
$$Eu = A / Re_q^m \quad (9.5)$$

A və m təcrubi yolla müəyyən edilən sabitlərdir.

Bütün tip qarışdırıcı reaktorlar üçün optimal həndəsi nisbətlər (H/d ; D/d) və A, m sabitləri müəyyən edilmiş və müvafiq ədəbiyyatlarda verilmişdir. Bu reaktorların qaz-maye sistemində istifadəsi zamanı kipliklə bağlı problemlər olduğu üçün kipgəcsiz reaktorlardan istifadə olunur. Qarışdırıcı reaktorlar maye fazada homogen reaksiyaların aparılması və emulsiya hazırlanması prosesləri üçün istifadə olunurlar [19].

Barbataj, təbəqəli və köpüklü tipli reaktorlar, qaz-maye sistemi üçün nisbətən sadə və daha geniş yayılmış reaktor tiplidir. Bu tip reaktorlar katalizator mayesi doldurulmuş kalon şəklində olur. Qazsəpələyici vasitəsi ilə aşağıdan aparata verilir, bu halda aparatın en kəsiyi boyunca qazın müntəzəm paylanması

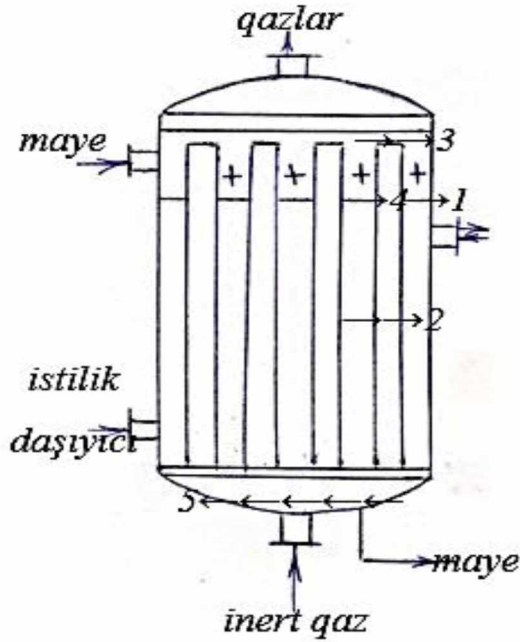
təmin olunur, qaz maye təbəqəsindən barbataj edərək genişləndiriyiciyə düşür. Burada onun sürəti azalır, maye damcılarında azad olur və aparatdan çıxarılır.



Şək. 9.5. Barbatoj tipli reaktor.
1.gövdə, 2.genişləndirici, 3.damcıtutan

Reaktor müəyyən həcmdə katalizator məhlulu ilə doldurulur. Onun dəyişdirilməsi dövrü olaraq reaktorun dayanmasını tələb edir. Lakin, çox vaxt təzə katalizatorun yuxarıdan çıxarılması fasiləsiz həyata keçirilir.

Qaz və maye arasında yüksək kontakt dərəcəsi təbəqəli reaktorlarda əldə olunur. Bu tip reaktorlarda maye nazik təbəqə şəklində boruların daxili səthi ilə axır. Belə aparatlar diffuziya sahəsində gedən prosesləri aparmaq üçün rahatdır.



Şək. 9.6. Təbəqəli reaktor.

1.reaksiya kamerası, 2.borular(işçi borular), 3.qaz çıxaran borular, 4.daşdırıcı kamera, 5.nippel

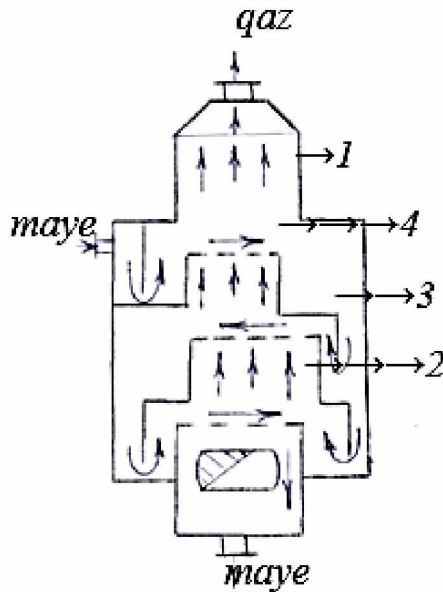
Reaktor reaksiya kamerasından, borulardan, çıxışdan, hər bir boru üçün daşdırıcı kameradan ibarətdir. (1) kamerasında əsas çevrilmə gedir, reaksiya mayesi kalibrələnmiş nippellərdən (5) keçib daşdırıcı kameralara (4) axır, sonra müntəzəm təbəqə

şəklində işçi boruların daxili səthi ilə axır, təbəqəyə qarşı isə inert qaz verilir. Borular arasına istilikdaşıyıcı verilir.

Nəticədə desorbsiya üçün yaxşı şərait yaranır və reaksiya başa çatır [20].

Köpüklü reaktorlarda qaz qabarcıqları böyük sürətlə maye təbəqəsinə daxil olur. Nəticədə reaksiya kütləsi güclü qarışır və hərəkət edən köpük əmələ gəlir.

Bu tip reaktor metal gövdədən (1), daxilində bir-birindən bərabər məsafədə yerləşdirilən pertorforasiya olunmuş boşqab çərçivədən (2) ibarətdir. Boşqablar keçidlərlə (4) təchiz olunmuşdurlar. Boşqabdan boşqaba mayenin axması daşdırıcı tərtibatlarla (3) həyata keçirilir



Şək. 9.7. Köpüklü reaktor(üçrəfli)
1-gövdə, 2-çərçivə,3-daşdırıcı tərtibat,
4-keçid(nopor)

Qaz aparata aşağıdan daxil olur, ardıcıl olaraq bütün çərçivələri keçir, bu çərçivələrdə çarpaz axınla yuxarı çərçivəyə verilən maye keçir. Boşqablarda mayenin səviyyəsi keçidin (4) hündürlüyü ilə tənzim olunur, bu da tələb olunan hündürlükdə köpüyün alınmasını təmin edir. Köpüklü aparatlar konstruksiyasına görə torvari boşqablı kalonlardan az fərqlənir.

Reaktorların hesabı

Reaktorların hesablanması və layihələndirilməsi üçün kimyəvi prosesin mahiyyətini əks etdirən və onu fiziki-kimyəvi, rejim və idarəetmə parametrləri ilə əlaqələndirən bütün riyazi asılılıqların məcmusu və reaktorun konstruktiv xüsusiyyətləri məlum olmalıdır. Bu asılılıqlar məcmusu riyazi model adlanır və adətən, kinetik tənliklərdən, kütlə-istilik mübadilə tənliklərindən, hidrodinamiki, maddi və istilik balans tənliklərindən və s. ibarət olur.

Prosesin bütün xüsusiyyətlərini əks etdirən real riyazi model çox mürəkkəbdir. Ona görə də sadələşdirilmiş ideal modellərdən istifadə olunur. Adətən üç tip ideal reaktorları fərqləndirirlər:

- a) dövrü tam qarışma reaktoru;
- b) ideal çıxarma reaktoru;
- c) ideal qarışma reaktoru.

Dövrü tam qarışma reaktorunda qapalı sistemdə riyazi model reaksiyanın sürət tənliyi ilə müəyyən olunur:

$$dC_i/d\tau = W_i \quad (9.6)$$

burada C_i –reaksiya kütləsinin i -ci komponentinin qatılığı;

τ – komponentlərin reaktorda qalma müddəti;

W_i – formal kinetikanın tənliyi ilə müəyyən edilən reaksiya sürəti;

$$W_i = f(T, C)$$

Məsələn, izotermik dönməyən bir tərtibli $A \rightarrow B$ reaksiyası üçün model:

$$dC_A/d\tau = -kC_A \quad (9.7)$$

olacaqdır.

$$\tau=0 ; C_A=C_{A0} ; \tau=\tau_s ; C_A = C_{As}$$

onda

$$\ln (C_{As}/C_{A0}) = -k\tau_s \quad \text{və} \quad C_{As} = C_{A0}e^{-k\tau_s} \quad (9.8)$$

$f_i = C_i/C_{i0}$ ilə işarə etdikdə i komponentinə görə hesablama üçün daha asan tənlik alırıq:

$$f_A = C_{As}/C_{A0} = e^{-k\tau_s} \quad (9.9)$$

İdeal çıxarma reaktorunda axının hər bir en kəsiyi qarışmadan öz-özünə paralel hərəkət edir; porşenin boruda hərəkətinə oxşayır.

Riyazi model kimi

$$dC_i/dl = 1/\omega \cdot W_i \quad (9.10)$$

burada l -reaktorun uzunluğu; ω -axınının xətti sürətidir.
 $l = \omega \tau$ və $dl = \omega dt$ əvəzlənməsi aparsaq

$$dC_i/dt = W_i \quad (9.11)$$

alırıq.

Bu tənlik dövrü işləyən tam qarışma reaktorunun maddi balans tənliyinə tamamilə oxşardır.

Dövrü işləyən tam qarışma reaktorunda daxil olan hissəciklərin onda olan hissəciklərlə qarışdırıcı vasitəsi ilə ani olaraq tam qarışması təmin olur.

Nəticədə reaksiya kütləsində C_i qatılığı başlanğıc C_{i0} qatılığından az olacaq və çıxışdakı qatılığa bərabər olacaqdır. İdeal riyazi model maddi balans tənliyindən çıxarılır:

$$C_i = C_{i0} + W_i \tau \quad (9.12)$$

burada τ –komponentlərin reaktorda orta qalma müddətidir və aşağıdakı kimi tapılır:

$$\tau = V/v \quad (9.13)$$

burada V –reaktorun işçi həcmi,
 v - həcmi sürətdir.

$$f_i = 1 + W_i \tau / C_{i0} \quad (9.14)$$

Əslində sənayedə bu cür ideal reaktorlar yoxdur. Onların kombinə edilmiş variantları və daha mürəkkəb reaktorlar

mövcuddür. Ona görə də hər bir reaktoru hesablayanda onun fərdi xüsusiyyətləri nəzərə alınmalıdır.

Reaktorların əsas ölçüləri isə iş rejimindən asılı olaraq reagentlərin reaktorda qalma müddəti, axınların verilmə sürəti və digər parametrlər əsasında hesablanır. Ümumi şəkildə hesablamaları aşağıdakı ardıcılıqla aparmaq olar:

Reaksiya qarışığının reaksiya zonasında qalma müddəti müxtəlif üsullarla ifadə edilir:

Həqiqi orta müddət:

$$\tau = V_r \cdot \varepsilon / V \quad (9.15)$$

Xammalın verilməsinin həcmi sürətinin (q) tərs qiyməti kimi şərti orta müddət (τ_0)

$$\tau_0 = 1/q = V_r / V_D \quad (9.16)$$

Xammalın verilməsinin kütlə sürətinin (q) tərs qiyməti kimi tapılan şərti orta müddət (τ_m):

$$\tau_m = 1/g = G_k / G = V_r \cdot c / G \quad (9.17)$$

burada V_r -reaktorun işçi həcmi;

G -reaksiya qarışığının orta həcmi serti;

V -reaktorda reaksiya qarışığının orta həcmi serti;

G_k -reaktorun işçi həcmindəki katalizatorun kütləsi;

C -reaksiya zonasında katalizator hissəciklərinin qatılığı;

ε -aparata katalizator layının (doldurmanın)

məsaməliliyi;

$q = V_0 / V_r$ -xammalın verilməsinin həcmi sürəti, san^{-1} ;

$g=G/G_k$ -xammalın verilməsinin kütlə sürəti, san^{-1}
 V_D -dövrən edən katalizatorun həcmidir.

Dövrən edən katalizator olduqda onun orta qalma müddəti tapılır:

$$\tau_k = G_k / G_D = V_r \cdot c / G_D \quad (9.18)$$

burada G_k -baxılan zonada katalizatorun kütləsi;
 G_D -dövrən edən katalizatorun kütlə sərfi;
 c - zonadakı katalizatorun qatılığıdır.

Yuxarıda göstərilən (9.15-9.18) tənliklərdən, reaktorun işçi zonasını xarakterizə edən, əsas parametrləri əlaqələndirən aşağıdakı asılılığı alırıq:

$$V_r = \tau \cdot V / \varepsilon = V_0 / q = \tau_0 V_0 = G / g c = \tau_m G / c = \tau_k G_D / c = G_k / c \quad (9.19)$$

(9.19)-dan istifadə edərək təcrübi tapılmış qalma müddətinin, yaxud verilmə sürətinin qiymətlərinə əsasən reaksiya zonasının həcmi tapmaq olar.

Reaksiya zonasının en kəşik sahəsi başqa aparatlardakı kimi, axının yol verilə bilən sürətindən asılı olaraq, sərf tənliyinə əsasən hesablanır:

$$S = V / \omega = V_0 / \omega_0 = G / u \quad (9.20)$$

burada ω və ω_0 – uyğun olaraq V və V_0 sərfələrinə əsasən hesablanmış fiktiv həcmi sürətlərdir (yəni tam en kəşiyinə görə);
 $u = G / S$ -axının yol verilə bilən kütlə sürəti;

G-reaksiya qarışığının kütlə sərfidir.
Reaksiya zonasının hündürlüyü (uzunluğu)

$$H_r = V_r / S \quad (9.21)$$

Reaktorun tam hündürlüyü

$$H = H_r + H_0 \quad (9.22)$$

Burada H_0 -reaksiya zonasından əlavə hündürlüyüdür (məs. qaynar lay üzərində).

Texnoloji təcrübə sübut edir ki, eyni polimerin alınması bir sıra rəqabətli üsullarla həyata keçirilə bilər. Məsələn poliformaldehidin istehsalında asetillənmiş homopolimerin və sopolimerin alınmasının müxtəlif rəqabətli üsulları vardır: monomer formaldehiddən, trioksindən alınma və s. Bu halda üstünlük meyarı kimi texnoloji prosesin iqtisadi cəhəti əsas götürülür [21].

Kimyəvi reaksiyalarda heç də həmişə ilkin molekulların reaksiya məhsullarının molekullarına çevrilməsi birbaşa olmur. Əksər hallarda reaksiya bir neçə mərhələdə gedir. Kimyəvi reaksiyanın mərhələlərinin birləşməsinə kimyəvi reaksiyanın mexanizmi deyilir.

Kimyəvi çevrilməni öyrənərkən 1-ci növbədə reaksiyanın mexanizmini müəyyən etmək lazımdır. Bu kinetik tənliyin konkret növünü özündə şərtləndirir. Məlumdur ki, kimya reaksiyasının stexiometrik tənliyi maddənin hansı miqdarı nisbətində qarşılıqlı təsirdə olmasını göstərir.

Kinetik modelin işlənilməsinə bir sıra materiallar həsr edilmişdir. Xüsusilə radikal polimerləşməyə aid çoxlu monoqrafialar yazılmışdır. Amma polimerləşmənin kinetikası və mexanizmi məsələlərinə, polimerlərin alınması və kinetik

modelin qurulmasına Şvarsın monoqrafiyasında geniş baxılmışdır.

Polimerləşmə prosesini intensivləşdirmək üçün yüksək təzyiqdən istifadə edilir. Bu prosesin kinetikasi Şvarsın işlərində öz əksini tapmışdır.

Riyazi metodların inkişafı, EHM-nın istifadəsi və həmçinin də polimer prosesləri sahəsində yığılmış material reaktorların tiplərinin seçilməsi ,rejimin müəyyənlişməsi kimi vacib məsələlərin elmi əsaslandırılmasına imkan verir. Bu işə öz növbəsində əvvəlcədən planlaşdırılmış müəyyən struktura malik məhsulun alınmasını şərtləndirir.

Lakin nəzərə almaq lazımdır ki, sənaye polimer proseslərinin riyazi modelləşdirilməsi olduqca mürəkkəbdir və onun həlli çox çətindir. Əsas çətinliklərdən biri ondan ibarətdir ki, elementar sabitlərin məhlulun özlülüyündən asılılığı məlum olmalıdır.

Texnoloji polimerləşmə proseslərinin daha bir vacib aspekti miqyaslaşdırma məsələsidir, yəni laboratoriya reaktorundan yarımşənaye və sənaye reaktorlarına keçid problemidir. Reaktorun ölçülərinin dəyişdirilməsi hidrodinamik və temperatur rejimlərinin dəyişilməsinə gətirib çıxarır. Aşkardır ki, bunlar prosesin kinetikasına və məhsulun molekulyarkütlə ölçülərinə təsir edir. Odur ki, riyazi modelləşdirmədə bu güclü vasitələrdən biri də riyazi miqyaslaşdırma üsuludur. Xüsusilə kimya texnologiyası proseslərinin hesablanması, analizi, optimallaşdırma və proqnozlaşdırma məsələlərinin həlli bu üsulsuz mümkün deyil.

İstənilən kimyəvi-texnoloji proses, adətən mayelərin, qazların və bərk cisimlərin maddə axınlarının yerdəyişməsi ilə müşahidə olunur. Axınlar bir fazalı ola bilərlər, yəni bütövlükdə bir fazadan ibarət olurlar. Axınlar çox fazalı da olurlar. (çox zaman 2 fazalı). Əgər proses bir neçə fazaların qarşılıqlı təsiri ilə baş verirsə, buna çoxfazlı axınlar deyilir. Məs: qaz-maye, maye-bərk cisim, qaz-bərk cisim. Ona görə də riyazi modeli

tərtib edərkən maddənin axınının hərəkətini ifadə etmək xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Lakin real axınların hidrodinamikası o qədər mürəkkəbdir ki, indiki vaxtda yalnız tək fazalı axınlar üçün ümumi şəkildə tənlikləri (Navyc-Stoks tənliyi) tərtib etmək mümkün olur.

Bu tənliklərin həllini isə yalnız xüsusi halda tapmaq olar. Çox fazalı axınlar üçün hələ də heç ümumi halda hidrodinamik tənliyi tərtib etmək mümkün olmamışdır.

Prosesin termodinamik, kinetik və hidrodinamik mexanizmləri haqqında tam məlumat olduqda sistem üçün riyazi model tərtib edilir. Tənliklərin naməlum sabitlərini təyin etmək üçün və adekvatlığını yoxlamaq üçün təcrübi tədqiqatlar aparılır.

Təcrübi tədqiqatlar passiv və aktiv olur. Passiv təcrübi tədqiqatlar ənənəvi üsuldur. Bu üsulla təcrübə apardıqda sistemin hər bir funksiyasını növbə ilə dəyişməklə həddən artıq çoxlu miqdarda təcrübələr qoyulur.

Aktiv təcrübələr isə əvvəlcədən hazırlanmış və elmi əsaslanmış plan üzrə aparılır ki, bu da təcrübənin planlaşdırılmasıdır.

Təcrübənin planlaşdırılması 30-cu illərdə ingilis alimi R.Fişer tərəfindən təklif edilmişdir. Lakin hazırda işlədilən və geniş yayılmış təcrübənin ekstremal planlaşdırılması üsulu Amerika alimi Boksun işləri ilə bağlıdır.

Hazırda təcrübənin planlaşdırılması üsulu laboratoriya və yarımvazod poseslərinin öyrənilməsinə nisbətən sənaye şəraitində daha geniş istifadə edilir.

Neft kimyası və kimya texnologiyası sahəsində nəzəri üsullara, o cümlədən riyazi modelləşdirməyə geniş yer verilir, çünki hesablanma texnikasının inkişafı bu məsələlərə geniş meydan açmışdır. İndiki şəraitdə nəzəri hesablamaların aparılması daha səmərəlidir, ona görə ki, çox hallarda proseslər haqqında eyni geniş məlumat almaq təcrübi yola nisbətən hesablama yolu ilə daha sadə olur.

Kimya texnologiyası proseslərinin riyazi modelləşdirilməsinin gedişində olduqca mürəkkəb və çətin məsələ riyazi ifadə etmədir. Bu riyazi ifadə etmənin, müvəffəqiyyətli həlli modelin öyrənilən prosesin fiziki-kimyəvi xassələrini nə dərəcədə əks etdirməsindən çox asılıdır.

Riyazi modellərin tərtib edilmə sxemini hər bir hal üçün vermək olmaz, lakin riyazi modelləşdirmənin mənasından belə çıxır ki, riyazi modelləşdirməni modelləşdirilən obyektin hissələri üzrə aparmaq lazımdır. Belə ki, məlumdur ki, real proses özündə elementar prosesləri cəmləşdirir.

Riyazi modelin tərtibi praktiki olaraq mərhələlər üzrə həyata keçirilir. Bunun üçün blok prinsipi tətbiq olunur. Bu prinsipə əsasən hər bir blok riyazi modelləşdirilir. Adətən riyazi modelin qurulması elə elementar proseslərin qurulması mərhələsindən başlanır ki, baxılan obyekt üçün olduqca əhəmiyyətlidir. Sonrakı mərhələlərdə digər parametrlər arasında mümkün əlaqələr müəyyənləşdirilir.

Son mərhələ-bütün əvvəlki mərhələlərdə əldə olunmuş ifadələrin birlikdə ümumi yeganə tənliliklər sistemini qurmaqdan ibarətdir. Bu tənliliklər sistemi obyektin riyazi modeli adlanırlar. Mərhələlərin sayı, onların tərkibi və ardıcılığı konkret məsələdən asılıdırlar.

Modelləşdirmənin iki üsulu mövcuddur: riyazi və fiziki modelləşdirmə.

Riyazi model tərtib edilərkən tənlilikləri iki üsulla seçib sistem halına gətirirlər:

- 1) Simvolik metodla riyazi modelin tərtibi;
- 2) Formal empirik riyazi münasibətlərin seçilməsi.

Simvolik riyazi model proseslərin fiziki-kimyəvi mahiyyətini dərindən öyrənməyə əsaslanır. Bu üsulu tətbiq edərkən klassik qanun və tənliliklərdən istifadə edilir. Bunlar

kütlə mübadiləsi, istilik mübadiləsi, kimyəvi kinetika, hidrodinamika və mexaniki prosesləri təsvir edir.

Formal-empirik üsulla alınan model kimya texnologiyası sistemlərinin statistik tədqiqatları nəticəsində alınan riyazi ifadələrə əsaslanır. Ona görə ona statistik model də deyilir. Bu halda parametrlər arasında reqressiya münasibətləri yaradılır.

Simvolik riyazi modellər həm keyfiyyət, həm də miqdarı cəhətdən prosesi daha düzgün əks etdirir. Simvolik riyazi modelləşdirmədə ardıcıl olaraq aşağıdakı məsələlər həll edilir:

1) kinetik modelin tərtib edilməsi, yəni kimyəvi proses üçün limit mərhələsinin və onu əks etdirən tənliyin tapılması;

2) ümumi riyazi modelin işlənməsi, yəni hidrodinamik, kinetik, kütlə və istilik mübadilələri, mexaniki prosesləri əks etdirən tənliklərin seçilməsi;

3) model tənliklərinin həll edilməsi;

4) model parametrlərinin identifikasiyası, yəni eksperimental materialdan və riyazi modeldən istifadə etməklə tənliklərə daxil olan parametrlərin ədədi qiymətlərini müəyyənləşdirmək;

5) optimallaşdırmanın və optimal parametrlərin və rejimin göstəricilərinin hesablanması.

Proses haqqında lazımi informasiya almaq üsullarından biri olan fiziki modelləşdirmədən istifadə etdikdə, oxşarlıq nəzəriyyəsi tətbiq edilir.

Riyazi və fiziki modelləşdirmə üsullarının hər ikisindən eyni zamanda istifadə etdikdə daha etibarlı göstəricilər alınır, az riskə yol verilir və həm də qarşılıqlı nəzarətə imkan yaranır.

Yuxarıda deyildiyi kimi riyazi modelləşdirmə aparılanda ilk növbədə fiziki-kimyəvi proseslərin kinetikasının parametrlərini hesablamaq lazım gəlir. Bu zaman üç məsələ həll edilir:

- sistem komponentləri qatılıqlarının zamandan asılılıq qanunauyğunluqları;

- reaksiyaların sürət sabitlərinin təyin edilməsi;

- analiz və limitləşdirici mərhələnin tapılması.

Hazırda kimyəvi kinetikanın qeyri-stasionar üsullarla tədqiqinə daha geniş yol verilir. Çünki keçid rejimləri stasionar halın yaxınlaşdığını göstərir, bu isə reaksiya gedişinin xüsusiyyəti haqqında vacib informasiyadır. Reaksiyaların qeyri-stasionarlığının əsas xarakteristikası relaksasiya müddətlidir. Relaksasiya dedikdə reagentlərin qatılıqlarının kəskin dəyişməsi nəticəsində və ya başqa amillərin təsirindən stasionar halın çatması başa düşülür. Relaksasiya xasiyyətinin analizi stasionar və qeyri stasionar kinetikanın bir sıra mühüm məsələlərini həll etməyə imkan verir.

Burada reaksiyaların mexanizmlərinin müəyyənləşdirilməsi, elementar reaksiyaların sürətlərinin təyin edilməsi, kritik hadisələrin baş verməsinin mümkünlüyünün tədqiqi və s. kimi məsələlərin həlli nəzərdə tutulur. Relaksasiya zamanı ilə sürət sabitləri arasındakı qarşılıqlı əlaqə yaradılması üsulları da təfəsilatı ilə baxılmışdır. Burada bu məsələlərin həm nəzəri, həm də praktiki əsasları verilmişdir. Kimyəvi-texnoloji proseslərin və aparatların effektivliyinin və işlənmələrinin keyfiyyətinin yüksəldilməsi məqsədilə kimyəvi-texnoloji tədqiqatların prinsipcə yeni alət təchizatının yaradılması üzrə kompleks işlər görülmüşdür.

Çox saylı və bir qayda olaraq çox amilli kimyəvi-texnoloji proseslərin tədqiqi kifayət qədər əmək tutumlu, uzun sürən və baha başa gələn eksperimentlərin qoyulmasını tələb edir. Ona görə effektivliyin yüksəldilməsi və belə tədqiqatların aparılması müddətlərinin ixtisar edilməsi işin eksperimental hissəsinin elə optimal təşkilindən çox asılıdır ki, bu zaman qoyulan təcrübələrin minimal sayında proses haqqında ən çox miqdarda informasiya almaq mümkün olsun.

Hazırda, əsasən, təcrübələrin aparılmasının və onların nəticələrinin işlənməsinin iki üsulundan istifadə edirlər. Birincisi, əksər hallarda mümkün olan vahid üsuldur, obyektin təbii işləməsi prosesində yığılmış informasiyanın işlənməsinə

əsaslanmışdır. Onun istifadəsi informasiyanın kifayət qədər böyük massivlərinin toplanması ilə əlaqəlidir ki, bunların da işlənməsi EHM-nin tətbiqini tələb edir.

İkinci üsul təcrübələrin planlaşdırılmasının riyazi aparatının istifadəsinə əsaslanır və əvvəlcədən tərtib edilmiş plan üzrə aktiv təcrübənin aparılmasını nəzərdə tutur. Bu üsul təcrübələrin minimal sayı ilə obyekt haqqında lazımı informasiyanın alınmasını təmin edən eksperimentin aparılmasının optimal sxemini seçməyə imkan verir. Baxmayaraq ki, aktiv eksperimentin planlaşdırılmasına kibernetikanın istiqamətlərindən biri kimi baxılır, tarixən o, kibernetika ideyalarının formalaşmalarından əvvəl yaranmışdır.

Təcrübənin planlaşdırılmasının əsasını qoyan məşhur ingilis riyaziyyatçısı R.Fişeri hesab edirlər ki, onun da işlərilə bu elmi istiqamətin başlanğıcı qoyulmuşdur. Təcrübənin müasir planlaşdırılmasının əsasları Boks və Uilson tərəfindən 1951-ci ildə qoyulmuşdur. Bunla da əmil planlaşdırmalarını optimum sahəsində əsaslandırılması tamamlandı və onu polinom şəklində şərh etdilər (ortoqonal planlar). Rototabel planlaşdırılmasının prinsipini Boks və Xanter 1957-ci ildə formalaşdırmışdılar. Keçmiş SSRİ-də təcrübənin planlaşdırılmasının inkişafını 1960-cı ilə aid etmək olar və bu, V.V.Nalimovun, onun şagirdlərinin və davamçılarının adları ilə əlaqədardır.

Təcrübənin planlaşdırılması üzrə həm nəzəri, həm də təcrübə işlərin sayı, hazırda olduqca çoxdur. Təcrübənin planlaşdırılması üzrə birinci əsaslı iş V.V.Nalimovun və N.A.Çernovanın monoqrafiyası olmuşdur. Onda təcrübənin planlaşdırılması üsullarının xeyli böyük dairəsi şərh edilmişdir, özü də ciddi riyazi formada və misallarla təchiz edilmişdir. V.V.Nalimovun digər monoqrafiyasında olduqca aydın və ciddi təcrübənin planlaşdırılmasının əsas ideyaları və istiqamətləri şərh edilmişdir. Fundamental əsərlərin siyahısına həm də onun işi məxsusdur ki, bunda da praktiki olaraq təcrübənin

planlaşdırılmasının bütün istiqamətləri kimyəvi texnologiya misallarında baxılmışdır.

Qeyd edildiyi kimi, hazırki vaxta qədər təcrübələrin planlaşdırılmasının riyazi üsulları bir çox praktiki məsələlərin həll edilməsinə imkan verirlər. Lakin eksperimental verilənlərin düzgün işlənməsi üsulunun seçilməsi olduqca mürəkkəbdir və əksər hallarda yalnız bu sahənin mütəxəssisinin gücü çatır. Təcrübədə isə verilənlərin eksperimental massivinin işlənməsi və interpretasiyası məsələlərini xüsusi riyazi hazırlığı olmayan kimyaçılar həll etməli olurlar, onlar yalnız əlçatan sorğu ədəbiyyatından istifadə edirlər ki, bunlar da həmişə eksperimentin bu və ya digər məsələləri üzrə işlənmələrin müasir vəziyyətini həmişə əks etdirmir. Digər tərəfdən, eksperimental verilənlərin işlənmələrinin mürəkkəbləşməsi EHM-lərin intensiv istifadəsinə və eksperimentlərin planlaşdırılmasının tətbiqi aspektlərinin güclü artmasına və onun kompüterləşdirilməsinə gətirir [12-25].

Kimyəvi-texnoloji sistemlərin modellərin çox formalı olmaları, kinetik eksperimentlərin aparılma şəraitlərinin, eksperimentlərin planlaşdırılması məsələlərinin müxtəlif qoyulmalarının çoxluğu kinetik eksperimentlərin optimal planlarının kifayət qədər tamam yığımının işlənməsi imkanını aradan qaldırır. Bununla əlaqədar olaraq, tətbiqi proqramlar paketlə (TPP) böyük maraq doğururlar ki, bunlar da optimal planlaşdırmanın spesifik məsələlərinin həllinə və kinetik verilənlərin işlənməsinə yönəlmişdirlər.

Təcrübəçinin sifarişilə TPP-nin köməyilə EHM-da kinetik eksperimentin optimal planı sintez oluna bilər. Hazırda qeyri-xətti modellərin qurulması zamanı eksperimentin planlaşdırılması üzrə artıq TPP yaradılmışdır. Ümumiyyətlə modelləşdirmə - müxtəlif proseslərin və hadisələrin təsvirinin yayılmış üsullarından biridir. Hazırda elmi-tədqiqatlar və mühəndis tərtibatında modelləşdirmənin çox saylı üsulları məlumdur və geniş istifadə olunur.

Həll olunan məsələlərin müxtəlifliyinə və çətinliyinə baxmayaraq, katalitik pro-seslərin reaktorların işlənilib hazırlanması metodologiyası strukturlaşdırılmış ierarxik yanaşmaya əsaslanır. Bu yanaşmanın məğzi müxtəlif səviyyələrdə məsələlərin ardıcıl həll olunmasıdır: kinetik tənlik, katalizatorun dənəsində və layında gedən prosesin ri-yazi modeli, reaktor hesabı, tam kimya texnoloji sxem. Bu zaman əvvəlki mərhələdə alınan bütün məlumatlar sonrakı mərhələnin bir hissəsi olur.

Modelləşdirmənin birinci mərhələsi kinetik modeldir. Kinetik modelin məzmunluluğu onun qurulması üsulundan asılıdır.

Kimya prosesləri reaksiya həcminin və ya reaksiya mühitinin mol saylarının dəyişməsi ilə müşayiət olunur. Əvvəllər kimya proseslərinin modelləşdirilməsində bu faktlar nəzərə alınmırdı, bu da modelin dəqiqliyinə xələl gətirirdi və konkret sənaye proseslərinin işlənilib hazırlanmasında parametrlərin düzəliş edilməsinə ehtiyac duyulurdu. Reaksiya sisteminin mollarının sayının dəyişməsi nəzərə alındıqda model daha korrekt olur, maddənin və istiliyin saxlanması qanunları gözlənilir.

Hazırda praktikada kimya reaktorlarının məhsuldarlığının artırılması məsələsi reaktorların ölçülərinin artırılması hesabına yox, texnoloji proseslərin gedişatının yeni üsullarının işlənilib hazırlanması və optimal idarəetmə hesabına həll olunur. Proseslərin optimallaşdırılması riyazi modelləşdirmənin ən mühüm mərhələlərindən biridir.

Katalitik proseslərin optimallaşdırılması məsələsi iki mərhələdə həll olunur. Katalitik proseslərin optimallaşdırılmasının birinci mərhələsi kinetik model əsasında aparılır. Məhz bu mərhələ fiziki-kimyəvi qanunauyğunluqları nəzərə almaqla prosesin limit göstəricilərinin tapılmasına imkan verir.

İkinci mərhələ - texnoloji optimallaşdırma reaktorun optimal konstruktiv və rejim parametrlərinin: həndəsi ölçülər,

formalar, düyünlər, reaksiya komponentlərinin daxiledilmə sürəti, temperatur, təzyiq, qatılıq və s., seçilməsindən ibarətdir.

İndiki zamanda modelləşdirmə ümumi elmi-tədqiqat metodu kimi getdikcə daha böyük rol oynayır və ən müxtəlif sahələrdə konkret elmi və texniki məsələlərin həllində tətbiq olunur. Biliklərin və əqli fəaliyyət elementlərinin avtomatlaşdırılmasının sintezinin getdiyi bir vaxtda modelləşdirmə metodunun rolu daha da artır. Modelləşdirmənin məğzi ondan ibarətdir ki, obyekt bu və ya digər modellə əvəzlənərək məlum metodologiya vasitəsilə təcrübi tədqiq olunur.

Əsasən modelləşdirməni iki yerə ayırırlar: fiziki və riyazi. Fiziki modelləşmədə proses əsasən fiziki model üzərində müxtəlif miqyaslarda aparılır və fiziki kəmiyyətlərin xətti və ölçü kəmiyyətlərinin təsiri analiz edilir. Təcrübə əsasən birbaşa tədqiq olunan proses üzərində aparılır.

Real sistemin riyazi modelin riyazi formullar və həmçinin riyazi modelin köməyi ilə öyrənilən formal abstrakt obyekt sayılır.

Təbiətdə gedən real proseslərin öyrənilməsində əsas rolu riyazi formaləşdirilmiş modellər oynayır. Riyazi model üsulu qısa bir müddətdə kimya texnoloji proseslərin hesablamaları və təcrübələrində tətbiq olunur. Riyazi modelləşdirmə elmi-tədqiqat üsulu sayılır. Bu model proseslərin bütün parametrləri arasında əlaqə yaradır və EHM-lərin köməyi ilə onları idarə etməyə imkan verir.

Hesablama texnikası sahəsində sürətli inkişaf, modelləşdirmə metodu sahəsində təkliflərin artması və insan tərəfindən maşın imitasiyalı sistemlərin yaranması modelləşdirmə prosesinin həmişə riyazi təmin olunmasını tələb edir. Bu cür sistemlər real modelləşən dinamik modellərin ümumiləşdirilməsi sayılır.

Kimyəvi texnoloji proseslərin alınmış riyazi modellərini həmin proseslərin optimal layihələndirilməsi və aparılması üçün tətbiq edirlər. Yüksək sürət, təzyiq, temperaturda aparılan

müasir çox fazalı kimyəvi texnoloji proseslərin əsas xüsusiyyəti onların mürəkkəbliyidir. Bu mürəkkəblik çoxsaylı və mürəkkəb növ parametrlərin olması, onların arasında çoxsaylı əlaqələrin və qarşılıqlı təsirlərin və bir parametrin dəyişməsi, digər parametrin qeyri-xətti dəyişməsinə səbəb olmasında daha qabarıq aşkara çıxır.

Parametrlərin çoxluğu, sistemin mürəkkəbliyi, informasiyanın genişliyi riyazi modelləşmədə bizi əsas prosesi xarakterizə edən parametrləri seçməklə bir növ sistemi sadələşdirməyə məcbur edir.

Son illər o, həmçinin, fasiləsiz proseslərin modelləşdirilməsi üçün və mürəkkəb sistemlərin müxtəlif idarəetmə və tənzimləmə prinsiplərinin istifadə edilməsində tətbiq edilir. Təbiətdə gedən real proseslərin öyrənilməsində əsas rolu riyazi modelləşdirmə oynayır.

Kimya sənayesinin indiki və sonrakı inkişaf problemləri kimya texnologiyasının bir çox məsələlərinin düzgün və rəşional həllini tələb edir. Onlardan əsası bütün istehsalatda maksimal çıxışlı bütöv məhsulun alınmasıdır.

Hazırda texnoloji proseslərin iqtisadi effektivliyinin artırılması və genişləndirilməsi, həmçinin ekoloji təmiz məhsullara olan müasir tələblər bu proseslərin riyazi modellərinin işlənməsinin mümkünlüyünü təyin edir.

Kimya reaktorlarının modelləşdirilməsi verilmiş şərtlər daxilində və aparatların ixtiyari ölçülərində kimya-texnoloji proseslərinin gedişatının nəticələrinin əvvəlcədən öyrənmək üçün tətbiq olunur. Ümumiyyətlə, riyazi modelləşdirmə reaktorun tədqiqinə və miqyas keçidinə imkan verir.

Son illər o, həmçinin, fasiləsiz proseslərin modelləşdirilməsi üçün və mürəkkəb sistemlərin müxtəlif idarəetmə və tənzimləmə prinsiplərinin istifadə edilməsində tətbiq edilir.

Təbiətdə gedən real proseslərin öyrənilməsində əsas rolu riyazi modelləşdirmə oynayır.

Riyazi modelləşdirmə bir-biri ilə əlaqəli üç etapi birləşdirir:

1. Tədqiq olunan obyektin riyazi təsvirinin qurulması;
2. Riyazi təsvirin tənliklər sisteminin həlli üsullarının seçilməsi və onun modelləşən proqram şəklində realizə olunması;
3. Adekvatlığın yoxlanılması.

Katalizatorun tərpənməz laylı reaktorları kimya və neft kimyası sənayesində çox geniş yayılmışdır. Kontakt reaktorunun riyazi modelləşdirilməsində, hər şeydən öncə, məhsulun lazımı miqdarının və müəyyən dərəcədə çevrilməyə nail olmaq üçün zəruri olan katalizatorun miqdarı və reaktorun ölçülərini bilmək vacibdir.

Kimyəvi-texnoloji proseslərin mürəkkəbliyini nəzərə alaraq, kimya istehsalının layihələndirilməsi və elmi cəhətdən problemin işlənməsi böyük əhəmiyyət kəsb edir. Bu problemin həlli üçün sənaye proseslərinin layuhələndirilməsində yeni metodlardan – kimya texnologiyası proseslərinin avtomatlaşdırılması, yeni texnikanın tətbiqi, kompüter texnikasından istifadə, müasir texniki aparat və avadanlıqların tətbiq edilməsi və s. sistemli tədqiqatlardan istifadə edilməlidir.

Sistemli metodu öyrənərkən bir sıra çətinliklərlə qarşılaşmalı oluruq,

- 1) Ədəbiyyat materiallarında sistemli tədqiqat – vahid təyinat mövcud deyil, çünki bəzi izahetmələrdə əks fikirlərə rast gəlinir.
- 2) Sistemli yanaşma çox mürəkkəb riyazi üsullardan ibarətdir. Riyazi asılılıqların çoxluğu, matritsanın riyazi aparatı və qraflar nəzəriyyəsi (teoriya qrafov) hazırlıqsız oxusunun sistemi girişməyə çətinlik törədir. Ona görə aşağıda ancaq məqsəd qoyulmuş məsələnin ümumi təsviri verilir.

Sistemin yaradılmasının anlayışları və prinsipləri haqqında aşağıdakıları qeyd etmək olar.

Sistemli yanaşma kimyəvi proseslərə sistem kimi baxmaqla başlayır.

Sistem – obyekt, xarici mühitlə qarşılıqlı təsirdə və mürəkkəb daxili quruluşa, çoxlu sayda hissə və elementlərdən (aparatlardan), qarşılıqlı texnoloji axınlardan ibarət vahid məqsədlə işləyən cisimlər toplusudur.

Bir sıra fiziki və kimyəvi xassələrə malik olan müəyyən həcm maddə – cisim adlanır.

Sistemi əhatə edən cisimlərə xarici mühit deyilir. Element – müstəqil və şərti bölünməz vahiddir. Kimya texnologiyasında – element dedikdə kimyəvi proses gedən aparat nəzərdə tutulur.

Təcrübə göstərir ki, sistem ilə xarici mühit arasındakı qarşılıqlı təsiri tamami ilə yox etmək mümkün olmasa da, onu nəzərə alınmaz dərəcədə azaltmaq olar.

Xarici mühitlə heç bir əlaqəsi olmayan sistem – izolə edilmiş sistem adlanır.

Elementlərin toplusu və əlaqələri sistemin strukturunu təşkil edir.

Sistemli yanaşma əsas iki şərtə əsaslanır: 1) obyekt sistem kimi qəbul etmək; 2) onu sistem kimi qəbul olunmuş aspektdə tədqiq etmək.

Bu iki etap – sistemli tədqiqatın başlanğıcıdır. Bütün kimya istehsalı əsas üç mərhələdən ibarətdir:

- Xammalın hazırlanması, kimyəvi çevirilmə və məqsədli məhsulun ayrılması. Bu üç əməliyyat vahid mürəkkəb kimyəvi-texnoloji sistem kimi həyata keçirilir.

Kimyəvi-texnoloji sistem müvafiq kimya istehsalında xarakterik göstəricilərə malikdir:

- 1) Məhsul buraxılışının ümumi məqsədin olması
- 2) Sistemə daxil olan elementlərin böyüklüyü və bunların arasında əlaqə

- 3) Sistemin prosesinin aparılmasının mürəkkəbliyi – bir aparatda tejjimin dəyişməsi bütün istehsalın işinin dəyişməsinə səbəb ola bilər.
- 4) Sistemin işini xarakterizə edən parametrlərin çox sayda olması
- 5) İstehsal prosesinin idarəetmənin avtomatlaşdırılmasının yüksək dərəcədə olması
- 6) Kimyəvi-texnoloji sistemin elementləri ilə idarəedici arasında məlumatlı informasiya axını yaratmaq.

Bu göstərilən halların mövcudluğu imkan verir ki, kimya istehsalı mürəkkəb sistem kimi mövcud olsun.

Kimya müəssisələrinin bir sistem kimi təqdim olunması onun sistemaltı bölüm kimi təsvir olunur. Sistemaltıların aralarında ierarxik struktur ilə xarakterizə olunan üç-dörd qat və ya ierarxik pilləyə həmtabelilik mövcuddur.

Bu ümumi məsələnin həllinin birinci səviyyəsi ayrı-ayrı elementlərin riyazi modelinin qurulması və onun əsasında kimyəvi-texnoloji sistemin tam riyazi modelinin yaradılmasıdır.

Riyazi model kimyəvi-texnoloji sistemin funksiyalanmasının mövcudluğunun vahid bölünməz kimi əks etdirməlidir.

İstehsalatda mühəndisin fəaliyyətində onun vəzifəsi əsas iki məsələni həll etməkdən ibarətdir:

Layihələndirmə və yeni yüksək effektiv texnoloji prosesləri tətbiq etməklə mövcud istehsalın effektivliyini artırmaq. Bu məsələ bir neçə mərhələdə həllini tapır, ya eyni vaxtda, ya da ardıcılıqla. Ancaq məsələnin həlli KTS-i çoxsəviyyəli və mürəkkəbliyinə görə mürəkkəb səviyyə kimi qəbul etmək olar.

Bu məsələnin quruluşunun birinci səviyyəsi ayrı-ayrı elementlərin riyazi modellərinin yaradılmasıdır və bunun əsasında kimyəvi-texnoloji sistemin (KTS) tam riyazi modelin qurumasıdır.

Riyazi model KTS-i funksionalanmasını vahid məqsəd kimi əks etdirməlidir. Bunun üçün madol kimya istehsalının vacib tərəfini miqdarı asılılıq kimi təsvir etməlidir.

Riyazi modelin qurulmasının riyazi məsələsi ona gətirir ki, çıxış parametrlərinin sistemin parametrlərindən asılılığı sistemin işinə təsir göstərir.

- 1) Çıxış parametrləri (xammalın miqdarı, onun tərkibi və s.) bu faktorları X_1, X_2, \dots, X_n -lə, bütün bu faktorların hamısını isə dəyişən çıxımların vektoru \bar{X} kimi qəbul edək;
- 2) Xarici təsir (ətraf mühit), ətraf mühitin parametrləri vektoru (temperatur, təzyiq və s.) \bar{V} ;
- 3) Sistemin elementlərinin texnoloji parametrləri; bu parametrlərin vektoru \bar{D} ;
- 4) Konstruktiv parametrlər: onların vektoru \bar{K} .

Kimyəvi-texnoloji sistemin əsas mərhələləri. Ayrı-ayrı elementlərin riyazi modeli tərtib olunarkən yuxarıda göstərilən faktorlar nəzərə alınmalıdır. Onda riyazi model

$$\bar{Y} = f(\bar{X}, \bar{V}, \bar{D}, \bar{K})$$

Y - çıxış parametrlərinin vektorudur. Əgər sistemdə N element (aparat) varsa, onda oxşar asılılıqlar (i -sistemdəki hər-hənsi elementin sayı 1-dən N -ə qədər)

$$\bar{Y}_i = F_i(\bar{X}, \bar{V}, \bar{D}, K_i)$$

Sistemin bütün elementlərinin riyazi modeli qurulduqdan sonra, kimyəvi-texnoloji sistemin tam riyazi modeli qurulur.

Kimyəvi-texnoloji sistemin riyazi modeli ayrı-ayrı elementlərin riyazi modelləri yığımı kimi baxmaq düzgün olmaz. Odur ki, KTS-in riyazi modeli tətbiq edilərkən yuxarıda göstərilən 4 şərtədən əlavə aşağıdakı iki şərtə nəzərə alınmalıdır:

1) Sistemdə aparatlar bir-biri ilə müxtəlif üsullarla əlaqəli (bağlı) ola bilər (yəni sistem müxtəlif texnoloji topoloji formada ola bilər. Bunun müxtəlif variantlarını G -simvolu ilə işarə edək. Texnoloji topologiya bütün KTS-in işinə təsir göstərir və o KTS-in riyazi modelini nəzərə almalıdır.

2) Elementlərin birləşməsində sistemin daxili axınında hər-hansı bir problem baş verməsi parametrlərin təyini ilə xarakterizə olunur. Onların qiymətləndirilməsindən istehsalın işi asılıdır, məhz ona görə onlar KTS-in riyazi modeli daxil edilirilər (\bar{L} - vektor parametrov vnutrennix potokov). Onda KTS-in modeli aşağıdakı kimi olur:

$$\bar{Y}_i = F_i (\bar{X}_i, \bar{V}_i, \bar{D}_i, K_i, \bar{L}_i, G)$$

$i=1\bar{N}$

Sistemin \bar{Y} dəyişənlərinin çıxımlarını hesablamaqdan əlavə, sistemin funksionalaşdırılmasının effektivliyinin qiymətləndirilməsini E daim təyin etmək lazımdır

$$E = \psi(\bar{V}_i, \bar{V}, \bar{K}, \bar{L}, G).$$

Alınmış riyazi modeldən davamlı istifadə etmək üçün elektron hesablama maşınında hesablamaq üçün alqoritm yaratmaqla bərabər tədqiq olunan obyektlə təcrübi nəticələrin uyğunluğunu yoxlamaq lazımdır, yəni onlar uyğunluq təşkil etməlidirlər.

Kimyəvi-texnoloji sistemin sintezi KTS-ni yüksək effektivli işləməsinə əsaslanır. Bunun üçün optimal texnoloji topologiya G seçilməlidir (elementlərin sayı, tipi və onlar arasında əlaqələrin xarakteri). Sonra isə KTS-in \bar{X} , dəyişənlərinin qiymətləri. Sistemin elementlərinin texnoloji parametrləri və texnoloji axının daxili parametrləri hesablanmalıdır (L).

Beləliklə, KTS-in sintezi aşağıdakı parametrlərin təyini ilə yekunlaşır:

$$G = D(\bar{Y}, \bar{V}, \bar{K}, E_n^*)$$

$$\bar{X} = f_1(\bar{Y}, \bar{V}, \bar{K}, E_n^*)$$

$$\bar{D} = f_2(\bar{Y}, \bar{V}, \bar{K}, E_n^*)$$

$$\bar{L} = f_3(\bar{Y}, \bar{V}, \bar{K}, E_n^*)$$

Sistemin E - funksiyalaşmanın effektivliyi

$$E^* = \text{opt}\varphi(\bar{Y}, \bar{V}, \bar{D}, \bar{K}, \bar{L}, G)$$

E^* – E-nin effektivliyinin optimal kriterisinin quymətidir.

Yuxarıda deyilənlərdən aydındır ki, kimyəvi-texnoloji sintez – kimyəvi texnoloji sistemin optimallaşdırılması məsələsi ilə sıx bağlıdır.

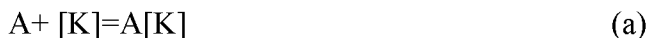
10. HETEROGEN KATALİTİK PROSESLƏR

Kimyəvi reaksiyaların sürətinin dəyişməsi və ya maddələrin – katalizatorun təsiri nəticəsində onların həyəcanlanması kataliz adlanır. Katalizator reagentlərlə aralıq birləşmələrdə iştirak etməklə reaksiyada iştirak edir, lakin katalitik aktın sonunda öz tərkibini bərpa edir.

Əgər katalizator kimyəvi reaksiyanı sürətləndirirsə, kataliz müsbət adlanır, əgər əksinə katalizator kimyəvi reaksiyanı yavaşadırsa, kataliz mənfi adlanır. Sənayedə əsasən müsbət kataliz tətbiq olunur [3-9].

Katalizatorun iştirakı ilə reaksiya katalitik olmayan reaksiyalara nisbətən daha az aktivlik enerjisi tələb edən bir sıra elementar mərhələlərdən keçir. Belə ki,

$A+B \rightarrow AB$ şəklidə olan bimolekulyar reaksiya $[K]$ katalizatorunun iştirakı olduqda aşağıdakı elementar mərhələlər ola bilər:



Katalizatorun iştirakı olduqda aktivləşmə enerjisi azalır və aktivləşmə enerjisi azaldığı üçün Arrhenius tənliyinə uyğun olaraq reaksiyanın sürəti böyüyür. Eyni zamanda aktivləşmə enerjisinin azalması ilə bir sıra hallarda reaksiyanın tərtibi də azalır. Belə ki, katalitik reaksiyanın elementar mərhələlərinin tərtibi katalitik olmayan reaksiyanın tərtibindən kiçik ola bilər.

Katalitik proseslərin və reaksiyaların təsnifatı bir sıra əlamətlərə görə aparılır. Reagentlərin və katalizatorların faza halına görə katalitik prosesləri iki əsas qrupa – homogen və heterogen katalizə bölürlər. Homogen kataliz zamanı katalizator

və reagentlər bir fazada – qaz və ya məhlulda, heterogen katalizdə isə müxtəlif fazalarda olurlar.

Reaksiyaya daxil olan maddələr ilə katalizatorun qarşılıqlı təsirinin tipi üzrə bütün katalitik reaksiyalar iki sinfə - osidləşmə-reduksiya (homolitik) və turşu-əsas (heterolitik) qarşılıqlı təsirlərə bölünür. Bundan başqa selektiv katalizi də fərqləndirirlər.

Sənayedə bərk katalizator üzərində heterogen kataliz daha geniş yayılmışdır. Heterogen-katalitik proseslərin mexanizmi kütlə mübadiləsi və kimyəvi reaksiya mərhələlərindən yaranır. Ümumi halda bərk katalizatorun üzərində kataliz zamanı aşağıdakı elementar mərhələlər mövcud olur:

1. Katalizator dənəsinin səthinə reaksiyaya daxil olan maddələrin diffuziyası.

2. Katalizator dənəsinin məsamələrinə daxili səmərəli diffuziya.

3. Reaksiyaya girən bir neçə və ya bir komponentin katalizatorun səthində xemosorbsiyası sayəsində səthi kimyəvi birləşmənin yaranması.

4. Kataliz məhsullarının atomların qruplaşması nəticəsində səth kompleksin əmələ gəlməsi.

5. Katalizatorun aktiv mərkəzinin regenerasiyası, yəni kataliz məhsulunun desorbsiyası.

6. Alınan məhsulun katalizator dənələrini məsamələrində diffuziyası.

7. Alınan məhsulun katalizator dənələrinin səthindən diffuziyası.

Aktivləşmə enerjisi katalitik prosesin hər bir mərhələsində, homogen reaksiyanın aktivləşmə enerjisinin səviyyəsindən az olur. Digər vəziyyətdə katalitik üsulla reaksiya energetik cəhətdən səmərəli ola bilməz.

Ayrı-ayrı mərhələlərin sürətinin məcmuusu heterogen katalitik proseslərin yekun sürətidir. Ən yavaş mərhələnin sürəti ilə isə məhdudlaşdırıcı mərhələ təyin olunur. Katalizatorun

səthində kimyəvi çevrilmə (3,4,5-ci mərhələ) bir çox hallarda prosesin ümumi sürətini, bəzən isə maddənin diffuziya çevrilməsi ilə müəyyən edilir. Prosesin məhdudlaşdırıcı mərhələsi onu nəzərdə tutur ki, başqa mərhələlər böyük sürətlə gedir, təcrübi olaraq proses tarazlıq vəziyyətinə çatır və Hibbs enerjisinin tam dəyişməsi minimuma, yəni sifıra yaxınlaşır. Texnoloji rejimin parametrləri ilə ayrı-ayrı mərhələlərin sürətləri müəyyən olunur. Prosesi kinetik, daxili və xarici diffuziya sahələrinə prosesin tam mexanizminin izahı məqsədi ilə bölürlər.

Turşu - əsas əlaqəsi ilə proses heterolitik kataliz zamanı gedir. Katalizatorun sonuncu olaraq H^+ protonu və ya digər ionun (məs. OH^- , $H_2PO_2^-$, və s.) donoru (akseptoru) kimi, daha sonra da onun akseptoru (donoru) kimi çıxış etməklə reaksiyanın sürətini yüksəldir. Bu cür katalitik prosesə ion (məhlulda) və ya proton katalizi də deyilir.

Əsasən aktivliyi azalan katalizatorlarda nisbətən aşağı temperaturda, böyük məsaməyə malik bərk maddələrdə, turbulent axınlı vəziyyətləri kinetik sahə əhatə edir. Böyük sürətli reaksiyalar xarici diffuziya sahəsi yüksək aktivliyə malik olan katalizatorlar olduqda baş verir.

Qeyri adi xəssəyə heterogen katalizatorların malik olmaları səthin çox böyük olması səbəbindən meydana gəlir. Katalizatorlar müxtəlif məsaməli olurlar, məsələn kütləsi 1 qram katalizatorlarda ümumi sahəsi $500-600\text{ m}^2$ yaxın olur. Böyük sahəyə malik olan oksidlər bir çox hallarda daşıyıcı kimi də tətbiq edirlər. Hissəcikləri böyük olmayan klaster formada metallik katalizatorlar çökürlər. Qaz və ya maye fazada belə vəziyyət reagentin katalitik metal ilə səmərəli əlaqədə olmasını təmin edir. Ümumi səthin ancaq çox kiçik hissəsi bir sıra heterogen katalizatorların böyük səthə malik olmalarına baxmayaraq, aktiv mərkəzlərdən ibarət olur. Aktiv mərkəzlər bir qayda olaraq bütövlükdə, qeyd etmək lazımdır ki, ümumi səthin

2-3%-ni tuturlar. Ən aktual problemlərdən biri aktiv mərkəzlərin quruluşunun intensiv tədqiqidir.

Metallik, oksid və seolitlər sənaye katalizatorlarının əsasını təşkil edirlər. SO_2 -nin SO_3 -ə oksidləşmə prosesində ilk sənaye prosesi kimi heterogen katalizator olaraq platin istifadə edilmişdir. Belə yolla alınmış SO_3 daha sonra həmin turşunun sulu məhlulunda həll olaraq sulfat turşusunu əmələ gətirir. Kamera üsulu ilə belə proses 1875-ci ildə sulfat turşusunun alınması üçün sənayedə tətbiq edilmişdir.

Homogen katalizator kimi həmin prosesdə azot oksidi də tətbiq edilmişdir. Kükürd şəraitində platin katalizatorun mənfi cəhəti çox tez zəhərlənməyə malik olmasıdır. Daha sonralar zəhərlənməyə qarşı çox davamlı olan daşıyıcı silikat üzərində hopdurulmuş vanadium oksidi və kalium sulfat qarışığı katalizatorundan çox geniş istifadə edilmişdir [23]

Müasir dövrdə də sənayedə kükürd oksidinin oksidləşməsi prosesində həmin katalizator tətbiq olunur. Ostvald azot oksidinin alınması üçün 1903-cü ildə platin şəbəkəsinin üzərində ammoniyakın oksidləşməsi və sonradan ondan nitrat turşusunun alınmasında istifadə etmişdir. Azot və hidrogendən ammoniyakın alınması 1908-1917-ci illərdə sənayeyə tətbiq edilmişdir. 76 müxtəlif istehsal sahələrində sənaye miqyasında 1923-cü ildə karbon oksidi ilə hidrogendən metanolun istehsalı başlanılır, Fişer Tropş tərəfindən 30-cu illərdə isə sintez-qaz metodu təklif olunur. Həmin prosesin iki mərhələsi vardır.

İlk öncə kömür qazlaşdırılır, daha doğrusu hidrogen və CO su buxarı ilə oksigenin reaksiyasından alınır. Dəmir və kobalt tərkibli katalizator üzərində alınan qarışıq maye yanacağa çevrilir. Almaniyada metanolun formaldehidə katalitik çevrilməsi 1890-cı illərdə, 1920-1928-ci ildə isə benzolun malein anhidridinə çevrilməsi prosesi tətbiq olunur. 1937-ci ildə etilenin etilen oksidinə çevrilməsi «Yunion karbayd» firması tərəfindən tətbiq olunur. Katalitik krekinq neftdən yanacağın

alınmasının sənayedə tətbiqini tapmış ilk katalitik proses olmuş və 1937-ci ildə proses sənayedə tətbiq olunmuşdur.

Sulfat turşusu ilə işlənmiş gil krekinq prosesi üçün ilk katalizator olub və sonradan isə alümosilikat katalizatoru ilə əvəz edilmişdir. Alümomolibden katalizatoru üzərində parafinlərin dehidrotsiklləşməsi ilə ikinci dünya müharibəsi ərəfəsində benzinin oktan ədədini artırmağa nail olmuşlar. Oktan ədədini artırmaq üçün XX əsrin 50-ci illərində riforminq prosesi təklif olunur və platindən katalizator kimi istifadə edilir. Kömürdən sintetik benzinin alınması istiqamətində 1973-1974-cü illərdə neftə məhdudiyət qoyulmasından irəli gələrək elmi işlərin aparılması başlandı.

Alınan sintetik benzin bütün səylərə baxmayaraq neftdən alınan benzindən çox baha başa gəldiyindən elmi tədqiqatların aparılması dayandırıldı ehtiyac olmadı. Təcrübi əhəmiyyətli proseslərdən birisi hidrogenləşmə prosesidir. Belə proses nikel katalizatoru üzərində katalitik proseslərlə bitki yağlarının marqarinə, piylərə və başqa qida məhsullarına çevrilməsini qeyd etmək olar.

Başqa təcrübi əhəmiyyətli katalitik proseslərdən biri dehidrogenləşməni göstərmək olar, həmin prosesdə kimya və neft kimya üçün əhəmiyyətli monomerlərin alınmasını xüsusi olaraq qeyd etmək olar. Stirolun etilbenzoldan dəmir oksidi tərkibli katalizator üzərində alınması sənaye miqyasında böyük əhəmiyyət kəsb edir. Eyni zamanda alkanlardan olefinlərin alınmasını, əsasən butandan butadienin alümoxtrom katalizatoru üzərində alınmasını da xüsusi ilə qeyd etmək lazımdır. Daha sonralar yeni-yeni katalitik proseslər işlənildi və onların bir çoxu sənayedə öz tətbiqini tapa bildilər. Bu məlumatlar cədvəl 10.1 də öz əksini tapmışdır.

Sənaye əhəmiyyətli heterogen proseslərin katalizatorları və reaktorların növlərinin bəzi göstəriciləri cədvəl 10.1-də göstərilmişdir.

Reaksiya	Katalizatorlar və reaktorların növü
Dehidrogenləşmə	
1	2
CH ₃ →CH ₂ +CH ₂ ; butan→butenlər+butadien butenlər→C ₄ H ₆ (butadien)	Cr ₂ O ₃ -Al ₂ O ₃ (statik layda dövrü proseslər) Fe ₂ O ₃ kalium karbonat və xrom oksidi ilə gücləndirilmiş və ya Ca ₈ Ni (PO ₄) ₆ - (buxari tətbiqi ilə statik layda)
C ₆ H ₅ C ₂ H ₅ →C ₆ H ₅ CH=CH ₂	Fe ₂ O ₃ katalizatoru Cr ₂ O ₃ və K ₂ CO ₃ ilə promotorlaşmış (tərpənməz lay)
CH ₄ və ya digər k/h +H ₂ O→CO+H ₂ (su bu xarı ilə konversiya)	Ni daşıyıcı üzərində (tərpən-məz lay)
(CH ₃) ₂ CHOH-CH ₃ COCH ₃ + +H ₂ CH ₃ CHOH C ₂ H ₅ -CH ₃ CO-C ₂ H ₅ +H ₂	ZnO
Hidrogenləşmə	
yağlar və qida piyləri	Ni-Reney və Ni-daşıyıcı üzərində (axın və ya statik maye fazalı reaktorlarda)

1	2
Muxtəlif üzvi reaktivlərin hidrogenləşməsi	Pd kömür üzərində (axın və ya statik maye fazalı reaktorlarda)
$C_6H_6+3H_2-C_6H_{12}$	Daşıyıcı üzərində Ni və ya qiymətli metallar
$C_2H_2 - C_2H_6$	Pd Al_2O_3 üzərində və ya nikel sulfid daşıyıcı (tərpənməz lay, adiabatik rejim)
Oksidləşmə	
$SO_2 + \frac{2}{5} O_2 \longrightarrow SO_3$ $2NH_3 + O_2 \longrightarrow 2NO + 3H_2O$	$V_2O_5 + K_2SO_4 - SiO_2$ üzərində (tərpənməz lay, adiabatik rejim) 90% Pt +10% Rh (məftil şəbəkə) oksidləşdirici mühit
$NH_3 + CH_4 + \text{hava} \longrightarrow HCN$	90% Pt +10% Rh (məftil şəbəkə) reduksiyaedici mühit
$C_{10}H_8$ və ya 1,2 $C_6H_4(CH_3)_2 + O_2 \longrightarrow C_6H_4(CO)_2O$ (naftalin yə ya o-ksilol+hava ftal anhidridi)	Daşıyıcı üzərində otuzdurulmuş V_2O_5 (tərpənməz laylı borulu reaktor)

Cədvəl 10.1. davamı

1	2
$n\text{-C}_4\text{H}_8$ yə ya $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_2\text{O}_3$	Daşıyıcı üzərində qurudulmuş V_2O_5 (borulu reaktor)
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O}_2 \rightarrow (\text{CH}_2)_2\text{O}_2$	Cökdürülmüş Ag
$\text{CH}_3\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2$ yə ya H_2O	Ag yə ya $\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{MoO}_2$
$\text{C}_3\text{H}_6 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_2=\text{CH}-\text{CHO}$ yə ya $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{COOH}$	Cu_2O və ya polimetal oksidləş-dirici qarışığı
$\text{CO} + 3\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$	Hopdurulmuş nikel (tərpənməz lay)
$\text{CO} + 2\text{H}$ -parafinlər (Fişer-Trop sintezi)	Dəmir promotorla (qaynar lay)
Turşu kataliz	
Katalitik krekinq	$\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ -üzərində seolit (qaynar lay)
Hidrokrekinq	(Pd və s.) seolit üzərində metallar (tərpənməz lay, adiabatik rejim)
İzomerləşmə	Al_2O_3 üzərində metallar, turşu ilə islanmış seolitər (tarpanmaz lay)

Cədvəl 10.1. davamı

1	2
Katalitik- riforminq	Pt, Pt-Re və ya Pt-ir Al_2O_3 üzərində (tərpənməz lay, adiabatik reaktor)
Hidratlaşma. Məsələn, propilen izopropil spirtinə	H_3PO_4 gil üzərində və müxtəlif daşıyıcılar. Üzərində qeyri üzvi turşular (tərpənməz lay)
Başqa reaksiyalar	
Oksixlorlaşma ($\text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{HCl} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O}$)	$\text{CuCl}/\text{Al}_2\text{O}_3$ promotor KCl
Hidroqurğusuzlaşma	$\text{Co-Mo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ və ya $\text{NiMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ (tərpənməz lay, adiabatik rejim)
$\text{SO}_2 + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{S} + 2\text{H}_2\text{O}$ (Klaus prosesi)	Al_2O_3 (tərpənməz lay)
$\text{H}_2\text{O} + \text{CO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ (su qazının konversiyası)	$\text{Cu-ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ və ya SiO_2 üzərində katalizatoru

11. KATALİTİK REAKTORLARIN HESABININ XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Katalitik proseslərin və reaktorların hesabı kinetikanın ümumi tənliklərinə əsaslanır. Əvvəldə baxdığımız bütün kinetik tənliklər katalitik proseslərin xüsusiyyətlərini nəzərə almaqla katalitik reaktorların hesabında tətbiq olunur.

Katalizatoru xüsusi səthi $S_{xüs}$ (m^2/m^3) məlum olduğu halda axınlı çıxarma reaktorları üçün:

$$u = dG/d\tau = k_{0kat} S_{xüs} \Delta C \quad (11.1)$$

yazmaq olar.

burada, k - prosesin ümumi sürət sabiti; ΔC – hərəkətverici qüvvədir.

Qaz halında olan reagentlərin bərk katalizator üzərində texnoloji rejimin əsas parametrlərinin təsirini nəzərə almaqla katalitik qarşılıqlı təsiri üçün ümumi kinetik tənliyi belə yazmaq olar:

$$u = k_0 e^{-E/RT} v_{kat} \Delta p P^n \beta \quad (11.2)$$

burada, Δp -reagentlərin parsial təzyiqləri ilə ifadə olunan prosesin hərəkətverici qüvvəsi; P - normal atmosfer təzyiqinə nisbətdə, yəni ölçü vahidi olmayan işçi təzyiq; β - normal təzyiq və temperatura keçmək üçün əmsal; n - reaksiyanın ümumi tərtibidir.

Bərk məsaməli katalizatorlar üzərində heterogen kataliz zamanı prosesin ümumi sürətinin məhdudlaşdırıcı (limitləşdirici) mərhələsindən asılı olaraq kinetik tənlik müxtəlif şəkillərdə olur.

Kinetik hesablamalar, maddi və istilik balanslarının məcmuusu katalitik reaktorun əsas ölçüsünü müəyyən etməyə imkan verir. Eyni zamanda hesablamaların əsas məqsədinə

reaktorun hidrodinamik parametrlərinin və istilik mübadilə elementlərinin səthinin sahəsini müəyyən etmək də daxildir.

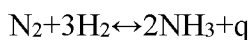
Kimyəvi kinetikanın əsas tənlikləri, həmçinin istilik və kütlə mübadiləsinin qanunauyğunluqları stasionar, psevdoqaynar lay və hərəkətdə olan katalizator layı ilə işləyən reaktorlar üçün əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənmişdir. Psevdoqaynar layı xarakterizə edən kinetik tənliklərdə stasionar laylı reaktorlara nisbətən yalnız mütləq kəmiyyətlər dəyişəcəkdir. Məsələn qeyd edilənlərlə əlaqədar olaraq burada k kəmiyyəti 3-10 dəfəyə qədər yüksələ bilər.

Psevdoqaynar laylı reaktorun əsas hidrodinamik xarakteristikası psevdoqaynar layın mövcud olma sərhədini müəyyən edən kəmiyyətdir. Bu kəmiyyət həmin sərhədi müəyyən edən qaynadıcı agentin böhran sürətidir. Bu barədə əvvəlki kursda məlumat vermişik.

Aşağıdakı misala baxaq:

Aşağıda verilən şərait üçün ammoniyakı sintez etmək üçün tətbiq olunan katalizatorun 1m^3 –nün məhsuldarlığını müəyyən etməli: reaktorun çıxışındakı qazda ammoniyakın qatılığı $C_{\text{çix}}=26,5\%$ (həcm), reaktorun girişində $C_{\text{g}}=2,7\%$ (həcm). Qazın həcmi sürəti $V_h=45000\text{m}^3/(\text{saat}\cdot\text{m}^3)$ katalizatora görə.

Ammoniyakın sintezi həcmi azalması ilə gedən ekzotermik dönmə reaksiyaya əsaslanır:



Ammoniyakın sintezi reaksiyası böyük aktivləşmə enerjisi tələb edir. Sənayedə həmin prosesi katalizator iştirakı ilə yüksək təzyiqlik və temperatur şəraitində həyata keçirirlər. Optimal şəraitdə həyata keçirilən proses zamanı da ammoniyakın çıxımı böyük olmur. Odur ki, prosesin çıxışında qalan reaksiyaya girməyən azot hidrogen qarışığı yenidən prosesə qaytarılır və təzə qaz qarışığı əlavə olunur. Bizim baxdığımız misalda ammoniyakın çıxımı :

$$x=(C_{\text{çix}}-C_g)/(100+C_g)=(26,5-2,7)/102,7=23,2\% \text{ (həcm)}$$

və yaxud 0,232 mol. payı NH_3 olur.

Ammonyakın sintezi kalonunda verilən təzyiq və azot-hidrogen qarışığının tərkibi şəraitində katalizatorun məhsuldarlığı aşağıdakı düsturla müəyyən edilir:

$$M_k=0,771 \times V_h \beta$$

burada, 0,771- $1\text{m}^3 \text{NH}_3$ -ün kütləsi; β -ammonyakın sintezi reaksiyası nəticəsində həcmi azalmasını xarakterizə edən əmsəldir və aşağıdakı kimi müəyyən olunur:

$$\beta=(100+C_g)/(100+C_{\text{çix}})=100+2,7)/(100+26,5)=0,81$$

$$M_k=0,771 \cdot 0,232 \cdot 45000 \cdot 0,81=6500\text{kq}/(\text{saat} \cdot \text{m}^3 \text{katalizator})$$

Neft emalının destruktiv proseslərinin arasında aparıcı proseslərdən biri də xırda dispers katalizator üzərində ağır distillat fraksiyalarının katalitik krekinqidir. Prosesin məqsədi yüksək oktanlı benzinin alınmasıdır.

Katalitik krekinqin yüngül qazoylu dizel yanacağına komponenti kimi istifadə olunur. Yüksək politsiklik aromatik birləşmələrlə zəngin olan ağır qazoyl dispers texniki kömürün alınmasında, iynəvari koksun və mazut komponentinin alınmasında istifadə edilir. Krekinqin əsas xammalı $300-500^\circ\text{C}$ hədlərində qaynayan geniş vakuüm qazoyl fraksiyasıdır. Son zamanlar xammal kimi qaynama temperaturu $550-590^\circ\text{C}$ olan ağırlaşmış vakuüm qazoylları da istifadə olunur. Xammal resurslarını genişləndirmək üçün ikinci mənşəli xammallardan və koklaşma qazoylundan da geniş istifadə edilir [1,2].

Katalitik krekinq xammalı aşağı koksluluğa (ən çoxu 0,5% (kütlə) malik olmalıdır. O az miqdarda politsiklik aromatik karbohidrogenlərdən və katalizatorun üzərində sürətlə koks əmələgətirən qatranlı birləşmələrdən ibarətdir.

Bundan başqa, xammalın tərkibində metal birləşmələri çox az miqdarda (1 tona 20-25qr-dan az düşmək şərti ilə) olmalıdır. Çünki onlar katalizatorun aktivliyini zəiflədir. Hal-hazırda xammalı əvvəlcədən metal birləşmələrdən təmizləmək üçün yeni üsullar axtarılır.

Krekinq xammalının koksluğu 0,006-0,007% (kütlə) həddindədir [3,4]. Kükürlü xammaldan istifadə etdikdə xammal mütləq hidrotəmizləmədən keçməlidir. Son layihələrdə katalitik krekinq qurğusuna hidrotəmizləmə blokunun əlavə olunması nəzərdə tutulur. Burada kükürlü birləşmələr hidrogen sulfid şəklində ayrılır, bununla yanaşı xammal azot və oksigenli birləşmələrdən təmizlənərək zənginləşdirilir. Xammalda kükürdün miqdarı hidrotəmizləmədən sonra 0,1-0,3% (kütlə) təşkil edir.

Krekinq qurğusunda yüksək aktivliyə malik seolit tərkibli katalizator istifadə olunur. Burada, kristal alümosilikatlar 10-25% (kütlə) amorf kütlədən ibarətdir. Bu nəzərə çarpacaq dərəcədə benzinin çıxımını artırır və oktan ədədini 82-84 (motor üsulu ilə) və ya 92-94-ə qədər (tədqiqat üsulu ilə) yüksəldir və kontakt müddətini azaldır. Katalizator qranulmetik tərkibdə, yüksək məsaməliyə və mexaniki möhkəmliyə malik olmalıdır.

12. KÜTLƏ MÜBADİLƏSİ PROSESLƏRİNİN HESABININ ƏSASLARI

Sənaye miqyasında həyata keçirilən kimya texnologiya proseslərinin əksəriyyəti heterogen proseslərdir. Heterogen proseslərin həddindən artıq çox müxtəlif olması onların təsnif edilməsini çətinləşdirir. Ona görə də qəbul edilib ki, prosesdə iştirak edən reagentlərin faza halına uyğun olaraq təsnifat aparılsın. Məsələn, Q-M; M-B; Q-B və s.

Heterogen proseslərin mexanizmi homogen proseslərə nisbətən mürəkkəbdir. Belə ki, müxtəlif faza halında olan reagentlərin qarşılıqlı təsirdə olmaları üçün onların fazaları ayırıcı sərhədə çatmaları lazımdır. Təmasda olan fazada komponentlərin tarazlıq qatılıqları maddələrin paylanma qanunu ilə müəyyən olunur. Bu qanunla müəyyən temperaturda sistemin iki fazasında maddələrin tarazlıq qatılıqları arasında sabit nisbət qərarlaşır. Nisbətin sabitliyi komponentin başlanğıc qatılığının və ya sistemin ümumi təzyiqinin dəyişməsi zamanı dəyişmir. Müxtəlif faza sistemləri üçün paylanma qanununun bir sıra düsturları mövcuddur. Məsələn Q-M sistemi üçün Henri və Raul qanunları məlumdur.

Absorbsiya və desorbsiya prosesləri üçün qaz və onların mayedəki məhlulu arasındakı tarazlıq Henri qanunu ilə ifadə olunur;

$$p^* = \Psi C_m^* \quad (12.1)$$

burada, p^* - qaz fazada udulan komponentin tarazlıq parsial təzyiqi, Pa;

C_m^* – komponentin maye fazada tarazlıq həll olması, mol payı ilə;

Ψ – ölçü vahidi təzyiq vahidi olan Henri sabitidir.

Absorbsiya (və ya desorbsiya) tarazlığının hesablanması zamanı çox vaxt mayenin və qazın tərkibini nisbi molyar qatılıqlarla ifadə edərək aşağıdakı asılılıqdan istifadə edirlər:

$$C_q^l = \Psi C_m^l \quad (12.2)$$

burada, C_q^l - tarazlıq halında qazın qatılığı, kmol/kmol inert qaz.

$$C_q^l = \frac{C_q^*}{1-C_q^*} \quad (12.3)$$

C_m^l -tarazlıq halında mayenin qatılığı, kmol/kmol həllediciyə

$$C_m^l = \frac{C_m^*}{1-C_m^*} \quad (12.4)$$

C_q^* və C_m^* - udulan qaz komponentinin uyğun olaraq maye və qaz fazada mol payıdır.

Paylanma əmsalı isə aşağıdakı kimi təyin edilir:

$$\Psi = \frac{C_q^l}{C_m^l} \quad (12.5)$$

Burada paylanma əmsalı Ψ ölçsüz kəmiyyət kimi hesablamalarda oxşarlıq kriteriyası kimi istifadə olunur.

Adsorbsiya tarazlığı (Q-B sistemi) adsorbsiyanın izoterma tənliyi ilə xarakterizə olunur:

$$G_a = f(p) \quad (12.6)$$

Adsorbsiyanın ən sadə izoterm tənliyi Lənqmürün izoterm tənliyidir:

$$G_a = (ABp)/(1+Ap) \quad (12.7)$$

burada, A, B udan və udulan maddələrin xassələrindən asılı olan sabitlər; G_a - adsorbentın vahid kütləsi (həcmi) ilə udulan maddənin miqdarı; p- adsorbsiya olunan qazın parsial təzyiqidir.

Adsorbsiyanın və ya absorbsiyanın çevrilmə (çıxarma) dərəcəsi aşağıdakı kimi müəyyən edilir;

$$x = (G_{bq} - G_{sq})/G_{bq} \quad (12.8)$$

burada, G_{bq} və G_{sq} – uyğun olaraq udulan qazın başlanğıc (aparata daxil olanda) və son (aparata çıxışında) miqdarıdır.

Bu düsturu çox zaman aşağıdakı şəkildə sadələşdirirlər;

$$x = (C_{bq} - C_{sq})/C_{bq} \quad (12.9)$$

burada, C_{bq} və C_{sq} – uyğun olaraq udulan qazın başlanğıc (aparata daxil olanda) və son (aparata çıxışında) qatılıqlarıdır (həcmi və ya kütlə).

Maye və qaz şəkilli reagentlərin iştirakı ilə gedən proseslərin kinetikasına absorbsiya (desorbsiya) nümunəsində baxmaq olar. Belə proseslərin ümumi sürəti və reaktorların ölçüləri fiziki diffuziya mərhələləri əsasında müəyyən edilir. Diffuziya sahəsində kinetik tənlik ümumi şəkildə aşağıdakı kimi ifadə olunur;

absorbsiya üçün:

$$u = k_q F (p - p^*) \quad (12.10)$$

desorbsiya üçün:

$$u = k_m F (C^* - C) \quad (12.11)$$

burada, p- udulan komponentin parsial təzyiqi, Pa; p*- maye ilə tarazlıqda olan komponentin parsial təzyiqi, Pa; C- mayədə həll olan qazın qatılığı, mol payı ilə; C*- qazla tarazlıq halında mayədə həll olan qazın qatılığı, mol payı ilə; k_q və k_m- uyğun olaraq parsial təzyiq və ya maye fazanın qatılığı vahidlərində ifadə olunmuş kütlə vermə əmsallarıdır.

Absorbsiya- desorbsiya proseslərinin modelləşdirilməsi zamanı bir qayda olaraq hesablama tənlikləri kriterial şəkildə olur. Eyni zamanda müəyyən edilən kəmiyyət kimi adətən kütlə ötürmə əmsalları qəbul edilir [19-24].

İndi isə aşağıdakı misallara diqqət yetirək.

1. 30% benzol, 45% toluol və 25% o-ksiloldan ibarət olan maye qarışığı 100⁰C-ə qədər qızdırılmışdır. Bu temperaturda təmiz benzol buxarlarının təzyiqi 71,8·10⁵ Pa (1340 mm civə süt.), toluolun buxarlarının təzyiqi 0,75·10⁵ Pa (560 mm civə süt.) və o-ksilolun buxarlarının təzyiqi 0,29·10⁵ Pa (210 mm civə süt.) təşkil edir. Maye üzərində tarazlıqda olan buxarın tərkibini müəyyən etməli.

2. Hesablamamı 100 kq məhlul üçün aparaq. Əvvəlcə mol tərkibini müəyyən edək:

Benzol.....30/78=0,384 kmol

Toluol.....45/92=0,49 kmol

o-Ksilol.....25/106=0,236kmol

Cəmi.....1,11 kmol

Uyğun olaraq hər bir komponentin məhlulda mol payı:

Benzol.....0,384/1,11=0,346 və ya
34,6%(mol)

Toluol..... 0,49/1,11=0,441 və ya
44,1%(mol)
o-Ksilol.....0,236/1,11=0,213 və ya 21,3%
(mol)

Cəmi1,000 və ya 100% (mol)

Raul qanunu əsasında buxar fazada hər bir komponentin
parsial təzyiqi:

$$p_{\text{benzol}}=0,346 \cdot 1340 \cdot 133,3=0,618 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$p_{\text{toluol}}=0,441 \cdot 560 \cdot 133,3=0,33 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$p_{\text{o-ksilol}}=0,213 \cdot 210 \cdot 133,3=0,059 \cdot 10^5 \text{ Pa}$$

$$p=1,007 \cdot 10^5 \text{ Pa (100}^0\text{C-də)}$$

Beləliklə, buxar fazanın tərkibi aşağıdakı kimi olur:

$$\text{Benzol}.....0,618 \cdot 10^5 \cdot 100/1,007 \cdot 10^5= 61,3\%$$

$$\text{Toluol}.....0,33 \cdot 10^5 \cdot 100/1,007 \cdot 10^5 = 32,8\%$$

$$\text{o-Ksilol}.....0,059 \cdot 10^5 \cdot 100/1,007 \cdot 10^5= 5,9\%$$

Cəmi 100%

13. KÜTLƏ MÜBADİLƏSİ AVADANLIQLARI VƏ ONLARIN KONSTRUKSİYASI

Məlumdur ki, maddə mübadiləsi aparatlarının texnoloji vəzifəsi müxtəlif olsa da, maddənin bir fazadan digər fazaya keçməsi ilə qarışıqın ayrılmasında prosesin mahiyyəti dəyişməz qalır.

Burada avadanlıqların müxtəlif tiplərinin, növlərinin və konstruksiyalarının olması, həmçinin eyni avadanlıqların müxtəlif texnoloji qurğularda müxtəlif üsullarla istifadə olunması onların təsnif edilməsini çətinləşdirir.

Ona görə də şərti olaraq hər bir avadanlıq və aparat konkret prosesin adını daşıyır. Lakin başqa təsnif olunma üsulları da mövcuddur.

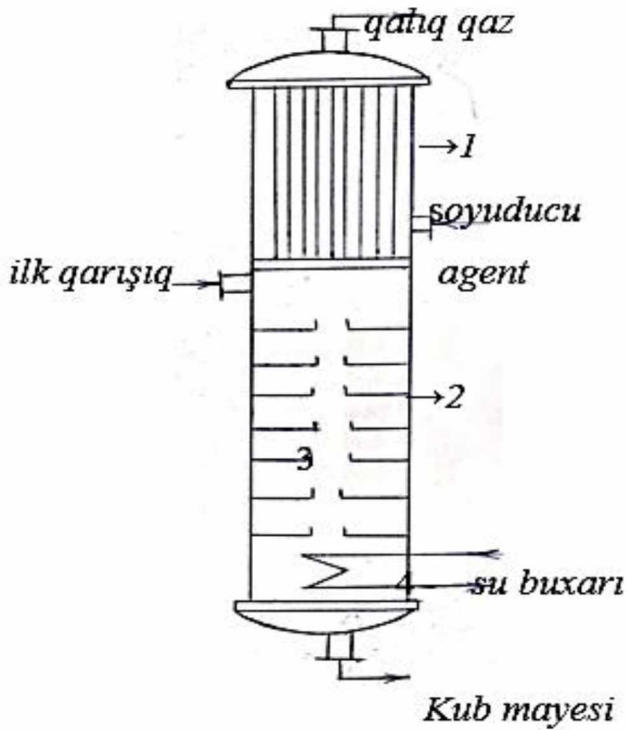
Avadanlıqlar konstruksiyasına görə tutum tipli, əsas fraksiyalayıcı aparat tipli, müxtəlif təyinatlı şaquli kalon tipli, həmçinin qarışdırıcı və ayırıcı avadanlıqlar şəklində ola bilər.

Təyinatı üzrə bu aparatlardan bir neçəsini nəzərdən keçirək:

a) Kondensasiya- buxarlandırıcı kalonlar. Mürəkkəb qarışıqların emalı zamanı adi kondensatorların tətbiq olunması kondensatın tərkibinə kondensasiyaya məruz qalmayan maddələrin əhəmiyyətli hissələrinin keçməsinə gətirib çıxarır. Belə hadisə kondensasiya olunmayan maddənin kondensatda həll olduğu hallarda müşayiət olunur.

Göstərilən qarışıqların dəqiq ayrılmasını kondensasiya-buxarlandırıcı kalon adlanan xüsusi aparatların köməyi ilə əldə etmək olar (şək.13.1).

Bu aparat iki hissədən: yuxarı *1- kondensasiya edici, 2- buxarlandırıcı* hissələrdən ibarətdir. Kondensasiya edici hissə borular arası fəzaya soyuducu agent verilən borulu istilikdəyişdiricidir.



Şək.13.1. Kondensasiya-buxarlandırıcı kalon.
 1.Kondensasiyaedici hissə, 2.Buxarlandırıcı hissə,
 3.Boşqablar,4.Qızdırıcı element.

Bəzi hallarda o, doldurma boru və boşqab tipli hazırlanır. Belə halda yuxarı hissədən boru dəstəsi və ya ilanvari boruların köməyi ilə soyuducu agentlə soyudulur. Kondensasiyaya məruz edilən qaz kondensasiya və buxarlandırıcı hissələrin arasındakı fəzaya verilir.

Kalonun kondensasiya hissəsində məqsədli maddələrin praktiki tam kondensasiya dərəcəsini təmin edən temperatur

yaradılır. Beləliklə, kalonu terk edən qazın tərkibində demək olar ki, yüksək qaynayan komponentlər olmur [14].

Kalonun kondensasiya hissəsindən buxarlandırıcı hissəsinə tökülən kondensatın tərkibində əhəmiyyətli miqdarda alçaq qaynayan komponentlər olur.

Onların kondensatdan çıxarılması kalonun buxarlandırıcı hissəsinin əsas təyinatıdır.

Kondensatdan AΓK-nın çıxarılması qızdırıcı elementin köməyi ilə kalonun kubunda kondensatın qızdırılması hesabına həyata keçirilir. Bu halda kondensatın böyük miqdarda məqsədli məhsulları buxarlanır. Həmin məhsulların tutulması üçün kalonun buxarlandırıcı hissəsi boşqablarla təchiz olunur və rektifikasiyaya xas olan proseslər gedir.

Kondensasiya proseslərinin maddi balansı

Məlumdur ki, ideal sistemlər Raul-Dalton tənliyi ilə təsvir olunurlar:

$$p_y = P \cdot x \quad (13.1)$$

Verilən maddənin buxar və maye fazalar arasında paylanmasını xarakterizə edən faza tarazlığı sabiti K isə

$$K = y/x = P/p \quad (13.2)$$

bərabər olur.

Burada y , x -buxar və maye fazalarda komponentlərin mol payları;

P - verilən temperaturda komponentin doymuş buxar təzyiqi;

p -qarışıqın ümumi təzyiqidir.

(13.2) tənliyi faza tarazlığı sabitini təqribi hesablamaq üçün istifadə olunur. Yüksək təzyiqlərdə isə özünü doğrultmur. Çox vaxt K -nın qiyməti təcrübi yolla tapılır.

Müxtəlif maddələrin ideal qaz qanunlarına tabe olmasını nazərə almaq üçün Luis hesablama tənliklərinə xüsusi funksiya-fuqitivlik (uçuculuq) daxil etdi:

$$f_q \cdot y = f_m \cdot x \quad (13.3)$$

burada f_q – qarışıqın ümumi təzyiqi və verilən temperaturda qazda təmiz komponentin uçuculuğu; f_m – qarışıqın ümumi təzyiqi və verilən temperaturda təmiz maye komponentin uçuculuğudur.

Beləliklə,

$$K = f_m / f_q \quad (13.4)$$

alırıq.

Təcrübədə çox vaxt f aktivlik əmsalı α ilə ifadə olunur:

$$f_q = \alpha P \quad (13.5)$$

Aktivlik əmsalı gətirilmiş temperaturun $\Theta = T/T_{böh}$ gətirilmiş təzyiqdən $\pi = P/P_{böh}$ [$T_{böh}$ və $P_{böh}$ – böhran temperaturu (K-lə) və təzyiqidir] asılılığı qrafiklərindən müəyyən olunur.

Vander-Vaals tənliyi ilə təsvir olunan qazlar üçün f aşağıdakı tənliklə hesablanıla bilər:

$$\ln f_q = \ln(RT/(V-b)) + b/(V-b) - 2a/RTV \quad (13.6)$$

burada R-qaz sabiti;
V-ümumi P təzyiqində və T temperaturda buxarın mol həcmi;

a;b- Vander-Vaals tənliyinin sabitləridir.

$$a=0,422R^2T^2b_{\text{öh}}/Pb_{\text{öh}} \quad (13.7)$$

$$b=RTb_{\text{öh}}/8Pb_{\text{öh}} \quad (13.8)$$

f_m -i təqribi aşağıdakı tənliklə hesablamaq olar:

$$\ln(f_m/f_d)=U_0/RT(P-p) \quad (13.9)$$

burada f_d –T temperaturda və p təzyiqdə doymuş buxarın uçuculuğu; U_0 – təmiz mayenin mol həcmidir.

$$U_0 = M/\rho$$

M- komponentin mol kütləsi.

ρ - maye halda komponentin sıxlığıdır.

Misal 13.1. 20°C və 15 kq/sm² təzyiqdə butadiyenin faza tarazlığı sabitini tapmalı.

Onun böhran temperaturu $T_{b\text{öh}} = 161,8^\circ\text{C}$, böhran təzyiqi 42,6 kq/sm², 20°C-də doymuş buxarın təzyiqi $p = 2,44$ kq/sm² və maye butadienin sıxlığı $\rho = 620$ kq/m³-dir.

Həlli. Gətirilmiş temperatur və təzyiqi tapaq:

$$\Theta = (273+20)/(273+161,8) = 0,674$$

$$\pi = 15/42,6 = 0,352$$

Bu qiymətlər üçün qrafikdən aktivlik əmsalını $\alpha=0,66$ tapırıq.

Onda qaz şəkilli butadienin uçuculuğu:

$$f_q = 0,66 \cdot 15 = 9,9 \text{ kq/sm}^2 \text{ olur.}$$

Oxşar qaydada (20°C və $2,44 \text{ kq/sm}^2$ şəraitində) doymuş buxarın uçuculuğunu tapırıq:

$$f_d = 2,27 \text{ kq/sm}^2$$

(13.8) tənliyi üzrə maye butadienin uçuculuğu:

$$\ln f_m / 2,27 = 54(15 - 2,44) / (620 \cdot 0,082 \cdot (273 + 20)) = 0,0455$$

$$f_m = 2,37 \text{ olur.}$$

Faza tarazlığı sabiti:

$$K = f_m / f_q = 2,37 / 9,9 = 0,24$$

(13.2) ilə hesablanmış K ilə müqayisə üçün:

$$K = 2,44 / 15 = 0,16$$

Qaz qarışığının kondensasiyası praktiki olaraq iki üsulla düz axınla və əks axınla həyata keçirilir. Birinci halda qaz kondensatora yuxarıdan daxil edilir və kondensatla birlikdə aşağı hərəkət edir. İkinci halda qaz kondensatora aşağıdan daxil edilir və tökülən kondensata qarşı yuxarı hərəkət edir.

Fərz edək ki, kondensasiyaya n sayda komponentdən ibarət olan və qatılığı $y_{N1}, y_{N2}, \dots, y_{Nn}$ olan N mol qaz qarışığı daxil olur.

Hesab edək ki, kondensasiya zamanı L mol kondensat əmələ gəlir. Qaz fazada qalan komponentlərin qatılığını mol payları ilə $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$, kondensatdakını isə $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ ilə işarə edək. Onda qarışığın komponentləri üçün aşağıdakı maddi balans tənliyini yazmaq olar:

$$\begin{aligned}x_1 L + y_1 (N-L) &= N y_{N1} \\x_2 L + y_2 (N-L) &= N y_{N2} \\x_3 L + y_3 (N-L) &= N y_{N3} \\x_n L + y_n (N-L) &= N y_{Nn}\end{aligned}\tag{13.10}$$

burada $y_i = k_i x_i$ –dir.

(13.9) tənliyini aşağıdakı şəkildə yazaq:

$$\begin{aligned}x_1 L + k_1 x_1 (N-L) &= N y_{N1} \\x_2 L + k_2 x_2 (N-L) &= N y_{N2} \\x_3 L + k_3 x_3 (N-L) &= N y_{N3}\end{aligned}\tag{13.11}$$

$$x_n L + k_n x_n (N-L) = N_y N_n$$

buradan da

$$x_1 = N_y N_1 / [L + K_1(N-L)]$$

$$x_2 = N_y N_2 / [L + K_2(N-L)] \quad (13.12)$$

$$x_3 = N_y N_3 / [L + K_3(N-L)]$$

$$x_n = N_y N_n / [L + K_n(N-L)]$$

Alınan sistem n tənlikdən və $(n+1)$ sayda məchuldan ibarətdir. Bu sistemi həll etmək üçün $(n+1)$ -ci tənlik

$$x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n = 1 \quad (13.13)$$

olacaqdır.

Misal.4.2. Qaynayan ammoniyakla soyudulan düz axınlı kondensatora tərkibi (mol,%) aşağıdakı kimi olan 50 kmol qaz daxil olur:

Hidrogen	19,8	Etan	8,03
Metan	45,15	Propan	8,75
Etilen	18,27		

Kondensləşmə -40°S və 32 kq/sm^2 təzyiqlə aparılır. Kondensatın və kondensləşməyən qazın miqdarını və tərkibini tapmalı.

Həlli. Verilən şəraitdə bütün komponentlər üçün K-nın qiymətini tapmaq. Onlar: hidrogen üçün K sonsuz böyük qiymətə; metan- 3,3, etilen - 0,49; etan- 0,29; propan-0,042 olur. L-ə iki qiymət (10 və 11) verib (13.12) tənliyi üzrə hesablama aparırıq (cədvəl 13.1)

Interpolyasiya ilə $\sum x_i = 1$ şərtini ödəyən L-in həqiqi qiymətini tapırıq.

$$L_{\text{həq}} = 10 + (11 - 10)(1,027 - 1) / (1,027 - 0,991) = 10,75$$

Cədvəl 13.1.

L-in müxtəlif qiymətlərində komponentlərin kondensatda miqdarı (mol payları ilə)

Komponentlər	L = 10	L = 11	L = 10,75
Metan	0,159	0,161	0,161
Etilen	0,308	0,303	0,305
Etan	0,185	0,180	0,181
Propan	0,347	0,347	0,353
$\sum x_i$	1,027	0,991	1,000

Alınan dəlillər əsasında (fərqlər üzrə) kondensləşməmiş qazın miqdarını və tərkibini tapırıq.

Tam material balansını cədvəl şəklində tərtib edirik.

Cədvəl 13.2.

Kondensləşmənin material balansı

Komponentlər	İlk qaz		Kondensat		Kondensləşməmiş qaz	
	kmol	həcmi, %	k/mol	mol, %	kmol	həcmi, %
Hidrogen	9,900	19,8	-	-	9,900	25,2
Metan	22,57	45,5	1,73	16,1	20,84	53,1
Etilen	9,135	18,7	3,28	30,5	5,855	14,2
Etan	4,015	8,03	1,95	18,1	2,065	5,26
Propan	4,375	8,75	3,79	35,3	0,585	1,49
Cəmi	50,00	100,00	10,75	100,07	39,25	100,00

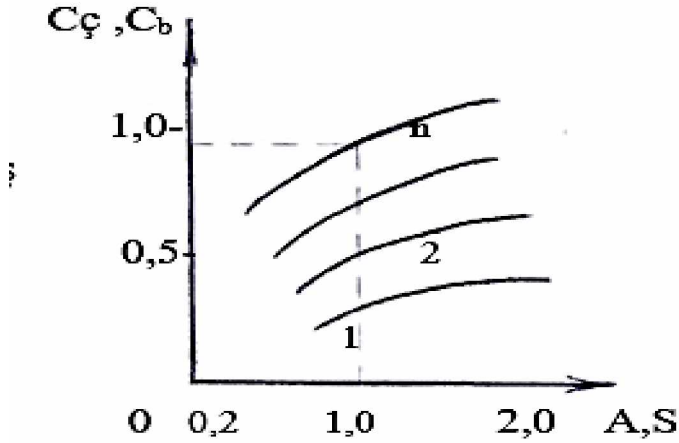
Komponentin çıxarılma dərəcəsi dedikdə həmin komponentin kondensləşmə zamanı kondensata keçən miqdarının kondensatora daxil olan qazdakı miqdarına olan nisbəti başa düşülür.

Buxarlanma dərəcəsi isə komponentin buxarlanan miqdarının aşağı tökülən mayedə onun ümumi miqdarına olan nisbətidir.

Kondensasiya-buxarlandırıcı kalonların hesablanmasında əsasən tam maddi balans tərtib olunur, kondensatın və

kondenslənməmiş qazın, resirkulyasiya edən buxar və maye axınlarının tərkibləri müəyyən olunur.

Kremser-Braun diaqramına əsasən çıxarılma və buxarlanma dərəcəsi tapılır. $C_{\text{ç}}$, C_b - çıxarılma və buxarlanma dərəcəsi; A, S - çıxarılma və buxarlanma amilləri [21].



Şək.13.2. Kremser-Braun diaqramı

b) Absorbsiya-buxarlandırıcı kalonlar.

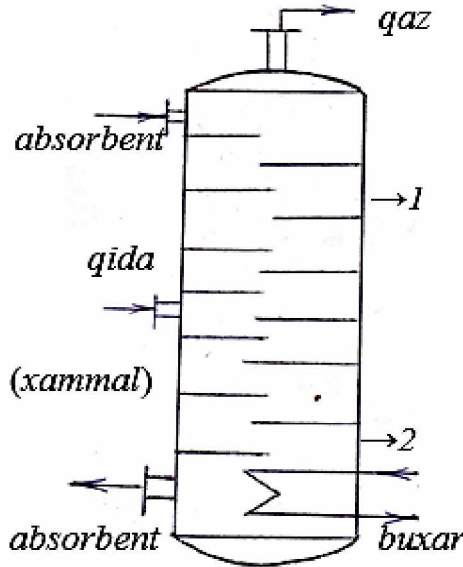
Absorbsiya-buxarlandırıcı kalonlar absorbsiya üsulu ilə maddələr qarışığının dəqiq ayrılması üçün tətbiq edilir.

Absorbsiya-buxarlandırıcı kalonlarda gedən proseslər kondensasiya- buxarlandırıcı kalonlarda gedən proseslərə oxşardır. Yalnız fərq ondadır ki, burada komponentin çıxarılması tələb olunan temperatura qədər soyudulma hesabına deyil, aparatın yuxarı hissəsinə verilən uducu (absorbent) tərəfindən absorbsiya olunma hesabına həyata keçirilir. Asan uçucu məhsulların doymuş absorbentdən buxarlandırılmasının (qovulmasının) məqsəd və üsulu kondensasiya-buxarlandırıcı

kalonlarda kondensatdan müvafiq maddələrin buxarlandırılmasından fərqlənir.

Absorbsiya-buxarlandırıcı kalon (şək.13.2) iki hissədən: yuxarı-absorbsiya, aşağı-buxarlandırıcı hissələrdən ibarətdir. Qaz kalonun ortasına, absorbsiya hissəsinin birinci boşqabının altına verilir, buxarlanmış məhsullar axını ilə birlikdə yuxarı qalxır, və yuxarıdan tökülən təzə absorbentlə boşqablarda (və ya doldurmalarda) yuyulur.

Doymuş absorbent kalonun buxarlandırıcı hissəsinə düşür, kalonun kub hissəsində isə məhluldan bütün arzu olunmayan AГK-nın çıxarılmasını təmin edə bilən temperatur saxlanılır. Buxarlanmaya məruz qalan doymuş absorbent desorbsiya qurğusuna verilir.



Şək.13.3. Absorbsiya-buxarlandırıcı kalon.
1.Absorbsiya hissəsi, 2.Buxarlandırıcı hissə.

Absorbsiya-buxarlandırıcı kalonların hesabı absorbsiya prosesinin xüsusiyyətlərindən alınan bir sıra fərqlər nəzərə alınmaqla kondensasiya-buxarlandırıcı kalonların hesabı ilə analogiya təşkil edir və ona uyğun aparılır.

c) Kimyəvi reaksiya ilə müşayiət olunan kütlə mübadiləsi prosesləri və avadanlıqları. Kimyəvi reaksiya ilə müşayiət olunan proseslər (və ya reaksiya-kütlə mübadiləsi prosesləri) eyni zamanda kimyəvi çevrilməni və reaksiya məhsullarının ayrılmasını həyata keçirməyə imkan verir. Bundan başqa belə proseslər çox vaxt məddələri fiziki üsullarla ayırmaq çətin olduqda tətbiq olunurlar. Belə ki, komponentlərdən birini və ya bir neçəsini kimyəvi əlaqələndirmək lazım gəlir.

Reaksiya-kütlə mübadiləsi proseslərinə praktiki olaraq ixtiyari kütlə mübadiləsi proseslərinin: absorbsiya, rektifikasiya, ekstraksiya, sorbsiya və s. xarakteri kimi baxıla bilər. Bu halda özündə aşağıdakı elementar mərhələləri birləşdirən proseslər baş verir:

1) bir və ya bir neçə reagentin fazaların (1) birinin həcmindən fazalar ayırıcı sərhədə diffuziyası;

2) reagentlərin fazalar ayırıcı sərhəd səthindən digər fazanın (2) həcmində diffuziyası;

3) 2 fazasında kimyəvi reaksiya;

4) kimyəvi reaksiya hesabına qatılıqlar qradienti ilə şərtlənən 2 fazasında iştirak edən və reaksiya məhsullarından ibarət olan reagentlərin 2 fazası həddində (çərçivəsində) diffuziyası.

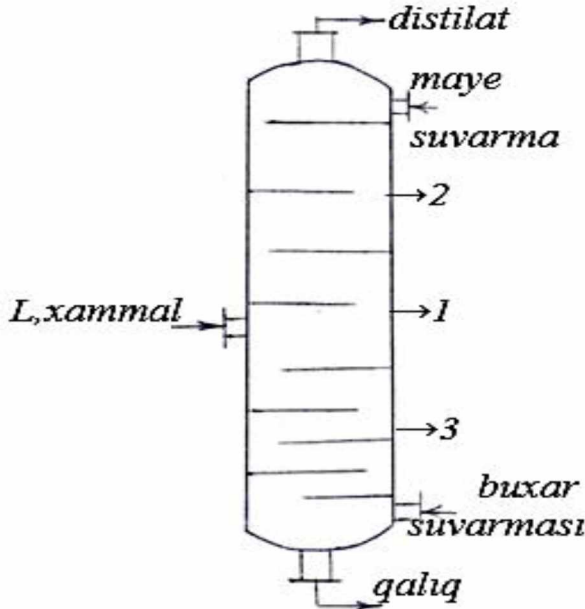
2-4 mərhələləri eyni zamanda və ardıcıl baş verirlər, ona görə də qarşılıqlı üst-üstə düşürlər. Əgər 1 mərhələsi sürəti müəyyən edirsə, onda ümumi sürət kimyəvi reaksiyadan asılı olmur və proses adı kütlə mübadiləsi prosesindən fərqlənmir.

Beləliklə, baxılan proseslər üçün 2-4 mərhələlərinin təsirinin əhəmiyyəti xarakterikdir. Bütün qeyd edilənlər avadanlıqların hesabı üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Aparatların konstruksiyası isə praktiki olaraq müvafiq kütlə

mübadiləsi aparatlarından-absorber, ekstraktor, rektifikasiya kalonu və s. fərqlənir.

d) Rektifikasiya aparatlarının tipləri və konstruksiyası. Rektifikasiya prosesi qarşı-qarşıya və əks istiqamətdə hərəkət edən maye və buxar fazalarının çoxdöfəli kontaktı zamanı baş verən maddə və istilik mübadilələri sayəsində ilk qarışığı təmiz komponentlərə ayırmağa imkan verən iki tərəfli diffuziya prosesidir.

Daxilində rektifikasiya prosesi gedən aparat rektifikasiya kalonu adlanır. Məlumdur ki, rektifikasiya prosesi aparatlarda fazaların fasiləsiz və pilləli kontaktı ilə həyata keçirilir.



Şək.13.4. Tam rektifikasiya kalonu
1.Qidalandırıcı bölmə, 2.Qatışdırıcı bölmə, 3.Buxarlandırıcı bölmə.

Aydındır ki, rektifikasiya aparatının yüksək səmərəli işi kütlə ötürmə üçün yaxşı şərait təmin etməsidir. Tam rektifikasiya kalonu üç hissədən: qidalandırıcı, qatılaştırıcı və buxarlandırıcı bölmələrdən ibarətdir. Kalona qarşı-qarşıya axını təmin etmə və hərəkətverici qüvvəni artırmaq məqsədi ilə yuxarıdan maye suvarma, aşağıdan isə buxar suvarması verilir.

Sənayedə əsasən dörd tip rektifikasiya aparatı: boşqablı, doldurmalı, borulu (injeksiyalı) və mexaniki rektifikasiya aparatları istifadə olunur. Boşqablı rektifikasiya kalonları daxilində bir-birindən bərabər məsafədə hündürlük boyunca boşqablar yerləşdirilən şaquli aparatlardır.

Bu boşqablarda aşağıdan qalxan buxar və yuxarıdan tökülən maye arasında kontakt, istilik və kütlə mübadiləsi baş verir. Boşqablar konstruksiyasına görə S şəkilli, qalpaqlı, klapanlı və torvari olurlar.

Doldurmalı rektifikasiya kalonları konstruksiyaca absorbsiya və ekstraksiya üçün olan kalonlardan praktiki fərqlənir. Burada proses doldurma üzərində yaranan nazik təbəqə üzərində fasiləsiz həyata keçirilir və “təbəqə rejimi” adlanır.

Borulu rektifikasiya kalonları maye və buxar boruları ilə əlaqələndirilmiş separator sistemləridir. İnjeksiya qurğusunun köməyi ilə buxarın maye ilə qarışması baş verir. Sonra separatorada buxar və maye ayrılır. Onlar az yayılmışdır.

Mexaniki kalonlardan sənayedə mərkəzdənqaçma təbəqəli rektifikasiya aparatları tətbiq olunurlar. Bu aparatlarda silindir və ya spiral şəkilli sürətlə fırlanan rotor mayenin hərəkətini nazik təbəqə şəklində yaradır, əks axınla böyük sürətlə buxar hərəkət edir.

Nəticədə kütləötürmə şəraiti yaxşılaşır və rektifikasiyanın səmərəliliyi yüksək olur.

e) Kalon aparatlarının hesabı.

Kalon aparatlarının çox müxtəlif istilik-kütlə mübadiləsi proseslərini həyata keçirmək üçün tətbiq edirlər. Müxtəlif

təzyiqlərə hesablanmış kalon aparatlarının silindir şəklində olan gövdələri standartlaşdırılmışdır.

Kalonların diametrlərinin dəyişmə intervalı 200 mm-dir. İstifadə edilən boşqabların tipindən asılı olaraq onlar arasındakı məsafə 300÷1000 mm hədlərində dəyişir.

Kalon aparatının əsas ölçüsü olan diametri ən böyük buxar axınının sərfi və axının sürəti əsasında hesablanır. Buxarın buraxıla bilən sürətini hesablamaq üçün çoxlu formullar təklif edilmişdir. Bunlardan ən geniş yayılmışı Sauders və Braun formuludur:

$$W=8,47 \cdot 10C \sqrt{(\rho_m - \rho_b) / \rho_b} \quad (13.14)$$

burada C - boşqablar arası məsafədən, səthi gərilmədən və boşqabın tipindən asılı olan əmsaldır; ρ_m – boşqab üzərindəki mayenin orta sıxlığı; ρ_b – buxarın sıxlığıdır.

Buxarın həcmi sərfi:

$$V = G \cdot 22,4 \cdot (273+t) \cdot P_0 / 3600 \cdot 273 \cdot P \quad (13.15)$$

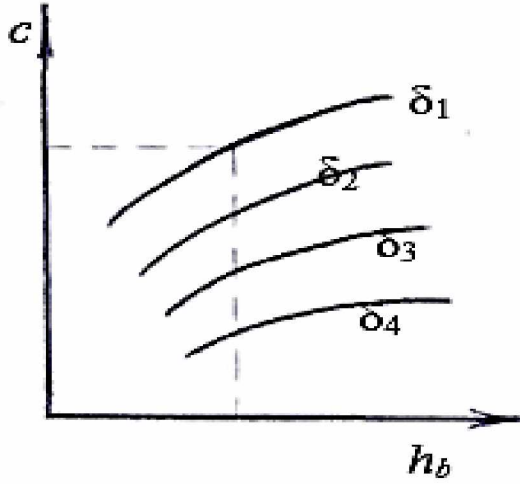
P–işçi təzyiqdir.

Kalonun diametri isə belə hesablanır:

$$D = \sqrt{4V / \pi W} \quad (13.16)$$

Torvari boşqablarda buxarın sürətinin yuxarı həddi ilə aşağıdakı düstur hesablanır:

$$W_{y.h} = 0,05 \sqrt{\rho_m / \rho_b} \quad (13.17)$$



Şək.13.5 $C=f(h_b)$ aslılığı
 h_b -boşqablar arası məsafədir.

$W_{y.h}$ – buxarın sürətinin yuxarı həddidir.
 Buxarın buraxıla bilən sürəti isə:

$$W = (0,85 \div 0,95)W_{y.h}$$

Aparatın ümumi hündürlüyü:

$$H = (N-1)h_b + H_{sep} + H_{kub} \quad (13.18)$$

kimi hesablanır.burada N - boşqabların sayı;

H_{sep} , H_{kub} - kalonun separasiya və kub hissələrinin hündürlüyüdür.

Standartlaşdırılmış boşqabları seçmək məqsədi ilə kalonların hidravlik hesabı aparılır, boşqabdakı təzyiq itkisi, daha doğrusu boşqabın müqaviməti tapılır:

$$\Delta p = \Delta p_q + \Delta p_m + \Delta p_\sigma \quad (13.19)$$

burada Δp_q , Δp_m , Δp_σ – quru, maye təbəqəsinin və səthi gərilmənin yaratdığı müqavimətdir.

$$\Delta p_q = \xi \cdot (\rho_b \cdot W_o) / 2 \quad (13.20)$$

burada ξ – müqavimət əmsalı;

W_o – buxar borularında və ya dəşiklərdə buxarın sürətidir.

Maye sütununun boşqabdakı müqaviməti:

$$\Delta p_m = [h_{b,d} + (h_y + \Delta h) / 2] \rho_m \cdot g$$

burada $h_{b,d}$ – barbotajın dərinliyi;

h_y – mayenin boşqabın yarığında səviyyəsi;

Δh – maye səviyyəsinin fərqi.

Δp_σ kiçik olduğu üçün nəzərə alınmaya bilər.

14. ELEKTROKİMYƏVİ PROSESLƏRİN HESABININ ƏSASLARI

Elektrik enerjisini kimyəvi enerjiyə və yaxud da əksinə kimyəvi enerjinin elektrik enerjisinə çevrilməsi ilə əlaqədar baş verən proseslər elektrokimyəvi proseslər adlanır.

Elektrokimyəvi proseslərin əsasında Faradey qanunları durur. Faradeyin birinci qanununa görə istənilən elektrod prosesində elektroliz zamanı çevrilən maddənin miqdarı cərəyan şiddəti və onun keçmə müddəti ilə düz mütənasibdir. Daha doğrusu ayrılan (çevrilən) maddə miqdarı keçən elektrik miqdarı ilə mütənasibdir.

Faradeyin ikinci qanunu ionların təbiətinin təsirini xarakterizə edir. Qanun müəyyən edir ki, müxtəlif elektrolit məhlullarından eyni miqdarda elektrik miqdarı buraxıldıqda çevrilən, ayrılan hər maddənin miqdarı onların ekvivalent kütlələri ilə mütənasibdir.

Həmçinin istənilən maddənin bir ekvivalentinin ayrılması üçün 96500 kulon və ya 26,8 A·saat elektrik miqdarı buraxılması tələb olunur. Lakin yanaşı proseslərin getməsi ilə əlaqədar olaraq həmişə Faradey qanunu üzrə ayrılmalı olan maddə miqdarından az maddə ayrılır [13-20].

Elektroliz zamanı elektrik enerjisindən səmərəli istifadə etməyin əsas kriteriyası cərəyana görə çıxım və enerjinin istifadə əmsalıdır. Cərəyana görə çıxım η (% ilə) elektroliz zamanı alınan maddənin faktiki miqdarının G_f Faradey qanunu üzrə alınacağı maddənin maksimum miqdarına G_{max} olan nisbətidir.

$$\eta = (G_f / G_{max}) \cdot 100 \quad (14.1)$$

Cərəyana görə çıxım anlayışı kimyəvi prosesdə məhsulun çıxımını anlayışına oxşardır. Maddənin nəzəri miqdarı - G_{max} (kq ilə) Faradey qanunundan alınan düstur üzrə hesablanı bilər:

$$G_{\max}=(I\tau E)/1000 \quad (14.2)$$

burada, I - cərəyan şiddəti, A; τ - elektroliz müddəti, saat; E - 1A·saat cərəyan keçdikdə elektrodda ayrılan maddənin miqdarıdır.

Elektroliz zamanı nəzəri tələb olunan enerji miqdarının W_n faktiki sərf edilən enerjinin W_f miqdarına olan nisbəti enerjinin istifadə olunma əmsalı μ (% ilə) adlanır.

$$\mu=(W_n/ W_f)\cdot 100 \quad (14.3)$$

Bir kq məhsula görə enerjinin nəzəri sərfi (kVt/saat ilə) aşağıdakı tənliklə müəyyən olunur:

$$W_n=U_n I \tau / G_{\max} \quad (14.4)$$

Elektroliz aparatında (elektrolizərdə) nəzəri gərginlik U_n anod φ_a və katod φ_k reaksiyalarının tarazlıq halında potensial fərqinə (V ilə) bərabərdir.

$$U_n= \varphi_a- \varphi_k \quad (14.5)$$

Elektrodun tarazlıq potensialını Nernst düsturu ilə müəyyən edilə bilər:

$$\varphi_k= \varphi^0+(RT/nF)\ln a_1 \quad (14.6)$$

$$\varphi_a = \varphi^0 - (RT/nF) \ln a_2 \quad (14.7)$$

burada, φ^0 – standart elektrod potensialı; R–qaz sabiti; T–temperatura; a_1, a_2 – elektrolit məhlullarında ionların aktivliyi; n –ionun yükü; F – faradey ədədidir.

Standart elektrod potensialları 25⁰C temperatur, suda məhlullar üçün

1 ekv/ℓ aktivlik və 10⁵ Pa təzyiq şəraiti üçün ədəbiyyatda verilir.

Elektroliz aparatında faktiki gərginlik U_{fakt} polyarlaşma, gəginliyin yüksəlməsi, həmçinin elektrolit və cərəyan naqillərinin müqavimətləri hesabına nəzəri gərginlikdən yüksək olur. Faktiki gərginliyi aşağıdakı düstula hesablamaq olar:

$$U_{fakt} = (\varphi_a - \varphi_k) + \Delta\varphi_a + \Delta\varphi_k + \sum IR \quad (14.8)$$

burada, $\Delta\varphi_a$ - anodda elektrokimyəvi polyarlaşmanı kompensasiya edən gərginlik; $\Delta\varphi_k$ - katodda elektrokimyəvi polyarlaşmanı kompensasiya edən gərginlik; $\sum IR$ - müqavimət nəticəsində naqillərdə gərginlik düşküsidür [24-29].

Enerjinin faktiki sərfini aşağıdakı tənliklə tapmaq olar:

$$W_f = U_{fakt} I \tau / G_{fakt} \quad (14.9)$$

W_n -in (13.4)-dəki qiymətini (13.3)-də və W_f (13.9) nəzərə alsaq, alarıq:

$$\mu = (U_n / U_{fakt}) \eta \quad (14.10)$$

Sənaye miqyasınada məhlulların elektrolizi zamanı cərəyana görə çıxım 0,8-0,9, ərintilərin elektrolizi zamanı isə daha aşağı olur. Məhlulların elektrolizi zamanı enerjinin istifadə əmsalı 0,5-dən yuxarı, ərintilərin elektrolizi zamanı isə 0,5-dən aşağı olur [30-37].

ƏDƏBİYYAT

1. Abdullayev R.X. Kimyəvi avadanlıqların hesabı və konstruksiya edilməsinin əsasları. Bakı: ADNA, 2000. 130s.
2. Atayev M.Ş. Kimya texnologiya proseslərinin mühəndis tərtibatı. Metodik göstəriş. Bakı: 1989. 61s.
3. Həsənov Ə.A., Atayev M.Ş., İbrahimov Ç.Ş. Kimya sənayesinin prosesləri və aparatları-1 Bakı: ADNA 2016. 83s.
4. Həsənov Ə.A., Atayev M.Ş., İbrahimov Ç.Ş. Kimya sənayesinin prosesləri və aparatları- Bakı:ADNA 2012. 157s.
5. Lənbəranski R.Ə., Əmircanov R.T., Qurbanəliyev T.-H. Neft emalı və neft kimyasının əsas prosesləri və aparatların hesablanması. Bakı: Maarif.1988.184s.
6. Həsənov Ə.A., M.Ş. Atayev, Ç.Ş. İbrahimov «Kimya sənayesinin prosesləri və aparatları-2», Bakı, 2012.
7. Həsənov Ə.A. “Kimya sənayesinin proses və aparatları”. Dərslik, Bakı: “Elm”, 2019, 324 səh.
8. Həsənov Ə.A., Məmmədov Q.Ə., Əliyev S.Ə. “Kimya texnologiyasının əsas prosesləri və aparatları” Bakı. 2020. ADNSU, 264 s.
9. Həsənov Ə.A., Atayev M.Ş., Hüseynov A.S., Qəzvini K.A. Texnoloji proseslərin nəzəri əsasları. Bakı:2017. 107s.
10. Həsənov Ə.A. “Kimya sənayesinin prosesləri və aparatları-”, Bakı- “Elm”, 2019-322 s.
11. Q.İ. Səfərov, A.S. Məmmədov. Neft və qaz emalının texnologiyası. “Maarif”. Bakı – 2000.
12. S.Ə. Novruzov. Üzvi kimya texnologiyası və sənaye ekologiyası. Bakı. 2007.
13. S.Ə. Novruzov. Qeyri-üzvi kimya texnologiyası. Bakı. 2007

14. Комиссаров, Ю. А. Процессы и аппараты химической технологии: учебное пособие для вузов / Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент; под ред. Ю. А. Комиссарова. – М.: Химия, 2011 – 1230 с.
15. Машины и аппараты химических производств: учеб. пособие для вузов / А. С. Тимонин, Б. Г. Балдин, В. Я. Борщев [и др.]; под общей ред. А. С. Тимониной. – Калуга: Изд-во Н. Ф. Бочкаревой, 2008 – 872 с.
16. Рудобашта, С. П. Массоперенос в системах с твердой фазой / С. П. Рудобашта. – М.: Химия, 1980. – 248 с
17. Айнштейн В.Г., Захаров М.К., Носов Г.А., Общий курс процессов и аппаратов химической технологии, М: Э, «Логос» «Высшая школа», 2002. 887с.
18. Краткий справочник физико-химических величин. 456 с.
19. Расчеты химико-технологических процессов. Под редакцией И.П.Мухленова. Л: «Химия» 1976. 300с.
20. Айнштейн А.Г. Общий курс процессов и аппаратов химической технологии: Книги 1 и 2- М.: Высшая школа, 2003. – 1757с.
21. Дытнерский Ю.И. Процессы и аппараты химической технологии: учебник для вузов: в 2 ч. М: Химия, 1995. 368 с.
22. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии: учебник для вузов / М: Альянс, 2009. 750 с.
23. Технология переработки нефти. Часть первая. Первичная переработки нефти под ред. О.Ф. Глаголевой, В.М. Капустина. Б., Химия, «Колос С», 2005, 399 с.

24. Ульям Л. Леффалер. Переработка нефти. М., ЗАО «Олимпбизнес», 2005, 224 с.
25. Ахметов С.А., Ишимияров М.Х., Кауфман А.А., Технология переработки нефти и газа и твердых горючих ископаемых Санкт-Петербург, недра, 2009,832с.
26. Ахметов С.А., Ишимияров М.Х., Воровкин А.П., Докучаев Е.С.,Мальшев Ю.М., Технология, экономика и автоматизация процессов переработки нефти и газа. М., Химия 2005,736с.
27. Ваиков П.Г. процессы переработки нефти. Часть II, М., ЦНИИТЭнефтехим,2000,224с.
28. Флагман нефтехимической науке. Главный научный редактор академик М.И. Рустамов. Баку,»Элм»,1999,492с.
29. Потехин В.М. Основы теории Химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки Санкт-Петербург, 2005,912с.
30. Магарил Р.З. Теоретические основы химических процессов переработки нефти. М.,Университет. Книжный дом., 2008,208с.
31. Сафиева Р.С. Физикохимия нефти, физико-химические основы переработки нефти. М.,Химия,1998,448с.
32. Калининский Э.Ф., Ховкин В.А., Глубокая переработка нефти: Технологические и экономические аспекты. М., Техника, 2001, 383с.
33. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа. Уфа, Изд.» Гилем», 2000, 671с.
34. Holman, J.P., "Heat transfer", McGraw-Hill, 2010.
35. Incropera, F.P., "Fundamentals of heat transfer", John Wiley & Sons, 2006.

36. Incropera, F.P., DeWitt, D.P., Bergman, T.L., Lavine, A.S., "Fundamentals of heat and mass transfer", John Wiley & Sons, 2007.
37. Incropera, F.P., "Fundamentals of heat transfer", John Wiley & Sons, 2006.

Authors:

**Atayev Matlab Shakhbala, Huseynov Adigozel Samidkhan,
Ghazvini Kamala Adil, Guliyeva Sevinj Nizami**
book

**"CALCULATION OF TECHNOLOGICAL
PROCESSES"**

Abstract

In modern times, on a global scale, including in our country, a significant increase in the production of raw materials for motor fuels, as well as chemical, petrochemical and microbiological industries, improving the quality of lubricants, and expanding their production are considered the main priority issues facing the petrochemical industry. At the same time, it should be noted that a large number of products are obtained by the implementation of various chemical-technological processes in the chemical, oil refining, and petrochemical industries. Taking into account the need to prepare appropriate textbooks to bring closer the solution of the issues brought to attention, a new textbook called "Calculation of Technological Processes" was presented.

Various devices and machines are used during the chemical-technological processes for the purchase of a wide variety of products. In the current material, the theoretical basis of the processes applied and used in various fields of chemical technology is given, and the calculation methods are defined for the relevant devices. In general, petrochemical technology is a field that deals with the production of products necessary for people, including the creation of efficient production processes. "Calculation of technological processes" textbook serves to

solve concrete engineering problems in the field of petrochemical technology, to study technological processes and their interrelationships, typical regularities of technological processes. It is possible to acquire the ability to master important calculation methods and apply them by using this material.

Among the materials developed in the field of engineering sciences, the "Calculation of technological processes" textbook, which is has of special importance, can be applied in the creation of new technological processes, further improvement of existing technological processes, and in the implementation of the calculation part of design works. Calculation of technological processes is the most labor-intensive part of designing any chemical production. At the same time, calculation of technological processes is the final stage of laboratory research, and it is also used in the study of existing facilities. The purpose of such calculations is to determine optimal production parameters and kinetic constants, or to calculate reaction volumes and basic dimensions of chemical reactors. Improving the quality and increasing the variety of products produced in the modern stage of development of the country's economy, creating waste-free technological processes to protect the environment, applying advanced technological processes to industry, increasing the reliability of plant equipment, intensifying existing processes, as well as improving their technical indicators, which are also of social and economic importance, a special role in solving issues. A number of the following important issues are highlighted in the presented textbook:

- on the basis of the comparison of the technical and economic analysis of the existing production, it is possible to choose a

more efficient technological scheme, the optimal design of the devices and the conditions for the more efficient implementation of the process.

- based on the evidence of the material balance, it is possible to find out the consumption of raw materials and auxiliary materials, the cost of the product, the yield of the products, the volume of the reaction zone, the number of reactors, production losses according to the productivity of the apparatus and plant. Based on the material balance, a heat balance can be drawn up, which allows determining the fuel demand, the area of the heat exchange surface, and the consumption of heat transfer and cooling agents.

- it is important to solve the issue of choosing the parameters of the technological flow, ensuring the operation of the system in the given mode (substance concentration, temperature, pressure, mass consumption, etc.). In addition to following the above, it is necessary to solve additional issues. These are issues of selection of constructive material, automation of the process, analytical control, compliance with ecological and sanitary-hygienic norms.

- the engineer-chemist designing the reactor where the technological process will be implemented must first of all have information about the kinetics of the process. The volume of the reaction apparatus, the productivity and the intensity of the equipment work directly depend on the speed of the process.

- looking at the effect of temperature on the rate of chemical reaction is necessary to find the optimal conditions for conducting a chemical technological process

- the main dimensions of the reactors are calculated based on the duration of the reagents in the reactor, flow rate and other parameters, depending on the operating mode.

- in the presence of a catalyst, the activation energy decreases, and as the activation energy decreases, the reaction rate increases according to the Arrhenius equation. At the same time, with the decrease in activation energy, the reaction composition also decreases in some cases. Thus, the composition of the elementary stages of a catalytic reaction can be smaller than the composition of a non-catalytic reaction.

- calculation of catalytic processes and reactors is based on the general equations of kinetics. All the kinetic equations that we considered earlier are applied in the calculation of catalytic reactors, taking into account the characteristics of catalytic processes.

- according to the construction of the equipment, it can be in the form of capacity type, main fractionator type, vertical column type for different purposes, as well as mixing and separating equipment

- the calculation of electrochemical processes is based on Faraday's laws. According to Faraday's first law, the amount of substance converted during electrolysis in any electrode process is directly proportional to the intensity of the current and the duration of its passage. More precisely, the amount of separated (transformed) matter is proportional to the amount of electricity passing through.

"Calculation of technological processes" textbook was developed for the graduate level of education. The textbook includes the basics of material calculation of technological processes, consumption coefficients, equilibrium of

technological processes, equilibrium constant, heat calculation of technological processes, kinetics of technological processes, effect of temperature on reaction rate, calculation of kinetic parameters, determination of optimal temperature, basic mathematical models of reactors, heterogeneous catalytic processes, catalytic It is of particular importance in the study of modern engineering science by including sections on the features of the calculation of reactors, the basics of the calculation of mass transfer processes, mass transfer equipment and their construction, the basics of the calculation of electrochemical processes. The presented textbook has the potential to be an exceptional tool for inculcating engineering skills at the graduate level . The funds can be used by students, engineers, and specialists who are engaged in project work.

©Publisher: NGO International Center for Research, Education and Training.

MTÜ Rahvusvaheline Teadus -, Haridus - ja Koolituskeskus.

Management Board Member: Seyfulla Isayev.

©Publisher: NGO Azerbaijan International Diaspora Center in Georgia.

©Editorial office: Harju maakond, Tallinn, Lasnamäe district, Väike-Paala tn 2, 11415.

©Typography: NGO International Research, Education & Training Center.

The Baltic Scientific Journals.

Registered address: Harju maakond, Tallinn, Lasnamäe district, Väike-Paala tn 2, 11415.

Telephones: +994 552 417 012; +994 518 648 894; +994 552 807 012

Websites: <https://bsj.fisdd.org/>

E-mails: gulustanbssjar@gmail.com, sc.mediagroup2017@gmail.com

E-ISBN: 978-9916-9769-5-1