

Министерство образования и науки РФ

**Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(Технический университет)**

**Кафедра технологии
нефтехимических и углехимических
производств**

А.А.ГАЙЛЕ

**ПРОЦЕССЫ РАЗДЕЛЕНИЯ И ОЧИСТКИ
ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ И ГАЗА**

Методические указания
для студентов заочной формы обучения

Санкт-Петербург

2011 г.

УДК 66.061

Гайле А.А. Процессы разделения и очистки продуктов переработки нефти и газа: методические указания/ А.А.Гайле. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011. –156 с.

В методических указаниях для студентов заочной формы обучения к учебной дисциплине «Процессы разделения и очистки продуктов переработки нефти и газа» приведены задания к трем контрольным работам, примеры с решениями, вопросы для проработки тем лекционного курса и экзаменационные вопросы.

Библиогр. 12+5

Рецензент – О.М.Флисюк, д-р техн.наук, профессор, зав.кафедрой процессов и аппаратов химической технологии СПбГТИ(ТУ)

Утверждено на заседании учебно-методической комиссии факультета технологии органического синтеза и полимерных материалов « » февраля 2011 г.

Рекомендовано к изданию РИСо СПбГТИ(ТУ)

ВВЕДЕНИЕ

При выполнении контрольных работ по учебной дисциплине «Процессы разделения и очистки продуктов переработки нефти и газа» рекомендуется кроме данных «Методических указаний» использовать учебные пособия [1,2].

К контрольным работам N1 и N2 приведены по 40 вариантов, каждый студент заочной формы обучения выполняет индивидуально задания по одному из вариантов в соответствии с присвоенным номером. Контрольная работа N3 включает две части: индивидуальное задание – ответ на вопрос под тем же номером с обоснованием выбора одного или нескольких наиболее эффективных методов разделения указанной системы и требующихся разделяющих агентов, и также вторую часть – ответы на тестовые вопросы. Каждый студент должен ответить на все 47 вопросов тестового задания, указав после номера вопроса выбранную букву (иногда несколько букв) без обоснования выбора.

Чтобы правильно ответить на предложенные вопросы в первой части контрольной работы N3, необходимо, используя справочник, установить, какие физико-химические свойства разделяемых компонентов существенно различаются (температуры кипения или плавления), не образуют ли они азеотропную смесь, каковы различия в структуре молекул (степени ненасыщенности, способности к образованию водородных связей), форме молекул (поперечное сечение, длина), основности или кислотности, в величинах донорных или акцепторных чисел, параметрах растворимости Гильдебранда, реакционной способности. Для выбора наиболее экономичного способа разделения существенное значение имеет и состав разделяемой смеси. При выборе эффективных разделяющих агентов необходимо учитывать возможность их регенерации.

Провести проверку термодинамической согласованности экспериментальных данных о равновесии жидкость – пар для бинарной системы методом Редлиха-Кистера при температуре Рассчитать константы уравнений Редлиха-Кистера, Маргулеса, ван Лаара, Вильсона и определить, какое уравнение лучше использовать для аппроксимации данных, построив зависимости $\ln \gamma_1 = f(x_1)$ по экспериментальным и расчетным значениям γ_1 . Рассчитать коэффициенты активности компонентов при $x_1 = \dots$ (подчеркнутые значения x_1 в следующих таблицах) методом UNIFAC.

Таблица 1 – Экспериментальные данные о равновесии жидкость – пар в бинарных системах для выполнения индивидуальных заданий:

1 Бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при 25°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0	0.60
10	97.91	26.30
<u>20</u>	98.83	43.05
30	99.15	55.10
40	99.31	63.30
50	99.42	69.50
60	99.50	74.35
70	99.58	79.40
80	99.67	84.25
90	99.78	89.03
100	100.00	94.90

2 Бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при 40°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0	1.656
10	96.94	48.80
20	98.33	80.30
<u>30</u>	98.76	103.0
40	99.00	119.1
50	99.17	132.15
60	99.30	143.4
70	99.41	151.9
80	99.52	160.7
90	99.67	169.8
100	100.00	181.1

3 Бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при 70°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0	9.35
10	93.98	142.2
20	96.64	231.6
30	97.63	302.1
40	98.13	351.4
<u>50</u>	98.46	392.1
60	98.73	427.3
70	98.94	455.6
80	99.15	482.7
90	99.44	512.7
100	100.00	547.4

4 Бензол (1) – бутанол-1 (2) при 45°C [4]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
17.94	81.07	114.04
<u>29.28</u>	86.89	148.84
39.97	89.46	171.29
50.85	91.15	187.62
59.96	92.21	197.33
69.93	93.16	205.68
80.14	94.21	212.80
90.26	95.68	218.90
94.62	96.77	221.29

5 Диметилформамид (1) – бензол (2) при 30°C [5]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
5.76	0.55	15.13
7.76	0.71	14.91
13.56	1.13	14.33
<u>28.68</u>	2.11	12.63
44.58	3.41	10.69
49.84	3.99	9.92
64.45	6.36	7.75
70.87	8.01	6.63
72.60	8.56	6.34
85.69	15.87	3.92
89.48	20.44	3.14
90.78	22.65	2.93
100.00	100.00	0.62

6 Диметилформамид (1) – бензол (2) при 50°C [5]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа.
7.42	0.87	33.69
10.10	1.13	33.32
17.02	1.75	31.68
<u>30.89</u>	2.94	28.18
46.11	4.62	23.88
52.03	5.51	22.00
69.95	9.88	15.77
72.00	10.65	14.96
73.14	11.13	14.47
86.49	20.77	8.91
90.50	27.21	7.13
92.79	32.96	6.01
100.00	100.00	2.05

7 Толуол (1) – анилин (2) при 80°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
10.15	77.22	72.39
19.83	86.40	111.53
<u>28.45</u>	89.89	139.31
40.68	92.71	170.03
50.35	94.14	190.81
58.45	95.17	206.93
69.70	96.395	228.29
69.55	96.399	228.26
79.20	97.38	245.54
90.28	98.66	268.72

8 Толуол (1) – анилин (2) при 90°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
10.18	73.91	102.76
19.88	84.25	155.91
<u>28.90</u>	88.52	195.50
40.35	91.49	236.50
49.55	93.12	264.13
59.00	94.50	290.43
69.35	95.833	318.60
79.80	97.12	346.27
90.34	98.503	375.89
95.25	99.235	390.80

9 Пропионитрил (1) – этилбензол (2) при 40°C [6]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
0	0	2.955
10	49.66	5.384
20	63.92	6.920
<u>30</u>	71.48	8.044
40	76.47	8.923
50	80.36	9.649
60	83.90	10.312
70	87.34	10.932
80	90.88	11.516
90	94.89	12.072
100	100.00	12.617

10 Пропионитрил (1) – этилбензол (2) при 80°C [6]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
0	0	16.907
10	42.76	27.170
20	57.42	33.734
30	65.87	38.677
<u>40</u>	71.81	42.653
50	76.56	45.994
60	80.82	48.974
70	84.94	51.689
80	89.20	54.193
90	94.01	56.509
100	100.00	58.567

11 Пропионитрил (1) – этилбензол (2) при 120°C [6]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
0	0	64.436
10	36.95	94.602
20	51.76	114.586
30	60.88	129.965
40	67.57	142.591
<u>50</u>	73.03	153.283
60	77.96	162.715
70	82.74	171.197
80	87.79	178.974
90	93.37	186.090
100	100.00	192.063

12 Диэтиловый эфир (1) – ацетон (2) при 20°C [4]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.41	0.98	185.9
2.10	7.84	196.8
6.42	20.90	221.3
6.83	21.68	222.8
11.17	31.29	247.6
<u>15.84</u>	40.89	271.6
33.38	59.51	334.0
38.79	63.89	351.2
54.30	72.83	387.0
75.10	83.32	420.7
87.29	90.41	435.9
94.80	95.57	441.8

13 Диэтиловый эфир (1) – ацетон (2) при 30°C [4]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
2.01	6.98	297.4
4.72	16.96	326.0
6.63	21.01	337.8
16.19	40.66	409.6
<u>29.53</u>	55.45	479.7
34.93	59.97	502.7
50.42	69.96	557.8
65.46	77.82	597.0
74.91	82.70	616.9
86.73	89.60	637.0
93.13	96.62	645.3

14 Ацетон (1) – этанол (2) при 40°C [4]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
2.50	14.35	152.2
5.00	24.60	168.5
7.50	32.05	183.3
10.00	37.95	197.4
15.00	47.00	223.3
<u>20.00</u>	53.80	244.9
25.00	59.00	263.9
30.00	63.10	280.6
40.00	69.40	309.0
50.00	74.70	334.0
60.00	79.50	355.5
70.00	84.30	375.1
80.00	89.30	393.0
90.00	94.50	409.4

15 Этанол (1) – бензол (2) при 40°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	183.8
2.0	14.5	208.4
9.5	28.0	239.8
20.4	33.2	249.1
37.8	36.2	252.3
49.0	38.4	248.8
59.2	40.5	245.7
70.2	44.0	237.3
80.2	50.7	219.4
88.0	60.5	196.3
94.3	74.7	169.5
98.7	91.2	145.6
100.0	100.0	134.4

16 Метилциклогексан (1) – толуол (2) при 80°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
9.77	15.68	313.67
9.85	15.72	313.87
20.18	29.18	333.30
20.20	29.10	333.08
30.05	39.70	348.57
40.22	49.12	361.81
49.65	57.40	372.27
59.90	65.90	381.68
69.95	74.12	389.92
70.02	74.20	390.42
79.76	82.05	395.85
90.05	90.90	401.27

17 Диметилформаид (1) – ацетон (2) при 40°C [5]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
3.1	0.1	54.69
9.6	0.3	51.17
15.4	0.5	47.87
19.3	0.6	45.73
29.2	1.0	40.53
34.0	1.2	38.20
36.0	1.3	36.87
37.6	1.4	35.89
46.1	1.9	32.60
46.8	1.9	32.11
52.1	2.3	29.39
56.0	2.6	27.13
62.9	3.4	23.43
64.0	3.5	22.75
<u>66.0</u>	3.8	21.33
71.2	4.7	18.52
78.1	6.6	14.64
84.5	9.6	11.70
85.8	10.5	9.99
86.6	11.2	9.59
88.4	12.9	8.24
91.9	18.2	6.24

18 Этанол (1) – бензол (2) при 50°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	271.6
2.5	16.5	314.7
8.9	30.0	358.7
20.6	36.0	378.3
38.5	39.2	384.6
48.6	41.1	383.2
58.6	43.4	378.1
69.4	47.0	366.9
79.0	52.6	344.4
86.6	61.0	316.8
93.6	74.5	276.8
98.4	90.9	239.6
100.0	100.0	222.6

19 Диметилформамид (1) – анилин (2) при 105°C [5]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
10.0	13.14	7.80
<u>18.0</u>	27.30	7.84
31.6	53.68	9.60
41.8	70.30	11.15
52.5	82.57	13.89
59.0	87.63	16.04
71.1	93.85	19.41
78.5	96.18	21.13
89.7	98.53	23.77

20 *o*-Ксилол (1) – метилцеллозольв (2) при 35°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
12.0	19.2	3.00
21.0	26.5	3.05
31.0	31.5	3.08
41.5	36.5	3.07
<u>50.0</u>	39.0	3.05
60.6	42.0	4.00
70.2	45.0	2.93
79.1	49.3	2.80
89.1	59.0	2.44

21 *o*-Ксилол (1) – этилцеллозольв (2) при 35°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
5.00	15.30	1.80
10.00	19.10	1.81
15.00	21.27	1.87
20.00	23.50	1.88
30.00	28.40	1.88
40.00	33.89	1.85
<u>50.00</u>	40.32	1.81
59.30	47.37	1.76
70.00	57.13	1.67
80.00	68.34	1.59
87.52	78.51	1.51
95.00	90.58	1.41

22 *o*-Ксилол (1) – диметилформамид (2) при 35°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
10	21.64	1.225
<u>20</u>	35.43	1.346
30	45.34	1.436
40	53.21	1.503
50	59.99	1.552
60	66.37	1.587
70	72.85	1.610
80	80.01	1.617
90	88.63	1.607

23 Диметиловый эфир диэтиленгликоля (1) – *o*-ксилол (2) при 35°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
10	19.75	0.713
<u>20</u>	36.37	0.796
30	50.23	0.883
40	61.74	0.976
50	71.30	1.071
60	79.25	1.169
70	85.87	1.269
80	91.41	1.370
90	96.07	1.471

24 Диметиловый эфир диэтиленгликоля (1) – *n*-октан (2) при 35°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
10	40.19	0.959
<u>20</u>	59.23	1.259
30	70.49	1.537
40	78.05	1.799
50	83.58	2.047
60	87.90	2.284
70	91.47	2.514
80	94.56	2.741
90	97.36	2.969

25 *o*-Ксилол (1) – н-октан (2) при 35°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
5.00	2.80	3.133
10.00	5.68	3.066
15.00	8.66	2.986
<u>20.00</u>	11.74	2.920
31.58	19.33	2.746
33.40	20.59	2.720
40.00	25.34	2.613
50.38	33.49	2.520
60.00	42.00	2.306
70.62	52.88	2.133
80.00	64.38	1.973
89.09	78.08	1.800
95.00	88.95	1.680

26 Этанол (1) – бензол (2) при 60°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	393.0
2.6	16.1	452.7
8.0	31.0	518.2
18.5	37.5	553.7
32.2	40.8	565.0
39.8	42.0	568.0
48.4	43.6	566.6
56.8	45.5	562.6
68.0	49.0	548.7
77.1	53.7	524.2
85.9	62.5	485.0
92.9	74.7	431.6
98.1	90.4	377.4
100.0	100.0	353.6

27 Фенол (1) – этиленгликоль(2) при 45°C [7]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , кПа
10	4.06	0.69
20	11.38	0.64
30	37.04	0.69
40	62.31	0.83
50	79.50	1.06
60	89.32	1.33
70	94.60	1.62
80	97.40	1.91
90	98.97	2.19
95	99.53	2.31

28 Этанол (1) – толуол (2) при 35°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	46.78
3.30	42.16	79.38
4.68	47.49	86.34
12.14	56.62	102.09
20.79	60.14	108.93
36.20	63.46	114.26
41.60	63.84	115.34
59.30	67.30	117.90
72.63	71.64	118.57
85.19	78.48	116.56
97.01	93.18	107.64
100.00	100.00	103.14

29 Этанол (1) – толуол (2) при 55°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.00	0.00	113.56
4.39	43.69	196.64
11.57	56.79	247.70
24.97	63.19	279.24
40.34	66.49	294.17
41.42	66.73	294.75
62.82	71.50	305.48
71.86	74.31	307.81
84.23	80.49	306.23
91.63	86.85	299.53
96.35	93.07	290.47
100.00	100.00	279.89

30 Бензол (1) – нитрометан (2) при 25°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	36.5
8.1	39.1	56.9
<u>22.4</u>	58.8	74.6
27.7	61.9	79.2
43.3	69.6	87.1
54.6	71.4	89.1
58.8	75.5	91.5
77.7	82.8	96.2
86.8	88.1	96.0
88.2	90.38	97.7
93.98	93.74	97.3
100.0	100.00	96.1

31 Бензол (1) – нитрометан (2) при 45°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
3.99	22.92	117.19
9.49	38.56	142.18
<u>18.98</u>	42.35	170.13
28.82	59.77	188.14
38.20	64.57	200.11
47.41	68.34	208.62
52.63	70.58	213.14
60.79	73.98	218.27
70.73	78.27	223.50
80.21	83.06	226.92
90.34	89.74	227.83
95.55	94.52	226.43

32 Метанол (1) – бензол (2) при 35°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
2.42	27.33	203.29
2.54	31.28	211.10
<u>13.02</u>	48.58	274.25
31.07	53.04	288.47
49.89	55.46	292.50
51.91	55.71	292.70
63.05	57.90	292.49
79.65	64.21	283.58
91.97	76.88	255.82

33 Метанол (1) – бензол (2) при 55°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
3.04	30.19	465.84
4.93	40.51	527.12
<u>10.31</u>	48.41	597.48
32.97	55.40	664.24
48.74	58.45	675.62
49.84	58.58	675.99
60.76	60.78	678.44
78.96	67.16	664.91
90.14	76.97	622.29

34 Бензол (1) – ацетонитрил (2) при 45°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
4.27	10.84	225.30
10.28	21.31	242.50
<u>18.55</u>	30.87	257.81
27.94	38.43	268.46
40.54	46.25	275.86
45.42	49.02	277.36
49.31	51.15	278.03
60.20	57.26	277.49
70.91	63.93	273.45
81.71	72.17	264.66
90.60	81.82	251.67
95.45	89.44	239.70

35 Уксусная кислота (1) – этилбензол (2) при 60°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	56.0
4.8	21.8	63.8
12.3	38.5	72.1
19.0	47.4	78.3
35.1	57.8	88.5
46.2	62.5	93.7
54.8	66.1	97.0
64.8	71.0	99.6
78.0	79.2	101.0
<u>79.4</u>	80.0	101.1
88.8	86.0	100.0
100.0	100.0	87.8

36 Бензол (1) – нитроэтан (2) при 25°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.0	0.0	21.85
5.7	32.7	29.7
<u>14.5</u>	55.4	40.8
22.4	64.2	49.7
42.5	77.7	63.6
47.7	80.9	68.0
56.6	84.4	73.6
70.1	89.8	81.9
87.0	95.18	89.1
93.12	96.24	92.9
100.0	100.0	96.1

37 Пентан (1) – ацетон (2) при 25°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.00	0.00	226.3
0.94	10.55	255.6
5.40	36.33	343.6
8.87	45.92	396.4
<u>16.00</u>	56.48	468.4
37.41	66.54	549.8
38.80	66.58	547.9
47.21	68.65	567.1
56.89	70.74	575.0
65.48	72.74	582.3
71.92	74.42	582.6
77.87	76.23	583.7
92.23	84.86	564.7
100.00	100.00	502.4

38 Ацетон (1) – бензол (2) при 25°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0.00	97.5
10	32.34	131.3
20	46.62	152.5
30	55.35	167.3
40	62.05	178.7
50	68.02	188.3
52.23	69.31	190.3
60	73.88	197.1
70	79.93	205.3
73.99	83.07	206.8
80	86.34	213.1
90	93.10	220.3
100	100.00	227.5

39 Ацетон (1) – бензол (2) при 35°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0.00	150.1
10	30.34	195.8
20	44.87	226.2
30	54.11	248.2
40	61.44	265.6
50	67.85	280.8
52.23	69.19	283.7
60	74.03	294.6
70	80.30	307.6
73.99	82.84	312.6
80	86.75	320.1
90	93.42	334.7
100	100.00	344.6

40 Гептан (1) – 1-бутанол (2) при 50°C [3]

X_1 , % мол.	Y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0.00	0.00	33.3
21.66	68.28	113.5
26.12	76.27	123.5
31.95	80.17	131.6
36.00	80.21	135.9
36.31	81.21	133.6
45.71	81.66	140.7
46.90	81.68	141.9
63.59	85.20	148.6
77.88	85.99	151.3
80.20	85.98	151.2
89.53	87.46	151.5
93.12	90.76	149.4
100.00	100.00	140.5

Таблица 2 – Константы уравнения Антуана для расчета давления насыщенного пара органических веществ

Брутто-формула	Соединение	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	$T_{мин} (K)$	$T_{макс} (K)$	Вид уравнения	Лит. источн.
CH_3NO_2	Нитрометан	16.2193	2972.64	-64.15	278	409	2	[9]
CH_4O	Метанол	18.5875	3626.55	-34.29	257	364	2	[9]
C_2H_3N	Ацетонитрил	16.2874	2945.47	-49.15	260	390	2	[9]
$C_2H_4O_2$	Уксусная кислота	16.8080	3405.57	-56.34	290	430	2	[9]
C_2H_6O	Этанол	18.9119	3803.98	-41.68	270	369	2	[9]
$C_2H_6O_2$	Этиленгликоль	8.863	2694.7	-	298	363	1	[8]
	«-«	20.2501	6022.18	-28.25	364	494	2	[9]
C_3H_6O	Ацетон	16.6513	2940.46	-35.93	241	350	2	[9]
C_3H_7NO	Диметилформамид	5.92904	1335.046	187.659	293	423	4	[5]
$C_3H_8O_2$	Метилцеллозольв	8.3077	2157	-	260	397	1	[8]
$C_4H_{10}O$	Диэтиловый эфир	16.0828	2511.29	-41.94	225	340	2	[9]
$C_4H_{10}O$	1-Бутанол	17.2160	3137.02	-94.43	288	404	2	[9]
$C_4H_{10}O_2$	Этилцеллозольв	8.416	2135	253	323	408	3	[8]
C_5H_{12}	Пентан	15.8333	2477.07	-39.94	220	330	2	[9]
$C_5H_{12}O_3$	Монометиловый эфир диэтиленгликоля	7.9685	2155.4	-	-	-	5	[10]
C_6H_6	Бензол	15.9008	2788.51	-52.36	280	377	2	[9]
C_6H_6O	Фенол	7.86819	2011.4	222	314	366	3	[8]

Продолжение таблицы 2

Брутто-формула	Соединение	A	B	C	$T_{мин} (K)$	$T_{макс} (K)$	Вид уравнения	Лит. источн.
C_6H_7N	Анилин	16.6748	3857.52	-73.15	340	500	2	[9]
$C_6H_{14}O_3$	Диметилловый эфир диэтиленгликоля	8.0837	2251.5	-	298	433	1	[8]
C_7H_8	Толуол	16.0137	3096.52	-53.67	280	410	2	[9]
C_7H_{14}	Метилциклогексан	15.7105	2926.04	-51.75	270	400	2	[9]
C_7H_{16}	Гептан	15.8737	2911.32	-56.51	270	400	2	[9]
C_8H_{10}	<i>o</i> -Ксилол	16.1156	3395.57	-59.46	305	445	2	[9]
C_8H_{10}	Этилбензол	16.0195	3279.47	-59.95	300	450	2	[9]
C_8H_{18}	Октан	15.9426	3120.29	-63.63	292	425	2	[9]

Вид уравнения Антуана:

$$1) \lg P^o = A - \frac{B}{T} \quad P^o, \text{мм рт. ст. } T, K; \quad 2) \ln P^o = A - \frac{B}{C+T} \quad P^o, \text{мм рт. ст. } T, K$$

$$3) \lg P^o = A - \frac{B}{C+t} \quad P^o, \text{мм рт. ст. } t, ^\circ\text{C}; \quad 4) \lg \frac{P^o}{\text{кПа}} = A - \frac{B}{C + t/^\circ\text{C}}$$

$$5) \lg P^o = A - \frac{B}{t+230} \quad P^o, \text{мм рт. ст. } t, ^\circ\text{C}$$

Зависимость давления насыщенного пара 1-пентанола от температуры в интервале 273.15 – 323.15 К аппроксимируется уравнением [11].

$$\ln P^o (\text{мм рт.ст.}) = \frac{C_1}{T} + C_2 + C_3 \cdot T + C_4 \cdot T^2 \quad (T, K); \quad C_1 = -18309.21; \quad C_2 = 136.7769; \quad C_3 = -0.3685108; \quad C_4 = 0.0003979036.$$

Пример 1.

Моделирование коэффициентов активности компонентов системы бензол – диметилсульфоксид

Провести проверку термодинамической согласованности экспериментальных данных о равновесии жидкость – пар для системы бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при температуре 55°C методом Редлиха – Кистера. Рассчитать константы уравнений Редлиха – Кистера, Маргулеса, ван Лаара, приведенные параметры уравнения Вильсона. Определить, какое уравнение лучше всего использовать для аппроксимации данных, построив зависимости $\ln \gamma_1 = f(x_1)$ и $\ln \gamma_2 = f(x_1)$ по экспериментальным и расчетным значениям γ_i . Рассчитать коэффициенты активности компонентов при $x_1 = 40$ % мол. методом UNIFAC.

Экспериментальные данные о составах равновесных фаз и общем давлении для системы бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при температуре 55°C:

Таблица 3 – Составы равновесных фаз для системы бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при общем давлении P температуре 55°C:

x_1 , % мол.	y_1 , % мол.	P , мм рт.ст.
0	0	4.102
10	95.60	84.8
20	97.55	140.0
30	98.27	181.85
40	98.61	211.2
50	98.87	235.4
60	99.05	255.4
70	99.21	272.1
80	99.36	279.9
90	99.57	305.4
100	100.00	326.7

Решение.

В связи с невысоким общим давлением в системе при заданной температуре и отсутствием сильной ассоциации компонентов в паровой фазе считаем последнюю идеальной, подчиняющейся закону Дальтона. При этом допущении расчет коэффициентов активности компонентов возможен по уравнению:

$$\gamma_1 = \frac{P \cdot y_1}{P_1^o \cdot x_1} ; \quad \gamma_2 = \frac{P \cdot (1 - y_1)}{P_2^o \cdot (1 - x_1)},$$

где x_1, y_1 – мольные доли бензола в жидкой и паровой фазе.

При $x_1 = 0$ общее давление соответствует давлению насыщенного пара второго компонента, а при $x_1 = 100$ % мол. – давлению насыщенного пара первого компонента. Таким образом, при 55°C $P_2^o = 4.102$ мм рт.ст., а $P_1^o = 326.7$ мм рт.ст.

Результаты расчетов значений γ_i и связанных с ними величин, которые необходимы для выполнения первой части задания – проверки термодинамической согласованности равновесных данных методом Редлиха – Кистера, приведены в табл. 4.

Таблица 4 – Коэффициенты активности компонентов, рассчитанные по экспериментальным данным

x_1 , мол. д.	γ_1	γ_2	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$	$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$
0.1	2.482	1.011	0.909	0.011	0.898
0.2	2.090	1.045	0.737	0.044	0.693
0.3	1.823	1.096	0.601	0.092	0.509
0.4	1.594	1.193	0.466	0.177	0.289
0.5	1.425	1.297	0.354	0.260	0.094
0.6	1.291	1.479	0.256	0.391	-0.135
0.7	1.181	1.747	0.166	0.558	-0.392
0.8	1.064	2.184	0.062	0.781	-0.719
0.9	1.034	3.202	0.034	1.164	-1.130

Зависимости $\ln \gamma_1, \ln \gamma_2$ и $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ от x_1 представлены на рис. 1.

Экстраполяцией кривой $\ln \gamma_1 = f(x_1)$ находят при $x_1 = 0$ $\ln \gamma_1^o = 1.15$ и $\gamma_1^o = 3.158$, а экстраполяцией зависимости $\ln \gamma_2 = f(x_1)$ при $x_1 = 1$ определяют $\ln \gamma_2^o = 1.94$ и $\gamma_2^o = 6.959$.

В соответствии с методом Редлиха – Кистера условие термодинамической согласованности равновесных данных выражается уравнением (33) [1].

Площадь под интегральной кривой в положительной области $S_1 = 0,315$, а в отрицательной области $S_2 = 0,312$.

Площади S_1 и S_2 различаются на 0.95 %, что свидетельствует о корректности полученных экспериментальных данных о равновесии жидкость – пар.

Рассчитаем константы уравнения Редлиха – Кистера (37) [1].

При $x_1 = x_2 = 0.5$ из табл. 4 значение $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = 0.094$ и уравнение (37) упрощается до уравнения с одной константой C : $0.094 = C \cdot (6 \cdot 0.5 \cdot 0.5 - 1)$; $C = 0.188$

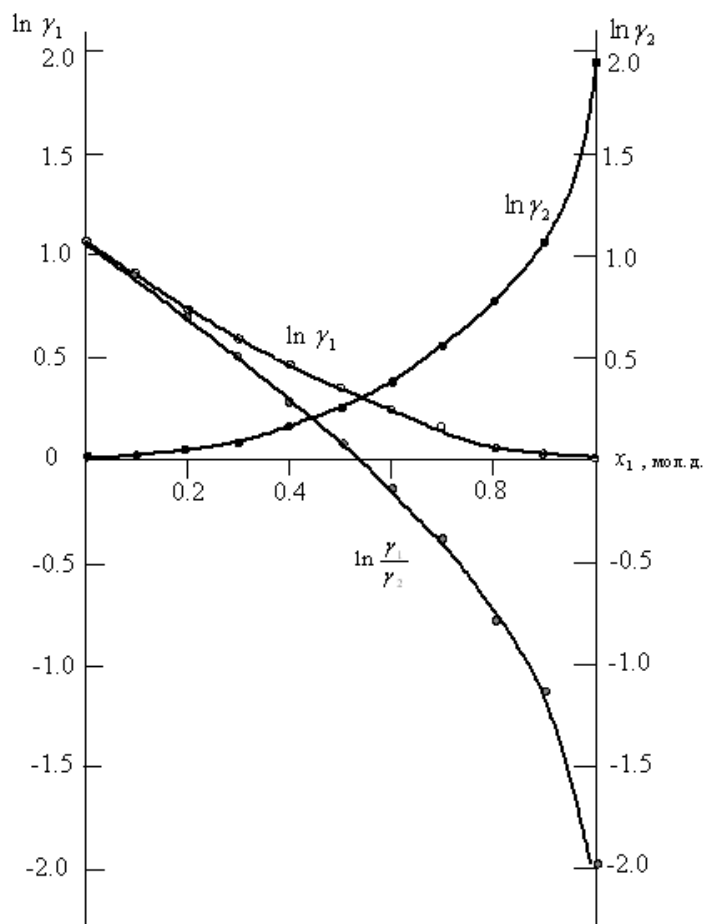


Рис. 1. Зависимость коэффициентов активности компонентов системы

бензол (1) – диметилсульфоксид (2) и $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ от состава системы

При $x_1 = 0.1464$ третье слагаемое в правой части уравнения (37) обращается в 0; из рис. 1 при этом составе раствора $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = 0.81$ и можно найти константу B :

$$0.81 = B \cdot (0.8536 - 0.1464) + 0.188 \cdot (6 \cdot 0.1464 \cdot 0.8536 - 1); \quad B = 1.212$$

При $x_1 = 0.2113$ значение $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = 0.66$ и из уравнения (37) можно рассчитать константу D :

$$0.66 = 1.212 \cdot (0.7887 - 0.2113) + D \cdot (0.7887 - 0.2113) \cdot (1 - 8 \cdot 0.2113 \cdot 0.7887);$$

$$D = 0.207$$

С использованием найденных констант B , C и D по уравнениям (35) и (36) [1] рассчитывают значения $\ln \gamma_1$ и $\ln \gamma_2$ (табл. 5).

Таблица 5 – Значения $\ln \gamma_i$, рассчитанные по эмпирическим уравнениям

x_1 , мол.д.	Редлих – Кистер		Маргулес		ван Лаар	
	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$
0.1	0.944	0.015	0.924	0.0077	0.939	0.0075
0.2	0.736	0.051	0.777	0.034	0.800	0.032
0.3	0.580	0.102	0.631	0.083	0.660	0.079
0.4	0.456	0.169	0.490	0.159	0.486	0.152
0.5	0.350	0.256	0.359	0.267	0.396	0.258
0.6	0.253	0.375	0.241	0.411	0.277	0.405
0.7	0.163	0.543	0.142	0.595	0.170	0.603
0.8	0.084	0.784	0.066	0.824	0.083	0.866
0.9	0.024	1.127	0.017	1.103	0.023	1.211

Для расчета констант уравнения Маргулеса с использованием линейного уравнения (40) [1] находят значения избыточной энергии Гиббса по уравнению (14) [1], например, при $x_1 = 0.1$:

$$G^E = 8.314 \cdot 328.15 \cdot (0.1 \cdot 0.909 + 0.9 \cdot 0.011) = 275 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}$$

Значения G^E и $\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_2}$ приведены в табл. 6.

Последние две точки табл. 6 отклоняются от линейной зависимости, представленной на рис. I-2. С учетом остальных точек строится прямая, отсекающая на оси ординат в соответствии с уравнением (48) отрезок, соответствующий константе $B = 1.435$.

Тангенс угла наклона прямой $\text{tg } \alpha = -0,367$.

Таблица 6 – Значения избыточной энергии Гиббса и функции $\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_2}$

x_1 , мол.д.	G^E , Дж·моль ⁻¹	$\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_2}$	x_1 , мол.д.	G^E , Дж·моль ⁻¹	$\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_2}$
0.1	275	1.120	0.6	846	1.292
0.2	498	1.141	0.7	774	1.350
0.3	668	1.165	0.8	562	1.286
0.4	797	1.219	0.9	401	1.633
0.5	838	1.228			

Зависимость функции $\frac{G^E}{RT \cdot x_1 \cdot x_2}$ от x_2 представлена на рис. 2.

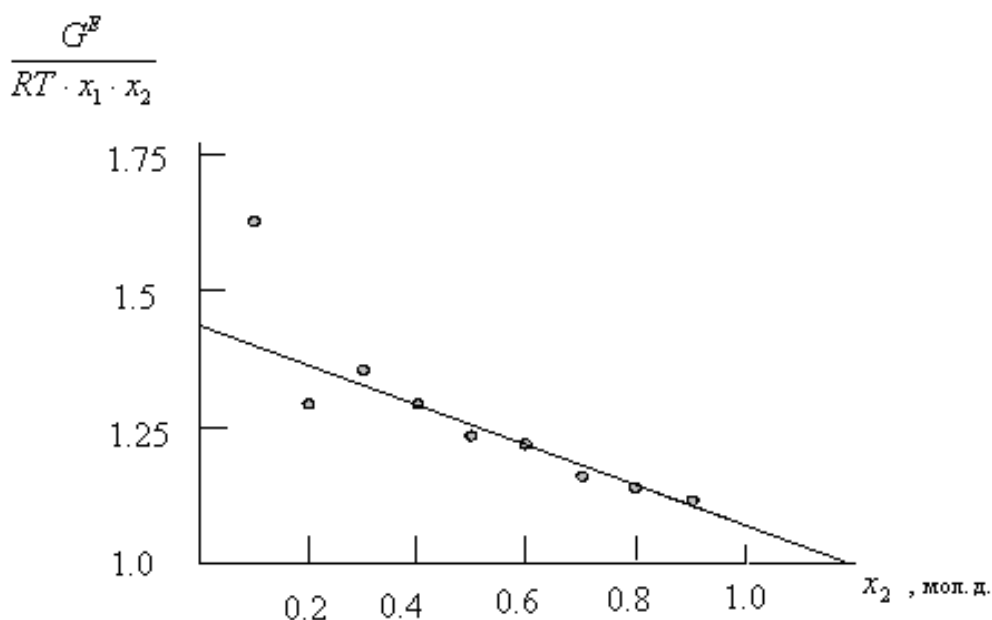


Рис. 2. Линейная зависимость (40) для расчета констант уравнения Маргулеса

В соответствии с уравнением (40) [1]

$$\operatorname{tg} \alpha = A - B, \text{ следовательно, } A = 1.435 - 0,367 = 1.068.$$

Далее с использованием уравнений Маргулеса (38) и (39) [1] рассчитывают значения $\ln \gamma_1$ и $\ln \gamma_2$, приведенные в табл. 5.

Для определения констант уравнения ван Лаара рассчитывают значения $\sqrt{\ln \gamma_1}$ и $\sqrt{\ln \gamma_2}$ (табл. 7).

Таблица 7 – Значения $\sqrt{\ln \gamma_1}$ и $\sqrt{\ln \gamma_2}$

x_1 , мол.д.	$\sqrt{\ln \gamma_1}$	$\sqrt{\ln \gamma_2}$	x_1 , мол.д.	$\sqrt{\ln \gamma_1}$	$\sqrt{\ln \gamma_2}$
0.1	0.954	0.105	0.6	0.506	0.625
0.2	0.859	0.210	0.7	0.408	0.747
0.3	0.775	0.303	0.8	0.249	0.884
0.4	0.683	0.421	0.9	0.184	1.079
0.5	0.595	0.510			

Константы уравнения ван Лаара находят в соответствии с линейной зависимостью (52), представленной на рис. 3.

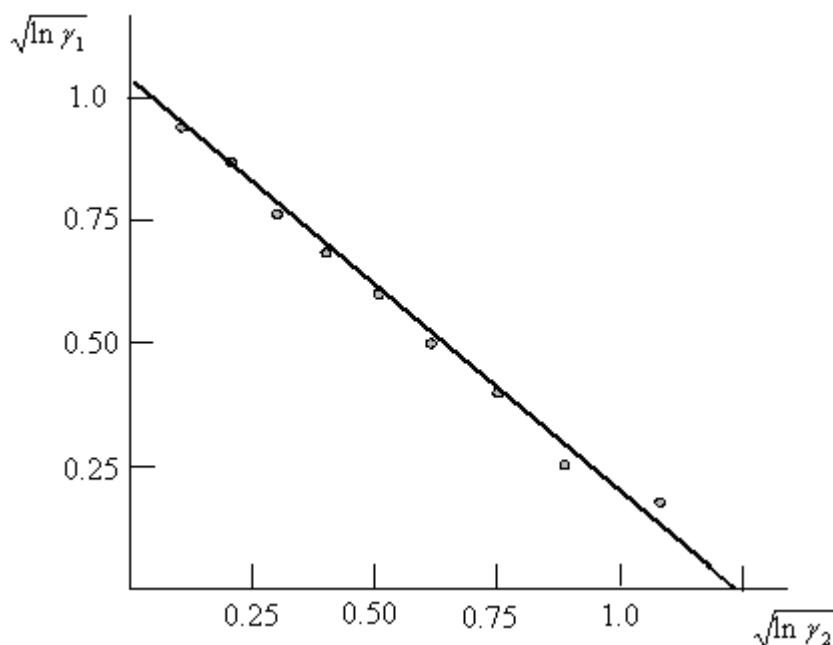


Рис. 3. Линейная зависимость для определения констант уравнения ван Лаара

Отрезок, отсекаемый прямой на оси ординат, соответствует $\sqrt{A} = 1.04$, откуда $A = 1.08$.

$$\text{Тангенс угла наклона прямой } \operatorname{tg} \alpha = \frac{1.04}{-1.29} = -0.806;$$

$$-\sqrt{\frac{A}{B}} = -0.806; \quad \frac{A}{B} = 0.650; \quad B = 1.66$$

Далее с использованием уравнений ван Лаара (42) и (43) [1] рассчитывают значения $\ln \gamma_1$ и $\ln \gamma_2$ (табл. 5).

С использованием номограммы (рис. 4 [12]) и предельных коэффициентов активности компонентов находят ориентировочные значения приведенных параметров уравнения Вильсона: $\Lambda_{12} = 0.72$ и $\Lambda_{21} = 0.19$.

С помощью уравнения (50) [1] рассчитывают уточненные значения приведенных параметров: $\Lambda_{12} = 0.7104$ и $\Lambda_{21} = 0.1920$.

Далее по уравнениям (45) – (47) [1] находят значения β и $\ln \gamma_i$ (табл. 8).

Таблица 8 – Коэффициенты активности компонентов, рассчитанные по методу Вильсона

x_1 , мол.д.	β	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$	x_1 , мол.д.	β	$\ln \gamma_1$	$\ln \gamma_2$
0.1	0.7520	0.979	0.009	0.6	0.4308	0.295	0.405
0.2	0.6956	0.820	0.037	0.7	0.3360	0.192	0.599
0.3	0.6376	0.673	0.086	0.8	0.2111	0.102	0.871
0.4	0.5761	0.537	0.160	0.9	0.0278	0.032	1.274
0.5	0.5085	0.411	0.263				

Как следует из рис. 5, для математического описания зависимости коэффициентов активности компонентов системы бензол – диметилсульфоксид лучше всего использовать уравнение Редлиха – Кистера.

Расчет коэффициентов активности компонентов системы бензол (1) – диметилсульфоксид (2) при $x_1 = 0.4$ и температуре 55°C (328.15 К) методом UNIFAC.

Молекула бензола представляется в виде 6 групп ACH , а молекула диметилсульфоксида – как одна группа Me_2SO . Параметры объема R_k и поверхности групп Q_k приведены в табл. 9.

Таблица 9 – Параметры объема и поверхности групп ACH и Me_2SO [12] (Приложение I)

N группы	Группа	R_k	Q_k	Количество групп в молекуле	
				Бензол	Диметил- сульфоксид
1	ACH	0.5313	0.400	6	0
2	Me_2SO	2.8266	2.472	0	1

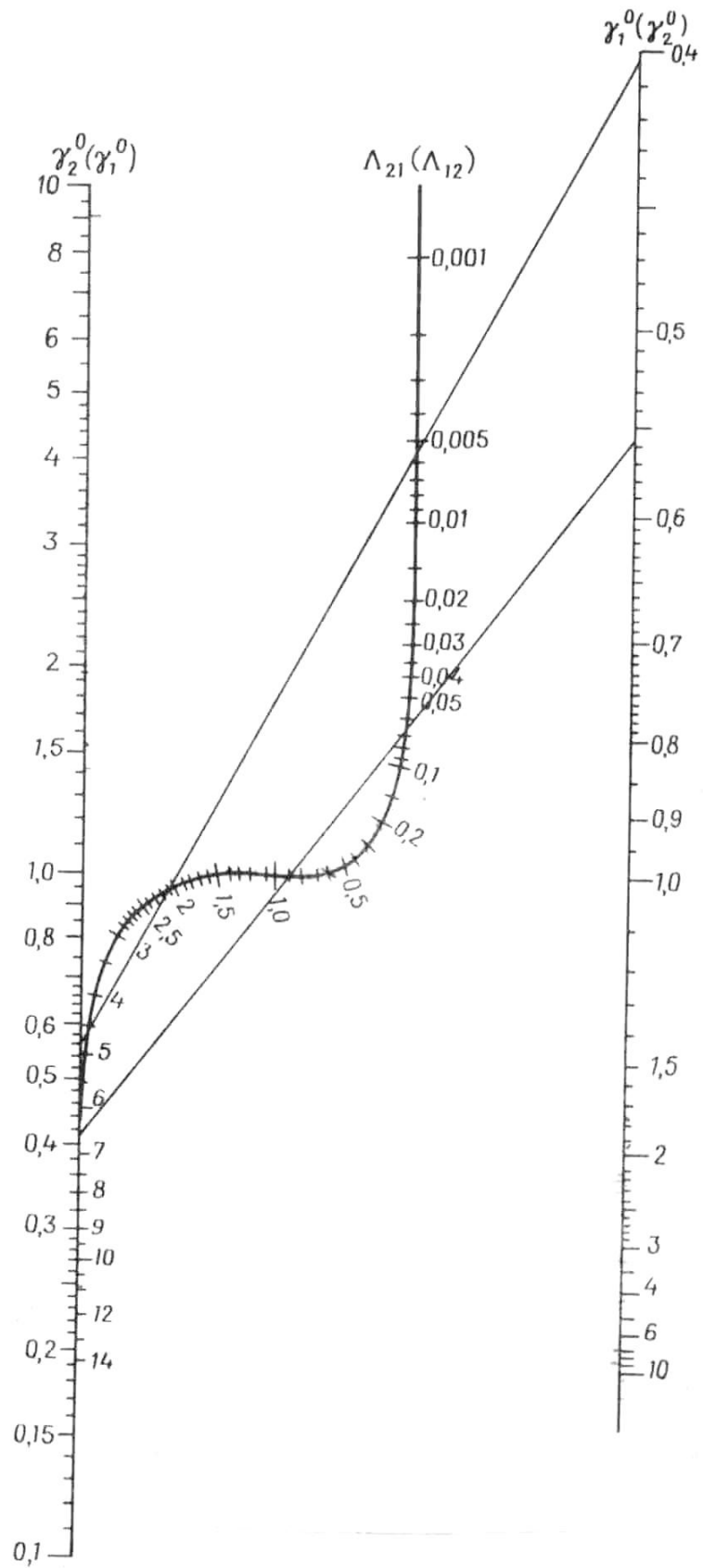


Рис. 4. Номограмма для определения приведенных параметров уравнения Вильсона.

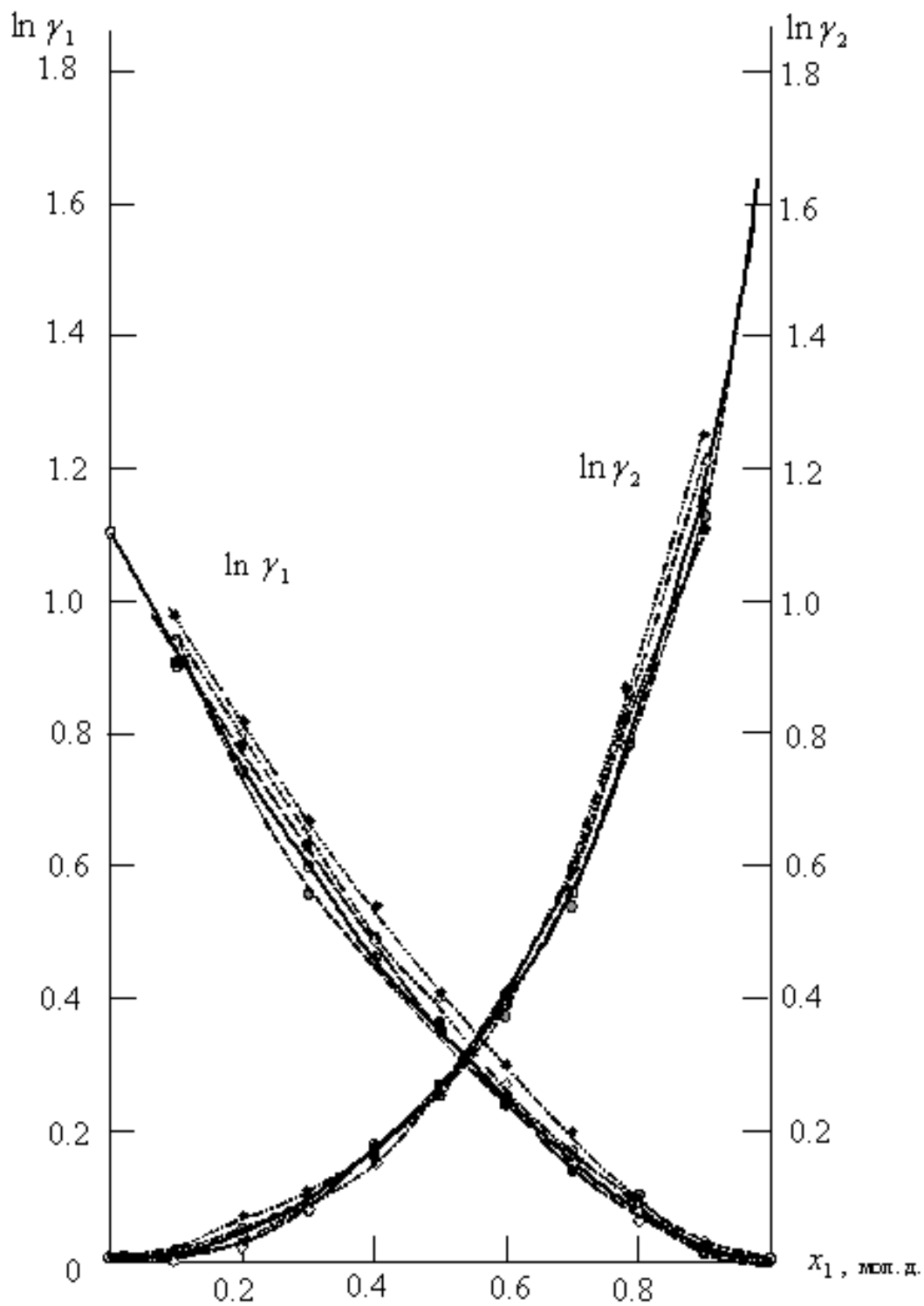
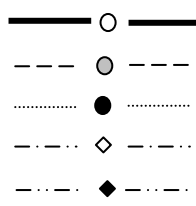


Рис. 5. Зависимость γ_i компонентов системы бензол – диметилсульфоксид от состава при 55°C

Экспериментальные данные
уравнение Редлиха-Кистера
уравнение Маргулеса
уравнение ван Лаара
уравнение Вильсона



Параметры взаимодействия групп: $a_{12}=169.9$; $a_{21}=-2.504$ (Приложение II).

Приведенные параметры группового взаимодействия, рассчитанные по уравнению (90) [1]:

$$\psi_{12} = \exp\left(\frac{-169.9}{328.15}\right) = 0.59586; \quad \psi_{21} = \exp\left(\frac{2.504}{328.15}\right) = 1.0077$$

Ван-дер-ваальсовы радиусы молекул компонентов:

$$r_1 = 6 \cdot 0.5313 = 3.1878; \quad r_2 = 1 \cdot 2.8266 = 2.8266$$

Ван-дер-ваальсовы поверхности молекул компонентов:

$$q_1 = 6 \cdot 0.4 = 2.4; \quad q_2 = 1 \cdot 2.472 = 2.472$$

Объемная доля компонентов в растворе, рассчитанная по уравнению (59) [1]:

$$\phi_1 = \frac{0.4 \cdot 3.1878}{0.4 \cdot 3.1878 + 0.6 \cdot 2.8266} = 0.429; \quad \phi_2 = 1 - 0.429 = 0.571$$

Доля площади поверхности молекул компонентов в растворе, рассчитанная по уравнению (58) [1]:

$$\theta_1 = \frac{0.4 \cdot 2.4}{0.4 \cdot 2.4 + 0.6 \cdot 2.472} = 0.3929; \quad \theta_2 = 1 - 0.3929 = 0.6071$$

Факторы объемности молекул компонентов, рассчитанные по уравнению (57) [1]:

$$l_1 = \frac{10}{2}(3.1878 - 2.4) - (3.1878 - 1) = 1.7512$$

$$l_2 = \frac{10}{2}(2.8266 - 2.472) - (2.8266 - 1) = -0.0536$$

Далее по уравнениям (53) и (55) [1] рассчитывают комбинаторные составляющие коэффициентов активности компонентов:

$$\ln \gamma_{1(\text{комб})} = \ln \frac{0.429}{0.4} + 5 \cdot 2.4 \cdot \ln \frac{0.3929}{0.429} + 0.571 \left(1.7512 - \frac{3.1878}{2.8266} \cdot (-0.0536) \right) = 0.0497$$

$$\ln \gamma_{2(\text{комб})} = \ln \frac{0.571}{0.6} + 5 \cdot 2.472 \cdot \ln \frac{0.6071}{0.571} + 0.429 \left(-0.0536 - \frac{2.8266}{3.1878} \cdot 1.7512 \right) = 0.019$$

Групповые доли групп в растворе при $x_1 = 0.4$, рассчитанные по уравнению (71) [1]:

$$\bar{x}_1 = \frac{6 \cdot 0.4}{6 \cdot 0.4 + 1 \cdot 0.6} = 0.8; \quad \bar{x}_2 = \frac{1 \cdot 0.6}{1 \cdot 0.6 + 6 \cdot 0.4} = 0.2$$

Доля площади поверхности групп в растворе рассчитывается по уравнению (73) [1]:

$$\theta_1 = \frac{0.8 \cdot 0.4}{0.8 \cdot 0.4 + 0.2 \cdot 2.7472} = 0.368; \quad \theta_2 = \frac{0.2 \cdot 2.7472}{0.8 \cdot 0.4 + 0.2 \cdot 2.7472} = 0.632$$

Молекула бензола состоит только из групп *АСН*, поэтому для чистого бензола $\theta_1 = 1$; аналогично для чистого диметилсульфоксида $\theta_2 = 1$ (табл. 10).

Таблица 10 – Доля площади поверхности групп в растворе и в чистых компонентах

Параметр	Раствор	Бензол	Диметилсульфоксид
θ_1	0.368	1	-
θ_2	0.632	-	1

Средневзвешенные параметры взаимодействия групп рассчитывают по уравнению (92) [1] (табл. 11):

$$E_1 = 0.368 \cdot 1 + 0.632 \cdot 1.0077 = 1.0049; \quad E_2 = 0.368 \cdot 0.59586 + 0.632 \cdot 1 = 0.8513$$

Таблица 11 – Средневзвешенные параметры взаимодействия групп в растворе и для чистых компонентов

Параметр	Раствор	Бензол	Диметилсульфоксид
E_1	1.0049	1	-
E_2	0.8513	-	1

Значения дополнительной функции F_k рассчитывают по уравнению (75) [1] и приводят для раствора и чистых компонентов в табл. 12:

$$F_1 = \frac{0.368 \cdot 1}{1.0049} + \frac{0.632 \cdot 0.59586}{0.8512} = 0.8084; \quad F_2 = \frac{0.368 \cdot 1.0077}{1.0049} + \frac{0.632 \cdot 1}{0.8512} = 1.1115$$

Таблица 12 – Дополнительные функции групп в растворе и для чистых компонентов

Параметр	Раствор	Бензол	Диметилсульфоксид
F_1	0.8084	1	-
F_2	1.1115	-	1

Коэффициенты активности групп в растворе рассчитываются по уравнению (76) и в чистых компонентах – по уравнению (77) [1]:

$$\ln \Gamma_1 = 0.4 \cdot (1 - \ln 1.0049 - 0.8084) = 0.0747$$

$$\ln \Gamma_2 = 2.472 \cdot (1 - \ln 0.8513 - 1.1115) = 0.1224$$

$$\ln \Gamma_1^1 = 0.4 \cdot (1 - \ln 1 - 1) = 0$$

$$\ln \Gamma_2^1 = 2.472 \cdot (1 - \ln 1 - 1) = 0$$

Далее рассчитывают коэффициенты активности компонентов с учетом комбинаторной и остаточной составляющих по уравнениям (52) и (70) [1]:

$$\ln \gamma_1 = 0.0497 + 6 \cdot (0.0747 - 0) = 0.4978;$$

$$\ln \gamma_2 = 0.019 + 1 \cdot (0.1224 - 0) = 0.1414$$

$$\gamma_1 = 1.645 ; \gamma_2 = 1.152$$

Погрешность расчета γ_1 и γ_2 методом UNIFAC составляет при $x_1 = 0.4$ 3.2 % и 3.4 % соответственно.

Приложение I. Параметры объема и площади поверхности групп уравнения UNIFAC
для расчета парожидкостного равновесия[12]

Основная группа*	Подгруппа	R_k	Q_k		
1 "CH ₂ "	CH ₃	0.9011	0.848	Гептан:	2 CH ₃ , 5 CH ₂
	CH ₂	0.6744	0.540		
3 "ACH"	ACH	0.5313	0.400	Бензол:	6 ACH
4 "ACCH ₂ "	ACCH ₃	1.2663	0.963	Толуол:	5 ACH, 1 ACCH ₃
	ACCH ₂	1.0396	0.660	Этилбензол:	1 CH ₃ , 5 ACH, 1 ACCH ₂
5 "OH"	OH	1.000	1.200	1-Бутанол:	1 OH, 3 CH ₂ , CH ₃
6 "CH ₃ OH"	CH ₃ OH	1.4311	1.432	Метанол:	1 CH ₃ OH
8 "ACOH"	ACOH	0.8952	0.680	Фенол:	5 ACH, 1 ACOH
9 "CH ₂ CO"	CH ₃ CO	1.6724	1.488	Ацетон:	1 CH ₃ , 1 CH ₃ CO
13 "CH ₂ O"	CH ₃ O	1.1450	1.088	Диметиловый эфир:	1 CH ₃ , 1 CH ₃ O
	CH ₂ O	0.9183	0.780	Диэтиловый эфир:	2 CH ₃ , 1 CH ₂ , 1 CH ₂ O
17 "ACNH ₂ "	ACNH ₂	1.0600	0.816	Анилин:	5 ACH, 1 ACNH ₂
19 "CCN"	CH ₃ CN	1.8701	1.724	Ацетонитрил:	1 CH ₃ CN
	CH ₂ CN	1.6434	1.416	Пропионитрил:	1 CH ₃ , 1 CH ₂ CN
20 "COOH"	COOH	1.3013	1.224	Уксусная кислота:	1 CH ₃ , 1 COOH
26 "CNO ₂ "	CH ₃ NO ₂	2.0086	1.868	Нитрометан:	1 CH ₃ NO ₂
	CH ₂ NO ₂	1.7818	1.560	Нитроэтан:	1 CH ₃ , 1 CH ₂ NO ₂
35 "Me ₂ SO"	Me ₂ SO	2.8266	2.472	Диметилсульфоксид:	1 Me ₂ SO
39 "DMF"	DMF	3.0856	2.736	Диметилформамид:	1 DMF

* Номер основных групп соответствует номерам, приведенным в монографии [12]

Приложение II . Параметры взаимодействия уравнения UNIFAC для расчета парожидкостного равновесия [12]

Основная группа*	1	3	4	5	6	8	9	13	17	19	20	26	35	39
1CH ₂	0.0	61.13	76.50	986.5	697.2	1333.0	476.4	251.5	1245.0	597.0	663.5	661.5	526.5	485.3
3ACH	-11.12	0.0	167.0	636.1	637.2	1329.0	25.77	32.14	668.2	212.5	537.4	168.0	169.9	245.6
4ACCH ₂	-69.70	-146.8	0.0	803.2	603.2	884.9	-52.10	213.1	764.7	6096.0	603.8	3629.0	4284.0	5629.0
5OH	156.4	89.60	25.82	0.0	-137.1	-259.7	84.00	28.06	-348.2	6.712	199.0	61.11	-202.1	-143.9
6CH ₃ OH	16.51	-50.00	-44.50	249.1	0.0	-101.7	23.39	-180.6	335.5	36.23	-289.5	75.14	-399.3	-172.4
8ACOH	275.8	25.34	244.2	-451.6	-265.2	0.0	-356.1	-	-	-	-	-	-	-
9CH ₂ CO	26.76	140.1	365.8	164.5	108.7	-133.1	0.0	5.202	937.9	481.7	669.4	137.5	-44.58	-61.70
13CH ₂ O	83.36	52.13	65.69	237.7	339.7	-	52.38	0.0	-	-	664.6	95.18	172.1	254.8
17ACNH ₂	5339.0	650.4	979.8	529.0	5.182	-	-399.1	-	0.0	-216.8	-	-	-	-293.1
19CCN	24.82	-22.97	-138.4	185.4	157.8	-	-287.5	-	617.1	0.0	-	-	-	-
20COOH	315.3	62.32	268.2	-151.0	1020.0	-	-297.8	-338.5	-	-	0.0	-	-	-
26CNO ₂	-32.69	10.38	-97.05	341.7	252.6	-	-142.6	-94.49	-	-	-	0.0	-	-
35Me ₂ SO	50.49	-2.504	-143.2	-25.87	695.0	-	110.4	-122.1	-	-	-	-	0.0	-97.71
39DMF	-31.95	-133.9	-240.2	64.16	172.2	-	97.04	-158.2	335.6	-	-	-	136.6	0.0

Контрольная работа N2

С использованием представленных в таблице 13 экспериментальных данных для указанной системы провести следующие построения и расчеты:

- с использованием составов экстракционной и рафинатной фаз рассчитать коэффициенты распределения компонентов и коэффициенты разделения;
- построить диаграмму фазового равновесия жидкость – жидкость;
- провести проверку корректности данных о равновесии жидкость – жидкость методами Отмера – Тобиаса и Хэнда;
- определить состав критической точки тройной системы;
- определить максимальную концентрацию компонента (2) в экстракте, к которой можно приблизиться при многоступенчатой экстракции;
- определить число теоретических ступеней противоточной экстракции, необходимое для снижения содержания компонента (2) с 40 % мас. в сырье до 2 % мас. в рафинате при массовом соотношении экстрагента к сырью 2:1 (использовать графический метод Хантера – Наша).

Таблица 13 – ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ О РАВНОВЕСИИ
ЖИДКОСТЬ – ЖИДКОСТЬ В ТРОЙНЫХ СИСТЕМАХ
НАСЫЩЕННЫЙ УГЛЕВОДОРОД (1) – АРЕН (ИЛИ
ГЕТЕРОАТОМОЕ СОЕДИНЕНИЕ) (2)–ЭКСТРАГЕНТ (3),
% мас.

Экстракционная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
1 <i>n</i> -Пентан (1) – бензол (2) – сульфолан (3) (25°C)			
1.10	4.79	89.78	9.29
1.12	9.72	80.50	18.36
1.78	15.83	67.92	29.98
2.06	21.48	61.03	36.50
2.13	23.04	57.90	38.60
2.50	29.01	47.22	47.50
2.91	32.40	40.90	52.69
4.18	39.50	31.67	57.12
2 <i>n</i> -Пентан (1) – бензол (2) – сульфолан (3) (50°C)			
1.28	5.05	88.64	10.50
1.22	9.45	79.24	19.32
1.55	16.04	67.67	28.88
2.26	20.10	60.74	35.46
2.65	23.26	55.79	38.67
2.65	30.37	46.04	47.92
3.21	34.04	38.82	52.74
4.08	39.70	29.88	56.02

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
3 Циклогексан (1) – бензол (2) – сульфолан (3) (100°C)			
6.8	1.1	93.9	3.5
8.0	4.1	87.4	9.4
9.3	7.8	80.8	14.9
11.3	11.9	71.2	21.3
14.2	16.6	61.0	26.1
17.1	20.2	50.2	28.5
20.4	23.1	36.3	28.5
4 Гексан (1) – бензол (2) – сульфолан (3) (100°C)			
2.9	2.8	92.1	6.5
3.3	6.1	83.9	14.2
3.7	10.3	78.6	18.8
3.8	11.0	77.1	20.2
4.5	15.7	69.0	27.4
6.0	21.2	57.5	35.8
7.6	25.5	49.6	39.9
8.8	27.4	48.1	40.4
11.2	31.0	35.6	41.7
15.8	34.6	32.2	41.5
5 Гептан (1) – толуол (2) – сульфолан (3) (100°C)			
3.0	3.5	87.9	10.5
3.2	6.7	80.3	17.8
3.9	10.5	70.4	25.4
4.3	14.3	61.7	32.5
5.3	18.5	54.6	37.9
6.7	23.5	44.7	42.8
9.6	30.3	33.2	45.2
6 Гептан (1) – толуол (2) – сульфолан (3) (30°C)			
8.8	46.0	18.8	59.2
3.9	34.3	29.6	59.4
3.1	28.6	34.7	57.2
3.0	28.2	35.7	56.9
2.7	26.5	39.7	54.8
1.5	15.7	57.3	40.3
1.6	14.6	59.1	38.3
1.5	14.4	61.5	36.5
1.4	12.4	65.2	33.4
1.2	11.0	67.7	30.4
1.1	8.5	75.3	23.4
0.8	2.5	92.0	7.4

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
7. Гептан (1) – толуол (2) – сульфолан с 2 % мас. воды (3) (30°C)			
4.7	43.6	14.3	63.3
3.4	36.6	20.1	64.5
2.0	26.9	35.2	59.7
1.0	15.9	51.8	45.8
0.9	14.5	55.3	42.7
0.9	9.4	73.0	26.1
0.4	2.0	93.4	6.4
8 Гептан (1) – толуол (2) – триэтиленгликоль (ТЭГ) с 8 % мас. воды (3) (150°C)			
1.1	0.7	89.8	5.9
1.1	1.7	82.1	13.6
1.1	3.0	73.6	22.1
1.1	4.3	65.1	29.6
1.1	5.5	56.6	37.4
1.1	8.3	43.8	49.2
1.1	11.4	31.8	58.4
0.9	14.2	20.8	66.4
0.7	19.8	9.1	66.6
9 Гептан (1) – толуол (2) – смешанный экстрагент ТЭГ – сульфолан – вода состава 38.4:57.5:4.1 % мас. (3) (50°C)			
0.80	2.92	87.50	11.50
1.24	6.57	76.52	21.88
1.50	12.20	64.70	33.30
1.80	16.80	56.20	41.30
2.0	23.42	44.86	49.94
2.58	31.20	33.0	59.50
3.80	41.50	21.27	63.23
10 <i>n</i> -Тетрадекан – 2-метилнафталин (2) – ацетонитрил (3) (30°C)			
3.0	10.6	86.6	10.4
3.1	15.5	80.3	16.0
3.5	19.6	74.0	21.1
8.5	36.5	54.5	36.6
10.2	40.0	48.6	40.4

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
11 <i>n</i> -Тетрадекан (1) – 2-метилнафталин (2) – растворитель (этиленгликоль – ацетонитрил 42/58 % мас.) (3) (30°C)			
0.6	6.5	84.3	13.5
1.0	9.2	67.0	28.9
0.5	10.3	45.5	45.5
0.5	10.5	42.8	46.9
0.5	14.5	21.2	57.5
12 <i>n</i> -Тетрадекан (1) – <i>n</i> -амилбензол (2) – растворитель (этиленгликоль – ацетонитрил 18.8/81.2 % мас.) (3) (30°C)			
2.0	3.8	81.8	15.9
2.0	7.0	65.5	30.7
2.0	10.8	51.0	43.1
2.0	15.7	40.1	52.5
2.0	16.7	30.0	59.3
2.0	22.2	17.5	66.4
2.0	17.9	13.1	66.9
13 <i>n</i> -Тетрадекан (1) – тетралин (2) – растворитель (этиленгликоль – ацетонитрил 18.8/81.2 % мас.) (3) (30°C)			
0.5	3.0	91.5	5.9
0.5	4.0	82.8	14.9
0.5	5.0	77.6	19.5
0.5	6.5	66.9	29.7
0.4	7.5	49.5	45.0
0.3	7.5	27.1	61.0
14 <i>n</i> -Декан (1) – <i>втор</i> -бутилбензол (2) – ацетонитрил (3) (25°C)			
6.4	2.9	92.5	4.4
7.0	6.3	83.1	13.5
7.9	9.8	72.1	23.9
8.5	13.3	61.6	33.2
9.4	17.0	50.8	42.6
10.9	20.9	39.0	50.0
11.2	25.0	29.0	53.0

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
15 <i>n</i> -Декан (1) – <i>втор</i> -бутилбензол (2) – ацетонитрил (3) в присутствии пентана* (25°C)			
4.1	2.9	89.5	4.2
4.7	7.1	72.4	19.6
5.4	11.9	57.1	32.8
6.2	17.8	45.1	43.7
7.1	23.8	34.7	51.3
8.2	27.5	24.3	56.1
*-Массовое отношение пентан : ацетонитрил 1:2 (составы исходной смеси и равновесных фаз приведены без учета пентана)			
16 <i>n</i> -Декан (1) – <i>втор</i> -бутилбензол (2) – 2-метоксиэтанол (3) (25°C)			
5.9	2.3	89.3	6.1
9.3	5.9	81.6	13.3
12.9	11.8	69.0	24.5
16.3	18.8	57.5	32.1
18.6	20.4	50.5	34.5
17 <i>n</i> -Декан (1) – <i>втор</i> -бутилбензол (2) – 2-метоксиэтанол (3) в присутствии пентана** (25°C)			
4.0	2.5	83.3	4.8
5.1	6.1	76.2	11.3
7.9	10.4	68.0	18.5
10.8	14.1	61.6	24.5
15.2	19.3	51.7	31.1
**-Массовое соотношение пентан : 2-метоксиэтанол 1:2 (составы исходной смеси и равновесных фаз приведены без учета пентана)			
18. <i>n</i> -Тридекан (1) – 2-метилнафталин (2) – триметилфосфат (3) (30°C)			
1.6	2.8	93.8	4.4
2.1	7.1	87.0	10.9
2.2	14.0	78.3	19.3
2.2	16.5	75.4	22.0
3.7	23.9	65.5	29.0
5.1	29.1	58.6	34.5
7.0	36.0	49.2	41.0
8.0	41.8	40.8	44.9

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
19 <i>n</i> -Октан (1) – <i>n</i> -ксилол (2) – N-метилоксазолидин-2-он (3) (25°C)			
1.0	5.5	79.0	19.0
1.7	10.0	67.0	30.0
2.2	13.5	56.8	39.2
3.0	23.0	45.5	48.5
2.5	17.5	35.0	58.5
20 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – леулинонитрил (3) (20°C)			
2.37	6.33	89.06	10.39
3.4	20.1	69.4	29.15
4.0	26.0	64.7	33.6
6.9	38.1	49.2	48.4
11.7	46.8	41.45	53.75
21 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – леулинонитрил (3) (50°C)			
4.6	7.4	88.95	9.0
4.9	10.1	84.54	14.05
4.9	11.1	80.05	18.15
6.8	23.9	61.4	34.6
7.8	31.2	50.3	43.4
22 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – растворитель (леулинонитрил с 5.12 % мас. воды) (3) (50°C)			
4.7	9.3	84.3	14.3
5.1	15.8	72.65	24.9
5.5	25.0	54.8	40.0
5.6	28.4	48.55	44.7
9.0	38.5	31.9	55.6
23 <i>n</i> -Гептан (1) – толуол (2) – леулинонитрил (3) (20°C)			
1.8	8.2	85.13	14.45
2.0	11.2	72.4	26.7
2.3	15.9	59.36	39.0
3.0	20.8	53.5	44.3
3.8	28.2	37.0	57.6
6.0	40.0	27.5	65.1

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
24 <i>n</i> -Октан (1) – <i>n</i> -ксилол (2) – левулиннитрил (3) (50°C)			
3.07	3.93	83.8	15.1
3.15	7.35	71.25	27.0
3.20	10.3	60.6	36.8
3.40	15.1	51.0	45.2
3.50	20.5	42.3	52.3
5.10	25.4	30.95	61.0
25 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – диметилмалонат (3) (20°C)			
7.4	10.1	81.7	9.5
6.6	5.9	85.5	7.2
7.1	12.8	71.1	14.2
13.5	20.0	62.2	20.8
18.8	25.2	51.8	24.8
26 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – растворитель (диметилмалонат – ДЭГ 36.6/63.4 % мас.) (3) (20°C)			
3.65	7.35	77.25	15.1
4.14	8.86	69.0	21.7
4.20	12.8	52.7	34.3
4.20	14.3	42.4	36.4
4.90	20.1	36.9	39.4
5.00	21.5	27.7	40.3
27 <i>n</i> -Гексан (1) – бензол (2) – N-ацетилоксазолидин (3) (50°C)			
4.6	3.0	93.7	3.1
5.5	5.9	90.0	6.1
6.5	9.5	82.8	11.9
10.4	19.5	68.6	23.0
14.0	27.8	53.1	32.0
28 <i>n</i> -Гептан (1) – толуол (2) – N-ацетилоксазолидин (3) (20°C)			
4.0	7.8	83.8	12.8
4.5	11.5	74.9	20.8
5.8	17.6	63.3	30.7
6.5	24.6	53.3	39.5
8.5	32.0	43.2	46.0

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
29 <i>n</i> -Октан (1) – <i>n</i> -ксилол (2) – растворитель (N-ацетилоксазолидин с 5 % мас. воды) (3) (25°C)			
1.2	4.3	82.6	16.0
1.4	9.6	64.6	32.7
1.5	12.5	58.0	39.0
1.9	15.1	45.7	47.8
2.5	22.5	37.0	54.5
3.0	28.0	28.0	59.0
30 <i>n</i> - Тридекан (1) – 1-метилнафталин (2) – N-ацетилоксазолидин (3) (30°C)			
1.5	13.0	92.0	7.2
2.5	25.0	80.7	17.2
2.5	23.0	86.2	12.2
3.5	35.0	68.1	27.9
6.5	44.5	57.3	36.6
12.0	51.5	42.7	48.1
31 <i>n</i> -Гептан (1) – толуол (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (25°C)			
3.2	3.8	91.0	6.2
3.5	7.7	83.2	12.8
4.0	10.9	76.2	18.3
5.3	15.0	69.1	24.0
5.6	18.5	61.0	30.0
6.6	22.5	53.7	35.0
8.0	27.0	45.6	39.5
10.0	30.8	37.0	42.5
32 <i>n</i> -Октан (1) – <i>m</i> -ксилол (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (25°C)			
1.8	3.2	90.2	8.0
2.5	5.5	84.0	12.5
2.7	11.0	67.2	26.8
4.0	18.5	53.0	37.5
6.0	23.7	39.5	46.5

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
33 <i>n</i> -Пентадекан (1) – 1,3-диметилнафталин (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (50°C)			
1.8	9.4	83.2	10.8
3.2	17.6	73.6	19.1
4.3	27.2	62.2	28.6
7.7	37.8	47.7	39.9
9.3	42.9	39.1	43.1
34 <i>n</i> -Пентадекан (1) – 1,3-диметилнафталин (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (70°C)			
2.6	4.2	90.3	5.7
2.8	9.4	82.5	13.3
4.0	13.6	74.4	18.6
4.4	17.5	71.0	23.0
7.0	25.0	53.6	33.0
9.3	29.3	44.5	35.3
35 <i>n</i> -Тетрадекан (1) – гексилбензол (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (70°C)			
3.0	3.0	84.5	14.2
3.8	5.9	68.3	24.4
4.1	9.4	57.1	33.4
4.5	12.2	47.0	41.0
5.0	14.2	35.5	48.4
36 <i>n</i> -Пентадекан (1) – бензотиофен (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (50°C)			
4.5	14.0	92.1	4.5
5.5	27.5	86.9	9.5
6.4	39.3	81.0	15.0
8.7	49.1	72.0	22.9
12.3	57.4	65.5	28.5
37 <i>n</i> -Пентадекан (1) – индол (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (50°C)			
2.3	2.4	96.8	0.16
2.6	9.0	95.9	0.6
3.0	16.1	94.9	1.1
4.2	31.3	94.0	2.3
5.5	44.5	92.6	3.5
9.0	50.5	92.0	4.0
17.5	55.1	91.5	4.4

продолжение таблицы 13

Экстрактная фаза		Рафинатная фаза	
X_1	X_2	X_1	X_2
38 <i>n</i> -Гексадекан (1) – хинолин (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (50°C)			
3.0	16.5	93.9	3.3
3.5	28.7	90.3	6.3
3.8	42.3	86.0	10.4
5.2	52.4	82.1	14.1
7.2	60.9	76.1	19.7
8.8	66.9	73.2	22.4
11.5	72.5	67.6	27.8
39 <i>n</i> -Тетрадекан (1) – дифенилсульфид (2) – N-метилморфолин-3-он (3) (50°C)			
1.5	7.9	94.0	3.1
1.8	11.3	91.3	5.7
2.6	17.4	88.6	8.3
3.0	26.5	82.5	13.5
4.5	34.4	76.6	19.1
7.2	43.4	71.9	23.6
40 <i>n</i> -Гептан (1) – толуол (2) – растворитель (ДЭГ – N-формилморфолин – вода состава 66.5/28.5/5.0 % мас.) (3) (100°C)			
1.1	3.0	73.0	24.0
1.4	4.0	67.5	28.9
2.6	9.0	53.7	42.3
3.5	16.5	43.0	51.3
3.5	25.0	32.8	59.4

Пример 2.

Выполнить задание для системы гептан (1) – толуол (2) – сульфолан (3) при 50°C. Составы равновесных фаз приведены в табл. 14.

Решение.

В той же табл. 14 приведены значения коэффициентов распределения толуола $(K_p)_T$ и гептана $(K_p)_{gn}$, а также коэффициенты разделения углеводородов (β) .

Таблица 14 – Составы равновесных фаз, коэффициенты распределения и разделения углеводородов

Состав экстрактной фазы, % мас.		Состав рафинатной фазы, % мас.		$(K_p)_T$	$(K_p)_{gn}$	(β)
X_1	X_2	X_1	X_2			
1.46	0.00	99.66	0.00	-	-	-
2.31	4.40	87.79	11.76	0.374	0.0263	14.22
2.47	9.67	76.47	22.87	0.423	0.0323	13.10
2.66	17.72	64.80	34.02	0.521	0.0410	12.68
3.00	23.60	55.43	42.53	0.555	0.0541	10.26
4.35	30.51	44.50	52.11	0.586	0.0977	5.99
4.89	40.61	35.69	58.44	0.695	0.1370	5.07
7.40	46.19	29.20	62.11	0.744	0.2534	2.94
11.92	55.61	23.10	63.39	0.877	0.5160	1.70

Коэффициенты распределения углеводородов рассчитывались по формуле:

$$(K_p)_i = \frac{(X_i)_S}{(X_i)_P},$$

где $(X_i)_S$ и $(X_i)_P$ – содержание компонента i в экстрактной и рафинатной фазах соответственно, % мас.

Коэффициенты разделения:

$$\beta = \frac{(K_p)_T}{(K_p)_{gn}}$$

Для построения диаграммы фазового равновесия жидкость – жидкость на диаграмме (рис.б) находят положение точек, отвечающих составам равновесных фаз – экстрактной и рафинатной, пользуясь методом параллельных линий. Соединяя точки – составы равновесных фаз – прямыми, строят ноды и затем бинодальную кривую.

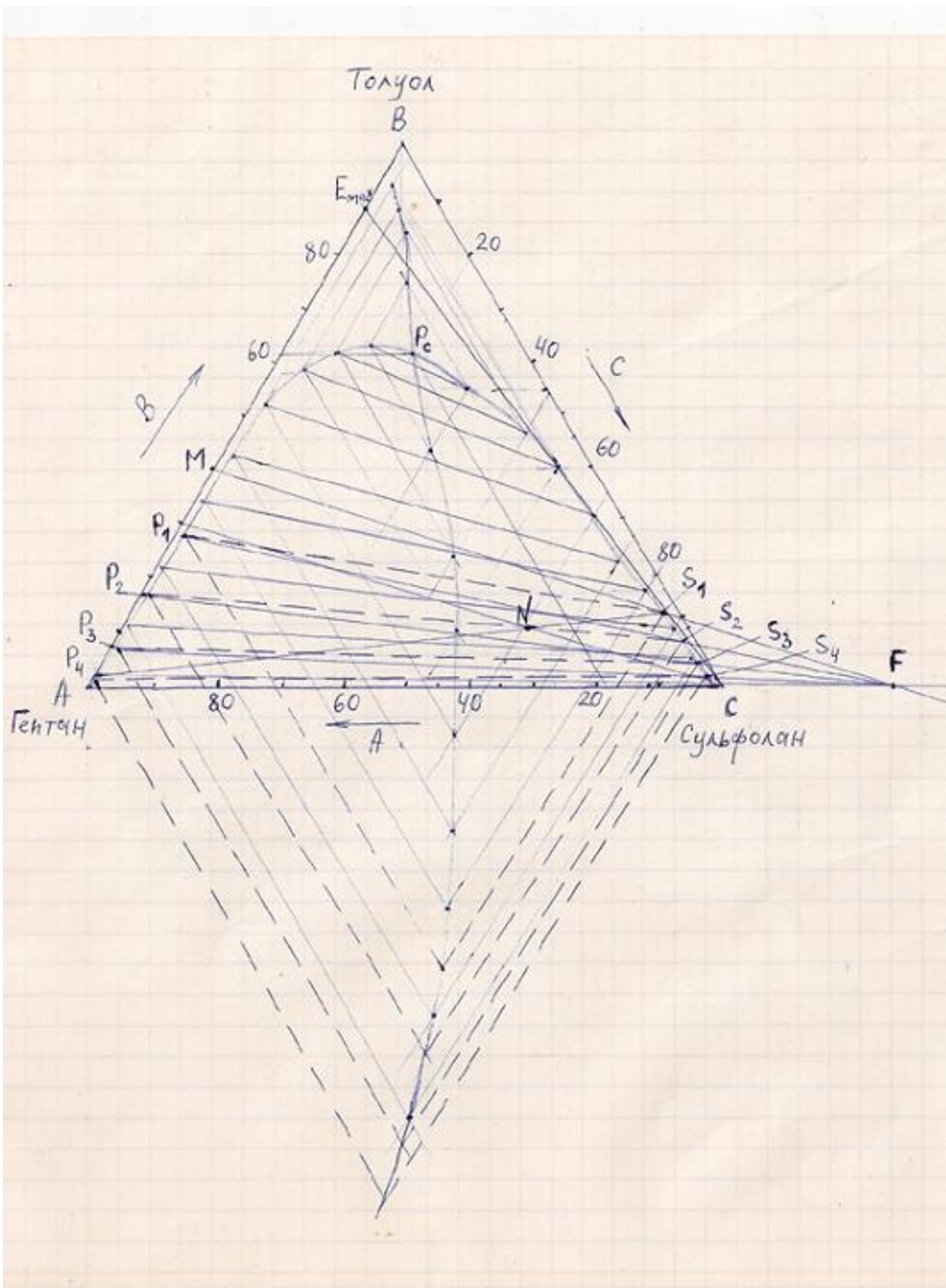


Рис. 6. Диаграмма фазового равновесия жидкость – жидкость в системе гептан – толуол – сульфолан при 50°C

Для уточнения положения верхней части бинадальной кривой следовало бы воспользоваться методом титрования, однако из-за отсутствия этой экспериментальной информации верхний участок бинадальной кривой построен экстраполяцией ее левой и правой ветвей до взаимного пересечения.

Для проверки корректности данных о равновесии жидкость – жидкость использованы линейные корреляции $y = ax + b$. По методу Отмера – Тобиаса

$$y = \lg \frac{1 - Y_3}{Y_3}$$

$$x = \lg \frac{1 - X_1}{X_1}$$

а при корреляции по Хэнду:

$$y = \lg \frac{Y_2}{Y_3}$$

$$x = \lg \frac{X_2}{X_1}$$

где X_1, X_2 – содержание гептана и толуола в рафинатной фазе, мас. доля;

Y_2, Y_3 – содержание толуола и сульфолана в экстрактной фазе, мас. доля.

Таблица 15 – Данные для расчета корреляций по Отмеру – Тобиасу и по Хэнду

Корреляция Отмера – Тобиаса				Корреляция Хэнда			
$\frac{1 - Y_3}{Y_3}$	$\frac{1 - X_1}{X_1}$	y	x	$\frac{Y_2}{Y_3}$	$\frac{X_2}{X_1}$	y	x
0.0719	0.1391	-1.1433	-0.8567	0.0472	0.1340	-1.3261	-0.8729
0.1382	0.3077	-0.8595	-0.5119	0.1101	0.2991	-0.9582	-0.5242
0.2560	0.5432	-0.5918	-0.2650	0.2226	0.5250	-0.6525	-0.2798
0.3624	0.8041	-0.4408	-0.0947	0.3215	0.7673	-0.4928	-0.1150
0.5352	1.2472	-0.2715	0.0959	0.4684	1.1710	-0.3294	0.0686
0.8349	1.8019	-0.0784	0.2557	0.7451	1.6374	-0.1278	0.2142
1.1547	2.4247	0.0625	0.3847	0.9953	2.1271	-0.0020	0.3278
2.0798	3.3290	0.3180	0.5223	1.7127	2.7442	0.2337	0.4384

С использованием метода наименьших квадратов найдены константы уравнения Отмера – Тобиаса: $a=1.02766$; $b=-0,31939$ и коэффициент корреляции $r=0.9948$, а также уравнения Хэнда: $a=1.1443$; $b=-0,3323$ и

$r=0.9992$. Достаточно высокие коэффициенты корреляции свидетельствуют об удовлетворительной согласованности экспериментальных данных о равновесии жидкость – жидкость.

Определение критической точки тройной системы возможно графическим методом с использованием фазовой диаграммы. Для этого необходимо построить корреляционную линию, проведя из концов нод на левой ветви бинодальной кривой прямые вверх параллельно стороне AB , а из концов нод на правой ветви – параллельно BC до взаимного пересечения прямых. Затем из концов нод на левой ветви бинодальной кривой проводят прямые вниз параллельно стороне BC , а из концов нод на правой ветви – параллельно AB . Корреляционная кривая проводится по точкам пересечения вспомогательных прямых. Критическая точка тройной системы соответствует точке пересечения бинодальной и корреляционной кривой P_c . Состав критической точки для данной системы гептан (1) – толуол (2) – сульфолан (3) при 50°C , % мас. : $X_1=18$; $X_2=62$; $X_3=20$. $E_{\max}=89$ % мас. Число теоретических степеней экстракции – около 4.

Контрольная работа №3

Часть I (см. Введение)

1. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения азеотропной смеси ацетон – хлороформ и предложить возможные разделяющие агенты.
2. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения азеотропной смеси ацетон – метанол и предложить возможные разделяющие агенты.
3. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения азеотропной смеси гексан – винилацетат – метилакрилат состава, % мас.: 68, 22 и 10 соответственно и предложить возможные разделяющие агенты.
4. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения азеотропной смеси 2,4-диметилпентан – циклогексан и предложить возможные разделяющие агенты.
5. Какие процессы целесообразно выбрать для разделения смеси гептан – бензол с содержанием бензола, % мас.: а) 50; б) 1? Предложите возможные разделяющие агенты.
6. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения смеси бензол – тиофен состава 70/30 % мас. и предложить возможные разделяющие агенты.
7. Обосновать выбор оптимального процесса для разделения смеси нафталин – бензотиофен и предложить возможные разделяющие агенты.
8. Обосновать выбор оптимального процесса очистки антрацена от примесей карбазола и фенантрена и предложить возможные разделяющие агенты.
9. Какие процессы целесообразно выбрать для разделения смеси гексан – бензол с содержанием бензола, % мас.: а) 95; б) 30; и) 1? Предложите возможные разделяющие агенты.
10. Какие процессы применяются для разделения изомеров ксилола? Перечислить не менее пяти процессов и указать, какой из аренов C_8 выделяется в каждом процессе и почему?
11. Предложите методы разделения азеотропной смеси 1-бутанол – бутилацетат и эффективные разделяющие агенты.
12. N-Оксид пиридина – соединение с высоким дипольным моментом, проявляющее высокую селективность по отношению к системам алкан – циклоалкан. Так, при 77°C предельные коэффициенты активности гексана и циклогексана в этом растворителе равны 68.4 и 29.7 соответственно. Проявит ли N-оксид пиридина высокую эффективность при выделении циклогексана из смесей с близкокипящими алканами методом экстрактивной ректификации?
13. Какими методами можно выделить гомологи нафталина, фенантрена, антрацена из смесей с близкокипящими моноциклоаренами?

14. Какими методами можно разделить систему циклогексан – циклогексен – бензол и с использованием каких разделяющих агентов?
15. Предложите наиболее оптимальный метод выделения индола из смеси с метилнафталинами и дифенилом и возможные эффективные разделяющие агенты.
16. Какими методами можно удалить сульфиды из дизельной фракции?
17. Какими методами можно очистить природный и промышленные газы от сероводорода?
18. Как можно выделить из узкокипящей нефтяной фракции 2,6-диметилнафталин?
19. Предложите методы разделения смеси этилацетат – метилэтилкетон и эффективные разделяющие агенты.
20. Какие процессы целесообразно выбрать для разделения смесей метилциклопентан – бензол с содержанием бензола, % мас.: а) 90; б) 50?. Предложите эффективные разделяющие агенты.
21. Предложите возможные методы разделения системы аллен – пропин и эффективные разделяющие агенты.
22. Предложите возможные методы разделения системы аллен – пропан и эффективные разделяющие агенты.
23. Какими методами можно разделить смесь диоксид углерода – метан?
24. Какими методами можно разделить смеси *цис*- и *транс*- изомеров диалкилциклогексана?
25. Какими методами можно разделить смесь 1-метил-3-этилбензола и 1-метил-4-этилбензола?
26. Какие процессы разделения целесообразно выбрать для разделения смесей индол – 2-метилнафталин с содержанием 2-метилнафталина, % мас.: а) 10; б) 90?
27. Какими методами и с использованием каких разделяющих агентов можно разделить смесь *о*-ксилол – стирол?
28. Какими методами возможна осушка природного газа и с использованием каких разделяющих агентов?
29. Какими методами и с использованием каких разделяющих агентов целесообразно проводить «отбензинивание» углеводородных газов? Почему применение полярных абсорбентов для этого нецелесообразно?
30. Какие методы выделения *n*-алканов эффективны при выделении их из прямогонных нефтяных фракций: а) фракций C_4 или C_5 ; б) бензиновой фракции; в) керосиновой фракции; г) дизельной фракции; д) масляных дистиллятов? Какие разделяющие агенты целесообразно при этом использовать?
31. Какими методами можно выделить изобутилен из фракции углеводородов C_4 (алканов, алкенов) ?

32. Какие методы наиболее эффективны и экономичны для разделения смеси этилциклогексан – этилбензол с содержанием этилбензола, % мас: а) 50; б) 90? Обоснуйте выбор методов и предложите разделяющие агенты.
33. Какими методами можно разделить смеси близкокипящих алканов изопреноидного строения и *n*-алканов?
34. Какими методами и с помощью каких разделяющих агентов можно разделить смесь изопрен – 1-пентин? Как можно очистить изопрен от примесей 1-пентина?
35. Какими альтернативными негидрогенизационными методами можно снизить содержание полициклоаренов и гетероатомных компонентов в дизельной фракции и с помощью каких разделяющих агентов?
36. Какими нехимическими методами можно повысить октановое число прямогонной бензиновой фракции?
37. Какими методами можно выделить фенол из водных растворов?
38. Какими методами можно регенерировать селективные растворители, применяющиеся для выделения аренов $C_6 - C_8$ из риформатов и пироконденсатов?
39. Какими методами можно регенерировать экстрагенты, применяющиеся для селективной очистки масляных фракций?
40. Какие комбинированные методы выделения аренов $C_6 - C_8$ из риформатов и пироконденсатов можно использовать и каковы их преимущества?

Контрольная работа №3
Часть II

ТЕСТОВЫЕ ВОПРОСЫ

- 1) Какие взаимодействия проявляются между молекулами насыщенных углеводов?
 - а) ориентационные;
 - б) индукционные;
 - в) дисперсионные;
 - г) специфические
- 2) Какие взаимодействия проявляются между молекулами бензола и полярных растворителей, например нитробензола*?
 - а) ориентационные;
 - б) индукционные;
 - в) дисперсионные;
 - г) образование π -комплексов
- 3) Какой атом в молекуле N-метилпирролидона служит в качестве основного электрофильного центра?
 - а) азот;
 - б) кислород;
 - в) карбонильный атом углерода;
 - г) атомы водорода метильной группы;
 - д) углерод метильной группы;
 - е) атомы углерода метиленовых групп
- 4) Какое соединение образует твердые комплексы с гомологами нафталина и полициклоаренов?
 - а) нитробензол;
 - б) N-метилпирролидон;
 - в) пикриновая кислота;
 - г) сульфолан
- 5) Какое соединение образует твердый π -комплекс с бензолом яркокрасного цвета?
 - а) N-метилпирролидон;
 - б) пентафторнитробензол;
 - в) пикриновая кислота
- 6) Какой углеводород сильнее всего взаимодействует с молекулами N-метилпирролидона?
 - а) 1-пентен;
 - б) 1-пентин;
 - в) 2-пентин;
 - г) изопрен
- 7) Какие уравнения, служащие для моделирования коэффициентов активности компонентов раствора, относятся к эмпирическим?
 - а) Вильсона;

- б) Редлиха-Кистера;
 - в) NRTL;
 - г) Ван-Лаара;
 - д) Маргулеса;
 - е) Цубоки-Катаямы
-

*При ответах на некоторые вопросы возможны несколько правильных вариантов.

8) Какие методы расчета коэффициентов активности относятся к полуэмпирическим?

- а) Вильсона;
- б) Редлиха-Кистера;
- в) Ван-Лаара;
- г) UNIFAC;
- д) NRTL;
- е) UNIQUAC

9) Какое уравнение обычно хорошо описывает равновесие жидкость – пар, но хуже равновесие жидкость – жидкость?

- а) Вильсона;
- б) NRTL;
- в) UNIQUAC

10) Какой метод расчета коэффициентов активности неприменим для систем с отрицательными отклонениями от закона Рауля?

- а) Вильсона;
- б) ASOG;
- в) Скетчарда-Гильдебранда;
- г) UNIFAC

11) Какие углеводороды лучше всего растворимы в перфторалкилфатических растворителях?

- а) арены;
- б) алканы;
- в) алкены;
- г) циклоалканы;
- д) алкины

12) В каком растворителе лучше всего растворяются арены?

- а) N-метилпирролидон;
- б) этиленгликоль;
- в) вода

13) Как изменятся с повышением температуры коэффициенты активности насыщенных углеводородов в N-метилпирролидоне, если тепловой эффект смешения компонентов эндотермический?

- а) уменьшатся;
- б) останутся постоянными;

- в) увеличатся
- 14) Как изменятся с повышением температуры коэффициенты активности 1-алкинов в N-метилпирролидоне, если известно, что смешение компонентов происходит с экзотермическим эффектом?
- а) уменьшатся;
б) останутся постоянными;
в) увеличатся
- 15) Как изменятся с повышением температуры коэффициенты активности бензола в N-метилпирролидоне, если известно, что раствор практически атермический?
- а) уменьшатся;
б) останутся постоянными;
в) увеличатся
- 16) Коэффициент активности какого углеводорода в N-метилпирролидоне минимальный?
- а) циклогексана;
б) гексана;
в) бензола;
г) 1-гексена;
д) циклогексадиена
- 17) В каком растворителе коэффициенты активности бензола наибольшие?
- а) этиленгликоле;
б) N-метилпирролидоне;
в) циклогексане;
г) нитробензоле
- 18) Коэффициент активности какого углеводорода в сульфолане наибольший?
- а) бензола;
б) толуола;
в) этилбензола
- 19) Какой растворитель проявляет наибольшую селективность по молекулярным массам?
- а) *n*-гексадекан;
б) этиленгликоль;
в) N-метилпирролидон
- 20) Какой углеводород с наименьшей вероятностью образует азеотропную смесь с метилэтилкетонном?
- а) гептан;
б) толуол;
в) 1-гептен;
г) метилциклогексан
- 21) Какой углеводород образует с ацетонитрилом азеотроп с наименьшей температурой кипения?

- а) бензол;
- б) циклогексан;
- в) гексан

22) Какой углеводород остается в кубовом остатке в результате разделения фракции C_7 азеотропной ректификацией с метилэтилкетоном?

- а) н-гептан;
- б) 2-метилгексан;
- в) толуол;
- г) метилциклогексан

23) В какую часть колонны экстрактивной ректификации следует подавать селективный растворитель?

- а) на верхнюю тарелку;
- б) на вторую-третью тарелку сверху;
- в) вместе с сырьем;
- г) в кипятильник

24) Какой из селективных растворителей следует выбрать для выделения бензола из бензольной фракции риформата методом экстрактивной ректификации?

- а) ацетонитрил;
- б) N-метилпирролидон;
- в) этиленгликоль;
- г) сульфолан

25) Какой оптимальный процесс следует выбрать для разделения смеси метилциклогексан – толуол, содержащей 50 % мас. толуола?

- а) азеотропная ректификация;
- б) экстрактивная ректификация;
- в) экстракция;
- г) адсорбция

26) Какой оптимальный процесс следует выбрать для разделения смеси метилциклогексан – толуол, содержащей 5 % мас. толуола?

- а) азеотропная ректификация;
- б) экстрактивная ректификация;
- в) экстракция;
- г) адсорбция

27) Какой процесс оптимален для разделения смеси гептан – бензол, содержащей 50 % мас. бензола?

- а) азеотропная ректификация;
- б) экстрактивная ректификация;
- в) экстракция;
- г) адсорбция

28) Какой процесс оптимален для выделения аренов $C_6 - C_8$ из фракции 62 – 140°C риформата?

- а) азеотропная ректификация;

- б) экстрактивная ректификация;
 - в) экстракция;
 - г) адсорбция
- 29) Какой процесс очистки жидких н-алканов $C_{10} - C_{14}$ от примесей аренов (до 1 % мас.) целесообразно было бы использовать вместо олеумной очистки?
- а) азеотропная ректификация;
 - б) экстрактивная ректификация;
 - в) экстракция;
 - г) адсорбция
- 30) Какой экстрагент наиболее эффективен при выделении аренов $C_6 - C_8$ из риформатов?
- а) диметилсульфоксид;
 - б) триэтиленгликоль;
 - в) сульфолан;
 - г) N-метилпирролидон
- 31) Какой экстрагент наиболее эффективен в процессе селективной очистки масляных фракций?
- а) фенол;
 - б) N-метилпирролидон;
 - в) фурфурол;
 - г) смесь фенола с крезолами
- 32) Какие экстракторы обеспечивают наименьшую высоту, эквивалентную теоретической ступени экстракции?
- а) с ситчатыми талелками;
 - б) с насыпной насадкой;
 - в) с регулярной насадкой
 - г) роторно-дисковый
- 33) Какие соединения легче всего экстрагируются из дизельной фракции?
- а) гомологи бензола;
 - б) гомологи тиофена;
 - в) гомологи бензотиофена;
 - г) гомологи нафталина;
 - д) гомологи дибензотиофена;
 - е) гомологи трициклоаренов
- 34) Какие соединения наиболее трудно подвергаются гидрогенолизу при гидроочистке дизельной фракции?
- а) диалкилсульфиды;
 - б) тиацикланы;
 - в) гомологи тиофена;
 - г) гомологи бензотиофена;
 - д) гомологи дибензотиофена

- 35) Какие из перечисленных процессов применяются в промышленности для разделения ксилолов?
- а) ректификация;
 - б) азеотропная ректификация;
 - в) экстрактивная ректификация;
 - г) экстракция;
 - д) абсорбция;
 - е) адсорбция на цеолитах;
 - ж) кристаллизация;
 - з) диффузия через мембраны;
 - и) термодиффузия
- 36) Какой размер молекул «гостя» является лимитирующим при карбамидной депарафинизации и при адсорбции компонентов на цеолитах?
- а) поперечное сечение;
 - б) длина молекулы;
 - в) молярный объем
- 37) Какой размер молекул «гостя» является лимитирующим при разделении углеводов с использованием газовых гидратов?
- а) поперечное сечение;
 - б) длина молекулы;
 - в) молярный объем
- 38) Какие из перечисленных углеводов образуют аддукты с карбамидом?
- а) *n*-пентадекан;
 - б) 2,2-диметилтридекан;
 - в) 2-метилтетрадекан;
 - г) 1-циклогексилнонан;
 - д) 1-фенилоктадекан;
 - е) 1-циклогексилондекан
- 39) Какие из перечисленных углеводов образуют аддукты с тиокарбамидом?
- а) гексан;
 - б) циклогексан;
 - в) бензол;
 - г) 2,6-диметилпентан;
 - д) дурол (1,2,4,5-тетраметилбензол)
- 40) Какой из изомеров ксилола диффундирует через полимерные мембраны с наибольшей скоростью?
- а) *орто*-ксилол;
 - б) *мета*-ксилол;
 - в) *пара*-ксилол
- 41) Разделение каких газовых смесей реализовано методом диффузии через мембраны в промышленности?
- а) H_2/CH_4 ;

- б) H_2/CO_2 ;
 - в) H_2/CO ;
 - г) $\text{H}_2\text{S}/\text{CO}_2$;
 - д) O_2/N_2 ;
 - е) $\text{H}_2\text{S}/\text{CH}_4$;
 - ж) $\text{H}_2\text{O}/\text{CH}_4$
- 42) Какой арен C_8 сульфируется с наибольшей скоростью?
- а) *орто*-ксилол;
 - б) *мета*-ксилол;
 - в) *пара*-ксилол;
 - г) этилбензол
- 43) Какой из изомерных бутенов взаимодействует с метанолом или водой с наибольшей скоростью?
- а) 1-бутен;
 - б) 2-метилпропен;
 - в) *цис*-2-бутен;
 - г) *транс*-2-бутен
- 44) Какой из углеводородов C_5 вступает в реакцию Тиле?
- а) изопрен;
 - б) 2-метил-2-бутен;
 - в) циклопентадиен;
 - г) 1-пентин
- 45) Какие арены взаимодействуют с малеиновым ангидридом?
- а) гомологи бензола;
 - б) гомологи нафталина;
 - в) гомологи фенантрена;
 - г) гомологи антрацена
- 46) Какими методами можно выделить циклогексан из смесей с близкокипящими изоалканами?
- а) ректификация;
 - б) экстрактивная ректификация;
 - в) диффузия через мембраны;
 - г) термическая диффузия;
 - д) образованием гидратов
- 47) Какими методами выделяют водород из водородсодержащих газов?
- а) диффузия через мембраны;
 - б) ректификация;
 - в) абсорбция
 - г) короткоцикловая адсорбция;
 - д) криогенный метод

«Моделирование равновесия жидкость - пар»

1. Какие неспецифические и специфические взаимодействия проявляются в растворах неэлектролитов?
2. Чем обусловлено дисперсионное взаимодействие даже между неполярными молекулами?
3. Что такое π -комплексы?
4. Шкалы донорных и акцепторных чисел растворителей.
5. Как зависят коэффициенты активности компонентов бинарной системы от ее состава?
6. Какими методами можно определять коэффициенты активности компонентов?
7. Как можно проверить термодинамическую согласованность экспериментальных данных о коэффициентах активности компонентов?
8. Для чего служат эмпирические уравнения Маргулеса, Ван-Лаара, Редлиха-Кистера?
9. Какая модель раствора была использована Вильсоном при выводе его уравнения?
10. Какая исходная информация должна быть известна для расчета приведенных параметров уравнения Вильсона?
11. Каковы преимущества уравнения Вильсона по сравнению с эмпирическими уравнениями и недостатки по сравнению с другими полуэмпирическими уравнениями?
12. Какие условия выполняются для регулярных растворов?
13. Как рассчитывается параметр растворимости Гильдебранда и что он характеризует?
14. В чем состоит суть правила растворимости Гильдебранда-Семенченко?
15. Каковы преимущества и недостатки уравнения Скэтчарда-Гильдебранда для расчета коэффициента активности?
16. Что такое гомоморфный метод и для чего он используется?
17. Какая модель раствора используется в теоретических методах расчета коэффициентов активности ASOG и UNIFAC?
18. Какая информация должна быть известна, чтобы можно было использовать метод UNIFAC?
19. Как описывается зависимость коэффициентов активности компонентов от температуры и чем определяется характер этой зависимости?

«Азеотропная и экстрактивная ректификация»

1. Каким термодинамическим критерием характеризуется селективность растворителей по отношению к разделяемым компонентам и как он выводится?

2. Почему коэффициенты активности углеводородов одного гомологического ряда в полярных растворителях возрастают с увеличением числа углеродных атомов в молекулах углеводорода?
3. Как коэффициенты активности компонентов связаны с энергиями межмолекулярных взаимодействий?
4. Что такое селективность растворителей по молекулярным массам и почему желательно, чтобы она была низкой, в отличие от групповой селективности?
5. Какие растворители проявляют высокую и какие низкую селективность по молекулярным массам?
6. Почему коэффициенты активности циклоалканов в полярных растворителях ниже, чем алканов с тем же числом углеродных атомов?
7. Почему коэффициенты активности алкенов в полярных растворителях ниже, чем алканов, а аренов еще ниже?
8. Почему коэффициенты активности 1-алкинов в полярных (особенно сильноосновных) растворителях ниже, чем алкадиенов с тем же числом углеродных атомов?
9. Почему корреляционные уравнения Гаммета-Тафта можно использовать для предсказания селективности растворителей?
10. Как можно объяснить отсутствие корреляции селективности растворителей с дипольными моментами или диэлектрическими постоянными?
11. Какой универсальный критерий, характеризующий силовое поле молекул растворителей, может быть использован для оценки селективности?
12. Вывести условие образования азеотропов.
13. Какие следствия вытекают из условия образования азеотропов?
14. Почему вода или этиленгликоль образуют азеотропные смеси с широким кругом углеводородов, значительно отличающихся от этих растворителей по температуре кипения?
15. Почему высокоселективные растворители можно использовать в качестве эффективных азеотропобразующих компонентов даже в тех случаях, когда они образуют азеотропы, например, не только с насыщенными углеводородами, но и с аренами?
16. Какие требования предъявляются к азеотропобразующим компонентам?
17. Как зависит состав азеотропов от давления?
18. В каком случае разделение смесей азеотропной ректификацией экономично?
19. Каковы недостатки процесса азеотропной ректификации?
20. Чем отличаются принципиальные технологические схемы процессов азеотропной и экстрактивной ректификации?
21. Каковы преимущества экстрактивной ректификации по сравнению с азеотропной?

22. Какие селективные растворители применяются для выделения бензола и его гомологов методом экстрактивной ректификации?

23. Какой первый процесс экстрактивной ректификации применялся для выделения аренов C_6 - C_8 из риформатов в СССР?

24. Каковы недостатки и преимущества экстрактивной ректификации по сравнению с экстракцией?

25. Какие селективные растворители применяются для выделения дивинила, изопрена, стирола методом экстрактивной ректификации?

«Абсорбция»

1. Выделение и очистка каких веществ в нефтепереработке и промышленности основного органического синтеза проводится методами абсорбции и хемосорбции?

2. Какие абсорбенты применяются для выделения и очистки ацетилена, для удаления сероводорода и других кислых газов из природного и промышленных газов?

3. Какова принципиальная схема абсорбционно-десорбционной установки?

4. Что такое относительные концентрации компонентов в газовой и жидкой фазе, получаемых при абсорбции?

5. Что такое фактор абсорбции?

6. Как рассчитывается необходимое число теоретических ступеней абсорбции с помощью диаграммы У-Х?

7. Как влияет изменение температуры, давления и удельного расхода абсорбента на требуемое число теоретических ступеней в абсорбере?

8. Какие допущения были использованы Кремсером при выводе его уравнения и в каком случае они допустимы?

9. Вывести уравнение Кремсера.

10. Как выглядит график Кремсера и что он позволяет определять?

11. Какой компонент выбирается в качестве ведущего при расчете абсорбера?

12. Какая температура понимается под средней эффективной температурой абсорбции?

13. Как составляется материальный баланс абсорбера?

14. Как рассчитывается тепловой эффект процесса абсорбции?

15. Какие типы абсорберов и десорберов применяются в промышленности?

«Экстракция»

1. Для выделения каких углеводородов и продуктов основного органического синтеза применяется экстракция?

2. Какие требования применяются к экстрагентам?

3. Какие экстрагенты применяются для экстракции бензола и его гомологов, каковы их преимущества и недостатки?

4. Как проводится регенерация экстрагентов?
5. Какие способы можно использовать для выражения состава фаз на треугольной диаграмме?
6. Каковы свойства треугольной диаграммы: правило рычага, правило сложения, правило вычитания?
7. Какими методами можно построить бинодальную кривую?
8. Какие возможны типы бинодальных кривых?
9. Как, зная положение нескольких нод, можно построить ноду, проходящую через любую точку бинодальной кривой?
10. Чем отличаются понятия «экстракт» и «экстрактная фаза»?
11. Как можно определить максимальную концентрацию экстрагируемых компонентов в экстракте при замкнутой бинодальной кривой?
12. Что такое коэффициенты распределения компонентов и коэффициенты разделения при экстракции?
13. Что понимается под полюсом треугольной диаграммы и как можно определить его положение?
14. Как можно определить требуемое число теоретических ступеней экстракции по методу Хантера и Наша?
15. Какие типы экстракторов применяются в промышленности?
16. Какова принципиальная технологическая схема промышленных процессов экстракции бензола и его гомологов?
17. Что такое рисайкл и как можно снизить его расход?
18. Как можно устранить еще один возвратный поток – предбензольную фракцию?
19. Каковы преимущества комбинированного процесса экстрактивной ректификации – экстракции по сравнению с индивидуальными процессами?
20. Как можно значительно сократить соотношение экстрагента к сырью и удельные энергозатраты при экстракции бензола и его гомологов?
21. Какие экстрагенты применяются для селективной очистки масляных фракций, каковы их преимущества и недостатки?
22. Какие нежелательные компоненты удаляются при селективной очистке масляных фракций и почему их присутствие нежелательно в смазочных маслах?
23. Каково назначение процесса деасфальтизации и какие растворители применяются в этом процессе?
24. Почему селективность пропана в процессе деасфальтизации при повышении температуры возрастает в отличие от селективности экстрагентов ароматических углеводородов?
25. Каковы возможности экстракционных методов при производстве экологически чистых дизельных и реактивных топлив?
26. Какими способами можно повысить эффективность экстракционной очистки дизельных и реактивных топлив?

«Адсорбция»

1. Какие адсорбенты используются в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности?
2. Как расшифровываются марки силикагелей?
3. Каков состав цеолитов и их кристаллическая структура?
4. От чего зависят молекулярно-ситовые свойства цеолитов?
5. Как различаются российская и американская классификация цеолитов?
6. В каких процессах разделения и очистки нефтеперерабатывающей промышленности применяются адсорбенты?

«Кристаллизация, экстрактивная и аддуктивная кристаллизация»

1. Какие существуют типы диаграмм фазового равновесия между жидкой и твердой фазами?
2. От каких факторов зависит температура кристаллизации органических веществ?
3. Какие методы выделения n-алканов применяются в нефтепереработке?
4. Какие требования предъявляются к растворителям в процессе депарафинизации масляных фракций экстрактивной кристаллизацией?
5. Что такое температурный эффект депарафинизации?
6. Какие растворители применяются при депарафинизации масел, каковы их преимущества и недостатки?
7. Какие факторы влияют на эффективность депарафинизации масел методом экстрактивной кристаллизации?
8. Каков состав церезинов?
9. Что такое гач и петролатум?
10. Из каких секций состоит установка депарафинизации масел?
11. Как проводится обезмасливание гача и петролатума?
12. Какая из стадий производства смазочных масел наиболее дорогостоящая?
13. Каковы направления совершенствования технологии депарафинизации масел?
14. Кто и каким образом открыл карбамидную депарафинизацию?
15. Какова структура комплексов карбамида с n-алканами?
16. Почему другие углеводороды, не относящиеся к n-алканам, как правило, не образуют комплексы с карбамидом?
17. Какие силы удерживают молекулы n-алканов внутри канала, образованного молекулами карбамида?
18. Чем объясняется повышение стабильности комплексов n-алканов с карбамидом с увеличением числа углеродных атомов в молекулах n-алканов?
19. Почему селективность карбамидной депарафинизации вакуумных газойлей ниже, чем керосиновых и дизельных фракций?
20. Какие углеводороды, не относящиеся к n-алканам, способны образовывать аддукты с карбамидом?
21. С какими углеводородами образует твердые комплексы тиокарбамид?

22. Почему диаметр канала, образуемого молекулами тиокарбамида, больше, чем для карбамида?
23. Почему n-алканы не образуют твердые аддукты с тиокарбамидом?
24. Какие активаторы используются при карбамидной депарафинизации и какова их роль?
25. Какие растворители могут применяться при карбамидной депарафинизации и каковы их функции?
26. Какими способами разрушают комплексы карбамида с n-алканами?
27. Когда и кем были открыты впервые клатратные соединения?
28. Какова структура клатратных соединений?
29. Какую общую формулу имеют комплексы Вернера?
30. Для разделения каких углеводородов могут применяться комплексы Вернера?
31. С какими углеводородами образуются газовые гидраты и какова структура?
32. Чем отличаются газовые гидраты от клатратных соединений туннельного типа – какой размер молекул «гостя» является лимитирующим?
33. Запасы каких горючих ископаемых считаются максимальными и в каком они находятся виде?

«Диффузия через мембраны и термодиффузия»

1. На каких факторах основано разделение компонентов методом диффузии через мембраны?
2. Что такое коэффициент разделения в процессе диффузии через мембраны?
3. Что такое коэффициент проницаемости?
4. От каких факторов зависит скорость диффузии и избирательность разделения при диффузии через мембраны?
5. Разделение каких смесей осуществляется в промышленности методом диффузии через мембраны?
6. Когда, кем и каким образом было открыто явление термодиффузии?
7. Какова конструкция термодиффузионных колонок?
8. Каковы основные закономерности процесса термодиффузии?
9. Какие трудноразделяемые близкокипящие компоненты можно разделять термодиффузионным методом?
10. Какие способы повышения селективности разделения используются в термодиффузионных колонках?

«Химические методы разделения и очистки»

1. Для разделения и очистки каких углеводородов используется реакция сульфирования?
2. Какой из изомеров ксилола сульфируется с наибольшей скоростью и почему?

3. Какие углеводороды могут быть выделены из нефтяных фракций конденсацией с малеиновым ангидридом?

4. Какой химический метод используется для очистки 1,3-бутадиена и изопрена от примесей алкинов?

5. Для очистки изопрена от какого углеводорода используется реакция Тиле?

6. Какие реакции протекают в процессе гидроочистки 1,3-бутадиена и изопрена от примесей алкинов?

7. Какие серосодержащие соединения плохо удаляются при гидроочистке?

«Совмещенные реакционно-массообменные процессы»

1. В каких случаях целесообразно использовать совмещенные реакционно-массообменные процессы?

2. Каковы преимущества совмещенных процессов?

3. По каким признакам проводится классификация совмещенных процессов?

4. От чего зависит выбор расположения реакционной зоны в совмещенном аппарате?

5. В какую часть реакционной зоны подается более летучий компонент и в какую часть – менее летучий реагент?

6. Для получения каких продуктов органического и нефтехимического синтеза применяются в промышленности совмещенные реакционно-массообменные процессы?

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ ВОПРОСЫ

1. Классификация процессов разделения и очистки органических веществ.
2. Неспецифические и специфические взаимодействия в растворах неэлектролитов.
3. Селективность растворителей по отношению к разделяемым компонентам.
4. Зависимость коэффициентов активности углеводов в растворителях от строения углеводов.
5. Зависимость селективности и растворяющей способности от химического строения растворителей.
6. Донорные и акцепторные числа растворителей.
7. Экспериментальные методы определения коэффициентов активности и проверка их термодинамической согласованности.
8. Моделирование коэффициентов активности компонентов раствора с помощью эмпирических уравнений.
9. Моделирование коэффициентов активности компонентов раствора с помощью полуэмпирических уравнений.
10. Теория регулярных растворов. Правило растворимости Гильдебранда – Семенченко.
11. Зависимость коэффициентов активности компонентов от температуры.
12. Условие образования азеотропов и следствия из него.
13. Требования к азеотропобразующим компонентам. Преимущества и недостатки азеотропной ректификации.
14. Требования к растворителям для экстрактивной ректификации. Применение процесса экстрактивной ректификации.
15. Расчет колонн азеотропной и экстрактивной ректификации.
16. Свойства треугольной диаграммы.
17. Методы представления точек, отвечающих составам трехкомпонентных систем, на треугольной диаграмме.
18. Методы построения бинодальных кривых и нод.
19. Коэффициенты распределения и разделения в процессе экстракции.
20. Расчет числа теоретических ступеней экстрактора.
21. Конструкции экстракторов.
22. Требования к экстрагентам
23. Процессы экстракции бензола и его гомологов из катализатор риформинга.
24. Экстракционная очистка керосиновых, дизельных фракций и вакуумных газойлей.
25. Селективная очистка масляных фракций.

26. Принципиальная схема абсорбционно-десорбционной установки. Фактор абсорбции.
27. Расчет процесса абсорбции с помощью диаграммы У-Х.
28. Уравнение и график Кремсера.
29. Составление материального и теплового баланса абсорбера.
30. Полярные и неполярные адсорбенты с неоднородной пористостью.
31. Природные и синтетические цеолиты, их применение в нефтепереработке и нефтехимии.
32. Применение процесса кристаллизации в нефтепереработке и нефтехимии.
33. Депарафинизация масляных фракций с использованием селективных растворителей.
34. Карбамидная депарафинизация.
35. Клатратные соединения с полостями в кристаллической решетке в форме клеток. Газовые гидраты.
36. Диффузия через мембраны.
37. Термическая диффузия.
38. Деасфальтизация нефтяных остатков. Дуосол – процесс.
39. Химические методы выделения и очистки углеводородов и гетероатомных соединений.
40. Методы выделения водорода из промышленных газов.
41. Классификация и преимущества совмещенных реакционно-массообменных процессов.
42. Применение совмещенных реакционно-массообменных процессов в основном органическом синтезе.
43. Принципы организации совмещенных реакционно-ректификационных процессов.
44. Современное состояние российской нефтепереработки, нефтехимии и науки.

Литература (основная)

1. Гайле А.А. Процессы разделения и очистки продуктов переработки нефти и газа. Часть I. Азеотропная и экстрактивная ректификация, экстракция: учебное пособие для студентов заочной формы обучения. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2011. – 156 с.
2. Гайле А.А. Процессы разделения и очистки продуктов переработки нефти и газа. Часть 2: учебное пособие для студентов заочной формы обучения. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2011.
3. Коган В.Б., Фридман В.М., Кафаров В.В. Равновесие между жидкостью и паром. – М. – Л.: Наука, 1966. – Кн.1,2. – 1426 с.
4. Hirata M., Ohe S., Nagahama R. Computer Aided Data Book of Vapor – Liquid Equilibria. – Tokyo, 1975. – 933 p.
5. Data of Selective Solvents: DMFA – NMC – NMP/ G.Hradetzky, I.Hammerl, W.Kisan, K.Weher, H.-J. Bittrich. – Berlin, 1989. – 360 p.
6. Данные по равновесию жидкость – пар в углеводородных системах, содержащих С1, N, O – элементы/ Э.П.Бабаева, Н.А.Бессараб, Л.М.Кузнецова и др. – Ч.II. – М.: НИИТЭХим, 1991. – 219 с.
7. Щербина А.Э. Селективность разделения углеводородов бинарными растворителями. Дисс. ... д-ра хим.наук. – Минск, 1987.
8. Справочник химика. Т.1 – Л.: Химия, 1971. – 1072 с.
9. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
10. Diky J., Šepráková M., Paulech J.//Chem. zvesti. – 1957. – V.11. – P. 461 – 466.
11. Munday E.V., Mullins J.C., Edie D.D.//J. Chem. Eng. Data. – 1980. – V.25, N3. – P. 191-194.
12. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химической технологии. Ч1,2. – М.: Мир, 1989. 664 с.

Дополнительная

1. Гайле А.А. Теоретические основы процессов разделения с использованием селективных растворителей: учебное пособие. – СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009. –77 с.
2. Гайле А.А. Процессы разделения нефтепродуктов и смесей органических веществ с использованием селективных растворителей (Азеотропная и экстрактивная ректификация, экстракция): учебное пособие. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2010. – 176 с.
3. Химия нефти и газа: Учеб. для вузов/А.И.Богомолов, А.А.Гайле, В.В.Громова и др. – СПб: Химия, 1995. – 448 с.
4. Черножуков Н.И. Технология переработки нефти и газа. Часть 3. Очистка и разделение нефтяного сырья, производство товарных нефтепродуктов. – М.: Химия, 1978. – 423 с.
5. Гайле А.А., Сомов В.Е., Залищевский Г.Д. Селективные растворители. Разделение и очистка углеводородсодержащего сырья. – СПб.: Химиздат, 2008. – 736 с.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ	3
Контрольная работа N1	4
Пример 1	22
Приложение I	34
Приложение II	35
Контрольная работа N2.....	36
Пример 2.....	46
Контрольная работа N3.....	
Часть I	50
Часть II. Тестовые вопросы	53
Вопросы по темам курса	60
Экзаменационные вопросы.....	67
Литература	69

Кафедра технологии нефтехимических и углехимических производств

**ПРОЦЕССЫ РАЗДЕЛЕНИЯ И ОЧИСТКИ
ПРОДУКТОВ ПЕРЕРАБОТКИ НЕФТИ И ГАЗА**

Методические указания
для студентов заочной формы обучения

Александр Александрович ГАЙЛЕ

Отпечатано с оригинал-макета. Формат 60х90 1/16

Печ.л. Тираж экз.

Зак N от « » « » 2011

Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(Технический университет)

190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26